

Rohemissionsmodellierung auf Basis detaillierter Chemie

Von der Fakultät für Umweltwissenschaften und Verfahrenstechnik
der Brandenburgischen Technischen Universität Cottbus-Senftenberg zur Erlangung des
akademischen Grades eines Doktor-Ingenieurs
genehmigte Dissertation

vorgelegt von

**Diplom-Ingenieur
Galin Nakov**

aus Burgas, Bulgarien

Gutachter:	Prof. Dr.-Ing. Fabian Mauß
Gutachter:	Univ.-Prof. Dr.-Ing. habil. Günter Merker
Tag der mündlichen Prüfung:	4. Juni 2014

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit im Forschungsbereich Verbrennungsmotorische Antriebe der Daimler AG in Stuttgart-Untertürkheim sowie am Lehrstuhl Thermodynamik/Thermische Verfahrenstechnik der BTU Cottbus.

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Fabian Mauß möchte ich mich für das Ermöglichen dieser Arbeit, die wertvollen Anregungen und die Übernahme des Hauptreferats ganz herzlich bedanken. Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. G. P. Merker danke ich für die interessierte Übernahme des Korreferats.

Mein besonderer Dank gilt meinem Betreuer, Herrn Dr.-Ing. C. Krüger, und Herrn Dr.-Ing. R. Steiner, der den Abschluss dieser Arbeit überhaupt ermöglichte.

Ein entscheidender Beitrag für das Gelingen der Arbeit wurde von Herrn Dipl. Ing. P. Wenzel geleistet, dem ich an dieser Stelle für seine guten Ideen und seine ständige Unterstützung herzlich danken möchte. Außerdem danke ich meinen Kolleginnen und Kollegen - unter Hervorhebung von Frau Dipl.-Ing. K. Nording - für die hervorragende Zusammenarbeit.

Abschließend möchte ich mich bei meiner Familie und insbesondere bei meiner Ehefrau Bozhana für ihre unermüdliche Unterstützung bedanken.

Weinstadt, im April 2014

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur und Abkürzungen	1
1. Einleitung	5
1.1. Hintergrund	5
1.2. Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	7
2. Theoretische Grundlagen der Emissionsbildung bei motorischen Brennverfahren	9
2.1. Phänomenologie der dieselmotorischen Verbrennung	9
2.1.1. Einspritzung, Strahlausbreitung und Gemischbildung	10
2.1.2. Verdampfung	12
2.1.3. Selbstzündung	14
2.1.4. Verbrennung	15
2.1.5. Thermodynamische Verbrennungsanalyse	17
2.2. Phänomenologie der Schadstoffbildung im Dieselmotor	19
2.2.1. Ruß	19
2.2.2. Stickoxide (NO _x)	22
2.2.3. Kohlenmonoxid (CO)	22
2.2.4. Unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC)	23
2.3. Einfluss der Kraftstoffeigenschaften auf die Emissionsbildung	24
2.4. Diskussion der Emissionsbildung bei Dieselmotoren	27
3. Modellierung dieselmotorischer Prozesse	32
3.1. Allgemeine Erhaltungsgleichungen für turbulente reaktive Strömungen	32
3.2. Modellierung des turbulenten Mischungszustandes	36
3.3. Modellierung der Einspritzung und Gemischbildung	39
3.4. Modellierung der Selbstzündung	41
3.5. Modellierung Verbrennung	42
4. Stand der Technik Emissionsmodellierung	44
4.1. Rußphänomenologie	44
4.1.1. Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK)	45
4.1.2. Die Entstehung von Ruß	47
4.2. Rußmodellierung	48
4.2.1. Empirische Mittelwertmodelle	51
4.2.2. Semi-empirische Modelle	56

4.2.3.	Detaillierte Rußmodelle	59
4.3.	NO _x -Modellierung	61
4.3.1.	Thermisches NO (Zeldovich-NO)	61
4.3.2.	Promptes NO (Fenimore-NO)	64
4.3.3.	Über N ₂ O erzeugtes NO	66
4.3.4.	NO-Bildung aus dem im Kraftstoff gebundenen Stickstoff	66
4.3.5.	NO ₂ im Abgas	66
4.4.	Chemie-Turbulenz-Kopplung	67
4.4.1.	Die Flamelet Transformation	67
4.4.2.	RIF-Modell	71
4.4.3.	Multiple-RIF-Modell	74
4.4.4.	CMC-Modell	79
5.	Emissionsmodellierung	85
5.1.	Reaktionskinetik	87
5.1.1.	Gasphase	87
5.1.2.	Ruß	88
5.1.3.	Stickoxide	89
5.2.	Flamelet-Bibliothek und Mathematische Anpassung	90
5.3.	Kopplung zum CFD-Code	93
5.4.	Acetylen-Feedback	99
5.5.	Temperatur-Profil-Ansatz (TP-Ansatz)	100
6.	Validierung der Modelle	106
6.1.	Messdaten	106
6.2.	Kriterien zur Bewertung der Verbrennungssimulation	109
6.2.1.	CFD-Setup	109
6.2.2.	Qualität der Verbrennungssimulation	113
6.3.	Globale Ergebnisse	115
6.3.1.	Rußsimulationsergebnisse bei AGR-Variation	115
6.3.2.	NO _x -Simulationsergebnisse bei AGR-Variation	119
6.3.3.	Rußsimulationsergebnisse bei Spritzbeginnvariation	121
6.3.4.	NO _x -Simulationsergebnisse bei Spritzbeginnvariation	123
6.3.5.	Rußsimulationsergebnisse bei Variation der hydraulischen Pause zwischen Voreinspritzung und Haupteinspritzung	124
6.4.	Lokale Ergebnisse	127
6.4.1.	Plausibilisierung der lokalen Ergebnisse	127
6.4.2.	Vergleich mit Transparentmotoraufnahmen	129
6.4.3.	Vergleich mit KL-Verläufen	136
6.5.	Eignung Steady-State-Flamelet-Ansatz zur dieselmotorischen Emissionssimulation	139
6.6.	Modellapplikation	140
6.6.1.	Analyse der Rußphänomene bei einer Spritzbeginnvariation	141
6.6.2.	Analyse der Rußphänomene bei einer AGR-Variation	144

6.6.3. Sensitivität Verbrennungsnetz: Vergleich zwischen Sektor und Vollnetz	149
6.6.4. Sensitivitätsanalyse CFD-Setup	155
6.6.4.1. Einfluss Quetschspalthöhe	155
6.6.4.2. Einfluss Spritzbeginn	157
7. Zusammenfassung und Ausblick	159
7.1. Zusammenfassung	159
7.2. Ausblick	161
Literaturverzeichnis	162
Anhang	175
A. Verbrennungsgeräusch	175
B. Bestimmung KL	177

Nomenklatur und Abkürzungen

Lateinische Buchstaben

Formelzeichen	Einheit	Bedeutung
A_f	[-]	Modellkonstante Hiroyasu
A_O	[-]	Modellkonstante Hiroyasu
$A_{W,\varphi}$	[m^2]	Brennraumoberfläche
c, n	[-]	Modellparameter
c_p	[J/K]	Wärmekapazität
C_s	[kg/m^3]	Rußmassenkonzentration
Da	[-]	Damköhler-Zahl
D	-	Durchmesser oder Diffusionskoeffizient
D_{soot}	[nm]	Rußpartikeldurchmesser
E	[J]	Aktivierungsenergie
E_f	[J]	Aktivierungsenergie Rußbildung
E_O	[J]	Aktivierungsenergie Rußoxidation
$F_{m,j}$	[-]	Diffusionsfluss
f_v	[-]	Rußpartikeldichte
h	[J/kg]	Spezifische Enthalpie
H_m	[J/mol]	Bildungsenthalpie der Mischungskomponente m
h_t	[J/kg]	Thermische Enthalpie
Le	[-]	Lewis Zahl
k	[J/mol]	Turbulente kinetische Energie
k_i	[-]	Reaktionskonstante
m	[kg]	Masse
n	[-]	Anzahl
L	[m]	Integrale turbulente Längenskala
M_c	[J]	Molekulare Masse des Kohlenstoffatoms
m_{fuel}	[kg]	Masse verdampften Kraftstoffs
m_{soot}	[kg]	Rußmasse
N_A	[mol^{-1}]	Avogadro-Zahl
p	[Pa]	Druck
P_u	[-]	Partialdruck des unverbrannten Kraftstoffs
\dot{Q}	[1/s]	Quellterm
Q_a	[J]	Abgaswärme

R_F	[-]	Reflektometerwert des ungeschwärzten FSN-Papiers
R_P	[-]	Reflektometerwert der FSN-Probe
R_R	[-]	Relative Helligkeit der FSN-Probe
Sc	[-]	Schmidt-Zahl
T	[K]	Temperatur
t	[s]	Zeit
$T_{G,\varphi}$	[K]	Mittlere Gastemperatur
T_L	[K]	Lufttemperatur
T_u	[K]	Lokale Temperatur
T_W	[K]	Mittlere Temperatur der Brennraumwand
U	[J]	Innere Energie
u_i	[m/s]	Geschwindigkeit
\vec{u}	-	Geschwindigkeitsvektor
V	[mm^3]	Hubvolumen
V_{NTP}	[m^3]	Zylinderladungsvolumen bei normalen Bedingungen
V_u	[m^3]	Volumen der Rußbildungszone
W	[J]	Volumenänderungsarbeit
X	[-]	Molenbruch
\vec{x}	-	Ortsvektor (x,y,z)
Y_m	[-]	Massenbruch der Mischungskomponente m
Z	[-]	Mischungsbruch
Z_j	[-]	Elementmassenbruch
Z_{st}	[-]	Stöchiometrischer Mischungsbruch

Griechische Buchstaben

Formelzeichen	Einheit	Bedeutung
$\alpha_{W,\varphi}$	[W/m^2K]	Wärmeübergangszahl
Γ	-	Allgemeine Transportkonstante oder Gamma-Funktion
δ	-	Kronecker-Delta
ϵ	-	Turbulente Dissipationsrate
λ	[-]	Verbrennungsluftverhältnis
μ	[$kg/m \cdot s$]	Dynamische Viskosität
μ_t	[$kg/m \cdot s$]	Turbulente dynamische Viskosität
ν	[$kg/m \cdot s$]	Turbulente Viskosität
ω	[1/s]	Chemischer Quellterm
ρ	[kg/m^3]	Dichte
ρ_{soot}	[g/mol]	Rußpartikeldichte
τ_{chem}	[-]	Chemische Zeitskala
τ_{ij}	[-]	Spannungstensor-komponenten
τ_{turb}	[-]	Turbulente Zeitskala
φ	[°]	Grad Kurbelwinkel

χ [-] Skalare Dissipationsrate oder unverbranntes Luftverhältnis

Sonstige Zeichen

Formelzeichen

∇

$()_b$

$()_{Le}$

$()_r$

$()_w$

Bedeutung

Nabla-Operator

Kraftstoff

Leckage

Strahlung

Wand

1. Einleitung

1.1. Hintergrund

Der Fahrzeugbau ist mit einem weltweiten Absatz von 1889.84 Mrd. EUR im Jahr 2008 [1] eine der führenden Industriebranchen. Die treibende Kraft hinter dem stetigen Wachstum dieses Sektors ist der Mobilitätswunsch des Einzelnen sowie die wirtschaftliche Bedeutung von Personen- und Güterverkehr. Die global steigende Anzahl von Fahrzeugen, die von einem Verbrennungsmotor angetrieben werden, führt gleichzeitig zu einer beträchtlichen Umweltbelastung durch Schadstoffe wie Ruß, Stickoxide (NO_x) und unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HCs), aber auch durch das für den Treibhauseffekt verantwortliche Kohlendioxid (CO_2). Bedingt durch diese Entwicklung werden weltweit immer strengere Emissionsvorschriften eingeführt. In Abbildung 1.1 ist beispielhaft die Entwicklung der Schadstoffgrenzwerte für Ruß und NO_x für PKW in Europa dargestellt.

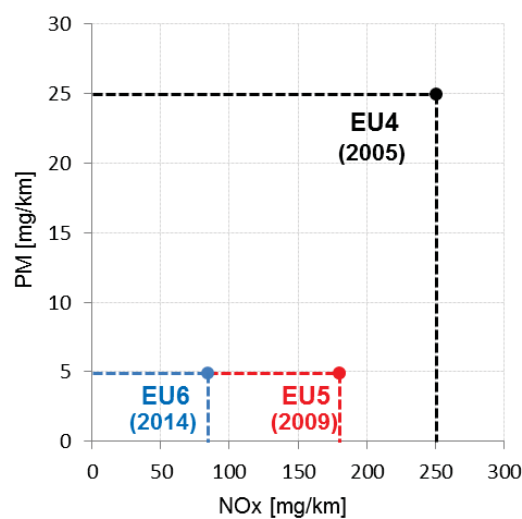


Abbildung 1.1.: Emissionsgrenzwerte für PKW in Europa [2]

Mit der Einführung der Euro 6-Grenzwerte ab 2014 verlangt die europäische Gesetzgebung

am Beispiel der PKW-Dieselmotoren eine Reduzierung der Partikelmassenemissionen um 80% auf 0.005 g/km im Vergleich zur Euro 4-Norm, die bis Jahr 2009 gültig war. Um diese strengen Emissionsgrenzen erfüllen zu können wurden in den vergangenen Jahren diverse Technologien entwickelt. Erwähnenswert sind dabei die Abgasrückführung und insbesondere die Common-Rail-Einspritzung, die hohe Einspritzdrücke zur Verbesserung der Gemischaufbereitung und getaktete Einspritzungen für schadstoffoptimierte Einspritzstrategien ermöglicht. Die Einhaltung der heutigen Normwerte kann jedoch nur mit aufwändigen und kostspieligen Abgasnachbehandlungssystemen erreicht werden. Gemessen an den extrem niedrigen zukünftigen Abgasgrenzwerten (s. Abb. 1.1) stoßen allerdings auch diese Technologien an ihre Grenzen. Bevor sie also zum Einsatz kommen sollte die Entstehung der Rohemissionen durch innermotorische Maßnahmen weitestgehend unterbunden werden.

Für den Kraftstoffverbrauch, von dem die CO₂-Emission unmittelbar abhängt, gibt es bisher keine gesetzlichen Normen. Da der Verkehr mit einem Anteil von 15.9% [3] erheblich zu den CO₂-Gesamtemissionen beiträgt, streben Gesetzgeber weltweit eine Senkung des verkehrsbedingten CO₂-Ausstoßes an. So hat die EU-Kommission 2007 einen Vorschlag zur Festsetzung von Emissionsnormen für neue PKW vorgelegt, der darauf abzielt, die streckenbezogenen CO₂-Emissionen bis zum Jahr 2015 auf 130 g/km zu verringern [4]. Der Vorschlag sieht vor, dass Hersteller Strafzahlungen leisten müssen, falls der CO₂-Durchschnittswert der jeweiligen Fahrzeugflotte einen bestimmten Zielwert übersteigt. Des Weiteren wird die Gesellschaft auf die Bedeutung der verkehrsbedingten CO₂-Emissionen im Hinblick auf das Erreichen der Klimaschutzziele zunehmend sensibilisiert. Diese Entwicklungen haben zur Folge, dass die Kraftstoffeffizienz ein entscheidender Wettbewerbsvorteil auf dem Fahrzeugmarkt geworden ist.

Vor dem Hintergrund der genannten legislativen Vorschriften und der endlichen Erdölreserven wird bereits seit längerer Zeit intensiv an der Optimierung des Verbrennungsmotors geforscht. Dabei spielen neue emissionsarme Brennverfahren gepaart mit neuen effizienten Antriebskonzepten eine wichtige Rolle. Die zunehmende Komplexität der innermotorischen Vorgänge und die durch den intensiven Wettbewerb angestrebte Reduktion von Kosten und Entwicklungszeiten verlangen nach neuen Entwicklungswerkzeugen. Die dreidimensionale Simulation bietet hier eine attraktive Perspektive zur Vorausberechnung des Kraftstoffverbrauchs und der Schadstoffemissionen. Aufgrund des hohen Detaillierungsgrads erfordert sie im Vergleich zu den null- und eindimensionalen Programmen beträchtlichen Rechenaufwand, liefert aber dafür als einziges Simulationswerkzeug nicht nur globale, sondern auch lokale Kenngrößen. Insbesondere die Schadstoffbildung ist ein lokaler Vorgang, der nur dreidimensional mit ausreichender Genauigkeit simuliert werden kann.

Die Visualisierung der 3D-Simulationsergebnisse liefert zudem einen wichtigen Beitrag zum Verständnis innermotorischer Phänomene. Hat sich der Einsatz der 3D-Simulation anfangs primär auf nicht-reagierenden Strömungen konzentriert, wird sie heutzutage zunehmend bei reagierenden Strömungen angewandt. Hier hat sie bei entsprechender Vorhersagefähigkeit der Verbrennungs- und Schadstoffmodelle das Potenzial, noch in der frühen Konzeptphase der Motorenentwicklung eingesetzt zu werden.

1.2. Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Modellierung der Ruß- und NO_x-Rohemissionen im Dieselmotor. Zu diesem Zweck wurde ein sogenannter Steady-State-Flamelet-Ansatz angewandt. Dabei werden die Quellterme der Schadstoffchemie mit Hilfe der Flamelets ermittelt. Dieser Einsatz (s. Kapitel 5) wird durch die Annahme begründet, dass die chemischen Prozesse, die für die Schadstoffbildung relevant sind, langsam im Vergleich zu den turbulenten Längenskalen im Brennraum sind. Diese Annahme ermöglicht weiterhin eine Vorausberechnung und Tabellierung der Reaktionsraten der jeweiligen Schadstoffe, welche zu einer Steigerung der CPU- und Arbeitsspeichereffizienz führt. Letztere kann weiter gesteigert werden, indem die Reaktionsraten als mathematische β -Funktionen modelliert werden. Die CPU- und Arbeitsspeichereffizienz bei gleichzeitiger Berücksichtigung der detaillierten Schadstoffchemie stellt einen der wesentlichen Vorteile des Steady-State-Ansatzes dar. Dieser Ansatz stellt aber auch gewisse Herausforderungen bei Anwendung in der verbrennungsmotorischen Simulation. Darunter ist in erster Linie die implizite Annahme der Stationarität der gesamten Verbrennungsschemie zu erwähnen, die in einem Dieselmotor nicht erfüllt ist. Daher werden die Oxidationsprozesse mit Hilfe anderer Verfahren berechnet. Die Schadstoffbildung setzt erst in einer späten Phase der Verbrennung ein, zu der die Oxidationschemie nahezu stationär geworden ist. Außerdem sind die Anforderungen an die Genauigkeit der bereits angesprochenen mathematischen Modellierung insbesondere im Bereich der Stöchiometrie sehr hoch. Vor diesem Hintergrund soll diese Arbeit die Frage beantworten, ob der Steady-State-Flamelet-Ansatz für Schadstoffmodellierung in der dieselmotorischen Verbrennungssimulation geeignet ist.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Rohemissionsmodelle wurden in ein 3D-CFD-Simulationspaket integriert, das die 3D-Strömungssimulation des gesamten Prozesses der dieselmotorischen Verbrennung inklusive Einspritzung, Zündung und Wärmefreisetzung behandelt. Wesentliche Zielsetzung der Arbeit ist die Sicherstellung der Vorhersagefähigkeit des Simulationspakets bei gleichzeitig wirtschaftlichem Rechenaufwand. Dies sind Voraussetzungen, die das CFD-Simulationspaket erfüllen soll, um als Entwicklungstool zur Vorauslegung und Analyse von neuen Brennverfahren und neuen Brennraumgeometrien hinsichtlich Verbrauch und Ruß- bzw. NO_x-Emissionen dienen zu können.

Das Simulationspaket wurde für Dieselmotoren validiert. In dieser Arbeit soll eine Methodik festgelegt werden, wie die zur Validierung herangezogenen Messdaten zu plausibilisieren sind. Weiterhin sollen Anforderungen an die Qualität der Verbrennungssimulation aufgestellt werden, die für eine zuverlässige Schadstoffberechnung erfüllt werden müssen. Im Rahmen der Modellvalidierung sollen Sensitivitäten bezüglich Randbedingungen wie Netzqualität und -topologie festgestellt und charakterisiert werden. Abschließend soll das gesamte Simulationspaket mit dem Ziel appliziert werden, die Phänomenologie der motorischen Emissionsbildungsmechanismen zu analysieren und zu verstehen.

Der Aufbau dieser Arbeit gliedert sich folgendermaßen: In Kapitel 2 wird die Phänomenologie der Emissionsbildung bei motorischen Brennverfahren beschrieben. Die theoretischen Grundlagen der verbrennungsmotorischen Modellierung werden in Kapitel 3 vorgestellt. In Kapitel 4 wird ein Überblick über den heutigen Stand der Technik in der

dieselmotorischen Emissionsmodellierung gegeben. Kapitel 5 stellt das Ruß- und das NO_x-Modell auf Basis des Steady-State-Flamelet-Ansatzes vor. Die Validierung der beiden Rohemissionsmodelle ist in Kapitel 6 dargestellt. Die 3D-Simulationsergebnisse werden dazu PKW-Motor-Messungen gegenübergestellt. Die experimentellen Daten umfassen neben integralen Druckverläufen auch Hochgeschwindigkeitsaufnahmen des Rußeigenleuchtens im Brennraum. Die Arbeit ist mit der Zusammenfassung und dem Ausblick in Kapitel 7 abgeschlossen.

2. Theoretische Grundlagen der Emissionsbildung bei motorischen Brennverfahren

2.1. Phänomenologie der dieselmotorischen Verbrennung

Nach [5] kann die dieselmotorische Gemischbildung und Verbrennung in eine Reihe von simultan ablaufenden Teilprozessen unterteilt werden (s. Abb. 2.1). Im Folgenden wird die Phänomenologie der einzelnen Prozesse erläutert.



Abbildung 2.1.: Teilprozesse der dieselmotorischen Gemischbildung und Verbrennung [5]

2.1.1. Einspritzung, Strahlausbreitung und Gemischbildung

Die Gemischbildung im Dieselmotor kann nicht unabhängig von der Strahlausbreitung und der Verbrennung betrachtet werden. Die dieselmotorische Verbrennung zeichnet sich gerade dadurch aus, dass diese drei Prozesse - Strahlausbreitung, Gemischbildung und Verbrennung - teilweise simultan ablaufen. In modernen Dieselmotoren wird der Kraftstoff gegen Ende der Verdichtung unter hohem Druck direkt in den Brennraum eingespritzt. Man spricht dabei von Dieselmotoren mit Direkteinspritzung oder auch DI-Dieselmotoren. Die direkten Einspritzverfahren haben im Vergleich zu den Indirekten einen deutlich besseren thermodynamischen Wirkungsgrad, jedoch wegen des hohen Druckanstiegs zu Beginn der Verbrennung ein wesentlich höheres Verbrennungsgeräusch [5]. Die Einspritzung im DI-Dieselmotor erfolgt in der Regel über eine zentral angeordnete Mehrlochdüse. Der eingespritzte Kraftstoff verdampft, vermischt sich mit dem umgebenden heißen Gas und entzündet sich von selbst innerhalb kurzer Zeit. Der für die Vermischung von Brennstoff und Luft notwendige Impuls wird zum großen Teil durch die Einspritzstrahlen in den Brennraum eingebracht.

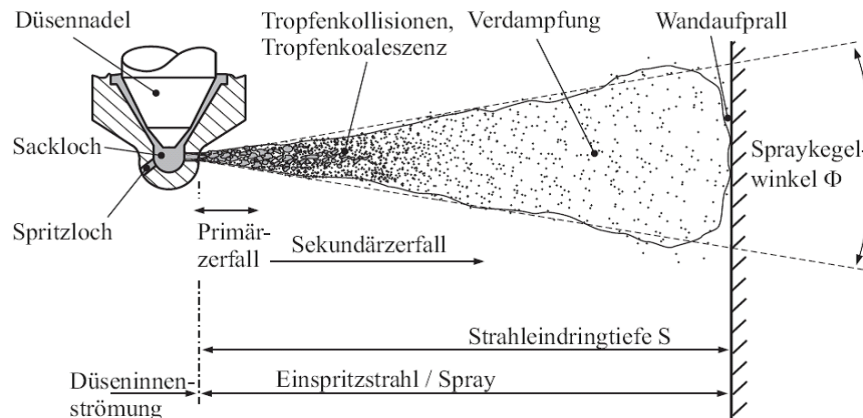


Abbildung 2.2.: Schematische Darstellung der Strahlausbreitung [5],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Merker, G. P., Stiesch, G., Otto, F.: Grundlagen Verbrennungsmotoren, 4. Motorische Verbrennung, p. 135, Abb. 4-18, Vieweg+Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009

Nach der Einspritzung zerfällt der Kraftstoffstrahl aufgrund der hohen Relativgeschwindigkeit zur umgebenden Luft in kleine Tropfen (s. Abb. 2.2). Nun kann der Strahl in zwei Zonen unterteilt werden. Die erste Zone ist der sogenannte Strahlkern, der aus größeren Tropfen höherer Geschwindigkeit besteht. Die zweite Zone ist ein diesen Kern umgebender Strahlmantel aus feinen Tropfen mit höherem Luftanteil und entsprechend abnehmender Geschwindigkeit (s. Abb. 2.3). Beim Ausbreiten des keulenförmigen Strahls wird der Strahlmantel durch zerfallende Tropfen des Kerns ständig ergänzt, während im Kern neu eingespritzte Teilchen nachstoßen.

Die Strahlausbreitung wird entscheidend durch Einspritzparameter wie Einspritzdruck und -zeitpunkt, Düsenlochanzahl und -durchmesser, usw. bestimmt. Ziel der heutigen Entwick-

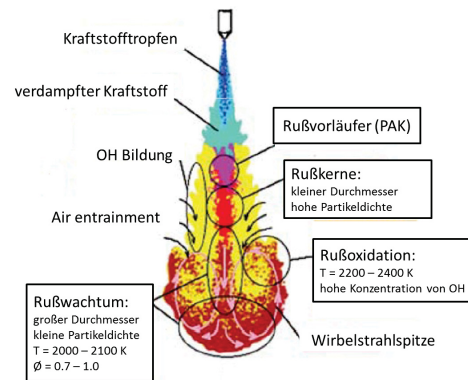


Abbildung 2.3.: Schematische Darstellung des Einspritzstrahls [122],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch SAGE Publications Ltd. Kosaka, H., Aizawa, T., Kamimoto, T.: Two-Dimensional Imaging of Ignition and Soot Formation Processes in a Diesel Flame, International Journal of Engine Research, Vol. 6, No.1, p. 21-42, 2005

lung von Einspritzsystemen ist die schnelle Verbrennung zu unterstützen. Vorteilhaft in der Hinsicht sind vor allem hohe Einspritzdrücke. Damit lassen sich hohe Einspritzmengen in sehr kurzer Zeit in den Brennraum einbringen. Dies ist wesentliche Voraussetzung für eine kurze Brenndauer, die sich positiv auf den thermodynamischen Wirkungsgrad auswirkt. Hohe Einspritzdrücke führen außerdem zu hohen relativen Geschwindigkeiten zwischen Kraftstoff und Luft, wodurch der Strahlzerfall beschleunigt wird. Dieser Effekt kann durch kleine Düsenlochdurchmesser verstärkt werden, womit der Durchmesser der Kraftstofftropfen verringert werden kann. Der schnelle Strahlzerfall und die kleinen Tropfendurchmesser verbessern die Güte der Gemischbildung, die erheblich die Schadstoffbildung beeinflusst.

Mit der bisher beschriebenen Strahlausbreitung beginnt die tatsächliche Gemischbildung. Diese wird in den nächsten Phasen des Arbeitszyklus maßgeblich von der Strahl-Wand-Interaktion beeinflusst. Das wichtigste Ziel der modernen Dieselmotorenentwicklung ist es, die Düsen-Mulden-Kombination so auszulegen, dass Luft und Kraftstoff möglichst homogen gemischt werden, wodurch eine schadstoffarme Verbrennung begünstigt wird. Düsen- und Muldengeometrie sollen deswegen so gestaltet werden, dass sich der Kraftstoff möglichst gleichmäßig zwischen Kolbenmulde und Quetschspalt verteilt. Somit entstehen zwei Gemischwolken, die magerer sind im Vergleich zu einer einzigen Gemischwolke, die sich nur in der Mulde oder nur im Quetschspalt befindet. Somit findet die Wärmefreisetzung sowohl in der Mulde als auch in dem Quetschspalt statt, wodurch zu hohe lokale Temperaturen vermieden werden. Durch die Auslegung der Düsen-Mulden-Kombination kann damit die Neigung zu Schadstoffbildung erheblich beeinflusst werden.

Obwohl die turbulente kinetische Energie der Einspritzstrahlen deutlich über der kinetischen Energie der Verbrennungsluft liegt, spielt auch das Strömungsfeld im Zylinder eine wichtige Rolle bei der Gemischbildung. Je nach Brennverfahren und Brennraumgeometrie werden Drall- und Quetschspaltströmung gezielt eingesetzt, um eine bessere Luftausnutzung zu erreichen. Die Drall- und Quetschspaltströmung sind schematisch in Abb. 2.4a dargestellt. Die Drallströmung lenkt die Einspritzstrahlen so ab, dass eine bessere Er-

fassung der Luftbereiche zwischen den einzelnen Einspritzstrahlen erreicht wird. Dies ist deutlich in Abb. 2.4b erkennbar. Bei einer zu starken Drallströmung besteht allerdings die Gefahr der Einspritzstrahlverwehung (s. Abb. 2.4a), die in fette Gemischbereiche resultiert. Die Ablenkung der Einspritzstrahlen ist insbesondere bei Brennverfahren mit Voreinspritzung (VE) zu beachten, die bei modernen PKW-Dieselmotoren aus Geräuschgründen nicht mehr wegzudenken ist. Hierbei soll die Pause zwischen Voreinspritzung und Haupteinspritzung (HE) so gewählt werden, dass die Strahlen der Haupteinspritzung jeweils zwischen zwei Gemischwolken aus der Voreinspritzung platziert werden. Der Kraftstoff, der mit der Haupteinspritzung in den Brennraum eingebracht wird, gelangt sonst in heiße fette Zonen. Das Verbrennungsgas in dem sogenannten Quetschspalt (eng. squish) wird bei der Kolbenaufwärtsbewegung zunächst in die Kolbenmulde verdrängt. Bei der Kolbenabwärtsbewegung entsteht somit Unterdruck im Quetschspaltbereich, weshalb das Verbrennungsgemisch in den Quetschspalt angesaugt wird. Dieser Vorgang begünstigt das Ausmagern der Zylinderladung. Die Gemischbildung in der Expansionsphase wird außerdem durch die voranschreitende Verbrennung unterstützt. Aufgrund der exothermen Reaktionen zwischen Verbrennungsgas und Kraftstoff steigen Druck und Temperatur lokal in der Reaktionszone. Die daraus resultierende Diffusion begünstigt die Durchmischung von fetten und mageren Bereichen.

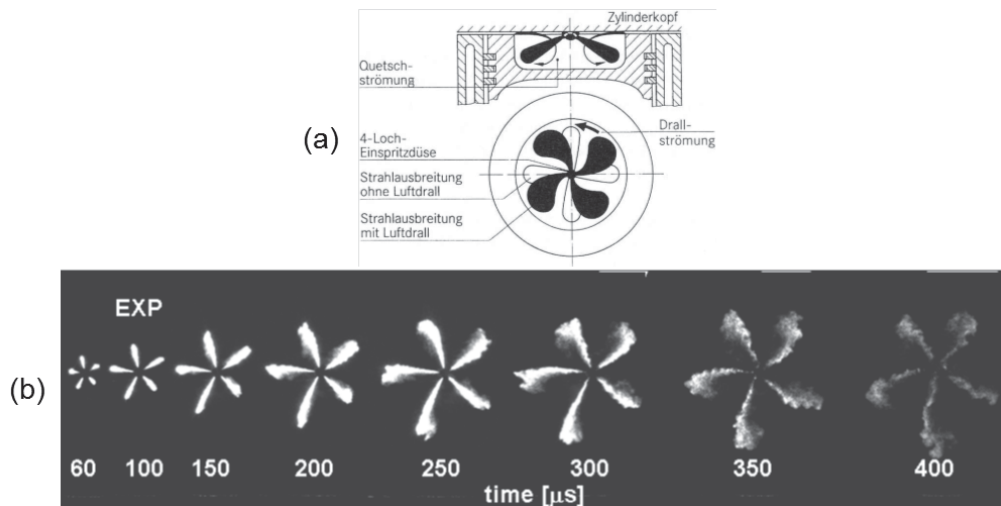


Abbildung 2.4.: (a) Schematische Darstellung des Zusammenspiels zwischen Einspritzung und Luftbewegung [6]
 (b) Einspritzstrahlverwehung durch Drallströmung in einem Dieselmotor [133],
 Copyright ©2007 SAE International. Reprinted with permission.

2.1.2. Verdampfung

Die Verdampfung des Kraftstoffes ist ein wichtiger Teilprozess der Dieselverbrennung. Sie ist entscheidend für die Gemischbildung, die Selbstzündung und die anschließende Verbrennung und Schadstoffbildung. Eine wichtige Größe, die die Kraftstoffverdampfung in Dieselmotoren und ähnlichen Aufbauten (Einspritzkammer) charakterisiert, ist die Eindringtiefe des Flüssigkeitsstrahls. Diese beeinflusst maßgeblich die Flammenabhebelänge

(engl. lift-off length), die den Abstand zwischen Düsenaustritt und dem ersten Zündort bezeichnet. Je näher die Flamme an der Düse ist, desto fetter sind die Zonen, in denen die Verbrennung stattfindet. Damit kommt der Kraftstoffverdampfung eine entscheidende Bedeutung hinsichtlich Schadstoffbildung zu.

Wie bereits erwähnt laufen Einspritzung und Kraftstoffverdampfung simultan ab. Am Strahlrand vermischen sich die Brennstofftropfen mit der heißen Luft im Brennraum - ein Phänomen, das auch Air Entrainment genannt wird (s. Abb. 2.3). Dadurch werden die Tropfen infolge von konvektiver Wärmeübertragung aufgeheizt und der Brennstoff beginnt schließlich zu verdampfen. Die weiter ablaufende Einspritzung bewirkt weitere Ansaugung von heißer Luft und damit ein weiteres Erwärmen des bereits verdampften Kraftstoffes. Es ergibt sich ein stark inhomogenes Gemisch: im Strahlmantel ist das Gemisch sehr mager, während es im Strahlkern sehr fett ist (s. Abb. 2.3). Neben der Temperatur wird die Rate der Tropfenverdampfung durch die Diffusion des Brennstoffs von der Tropfen-Oberfläche (hohe Dampfkonzentrationen) in die Tropfenumgebung (niedrige Dampfkonzentration) bestimmt [5]. Abbildung 2.5 stellt den charakteristischen Temperatur- und Konzentrationsverlauf im Tropfen, in der Grenzschicht und in der ungestörten Gasumgebung dar [7].

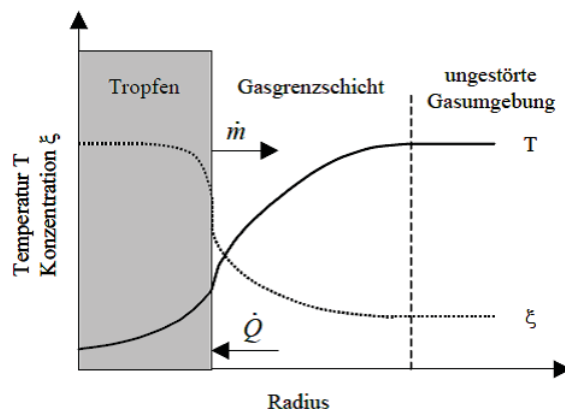


Abbildung 2.5.: Temperatur- und Konzentrationsverlauf in der Tropfenumgebung [7],
Nachdruck genehmigt von Dr. Blessing

Bedeutsam für die dieselmotorische Brennverfahrensentwicklung ist aber nicht unbedingt die Verdampfung einzelner Tropfen, sondern die Gesamtverdampfungsrate. Diese hängt von den Kraftstoffeigenschaften, den Einspritzparametern und den thermodynamischen Bedingungen des Arbeitsgases ab. Aufgrund ihrer Bedeutung für Verbrennung und Schadstoffbildung sind die genauen Zusammenhänge an dieser Stelle von großem Interesse. Dieses Forschungsfeld wurde maßgeblich von den Arbeiten von Siebers [136], [137] geprägt. In [136] bietet er einen umfassenden Überblick über die Sensibilitäten der Flüssigkeitseindringtiefe auf unterschiedliche Betriebsparameter an. Seine Untersuchungen führte er in einer Einspritzkammer unter Dieselmotor ähnlichen Bedingungen durch, womit seine Ergebnisse auch für die Brennverfahrensentwicklung bei Dieselmotoren Gültigkeit besitzen. Die Zusammenhänge, die dabei erkannt wurden, lassen sich wie folgt zusammenfassen [136]:

- Flüssigkeitseindringtiefe und Düsenlochdurchmesser weisen unabhängig von sonstigen Parametern einen linearen Zusammenhang auf.
- Mit steigender Arbeitsgasdichte oder –temperatur sinkt die Flüssigkeitseindringtiefe. Der Zusammenhang wird immer schwächer, je höher Arbeitsgasdichte oder –temperatur sind.
- Mit steigender Kraftstofftemperatur sinkt die Flüssigkeitseindringtiefe.
- Mit sinkender Kraftstoffflüchtigkeit steigt die Flüssigkeitseindringtiefe. Je höher die Arbeitsgastemperatur, desto schwächer ausgeprägt ist dieser Effekt. Der Anteil höher siedender Kraftstoffanteile bestimmt damit die Flüssigkeitseindringtiefe.
- Einspritzdruck und Konizität des Düsenlochs haben unabhängig von sonstigen Parametern keinen Einfluss auf die Flüssigkeitseindringtiefe.

Nach Analyse der festgestellten Zusammenhänge kam Siebers zu zwei sehr wichtigen Erkenntnissen bezüglich Kraftstoffverdampfung [136]. Erstens, die Kraftstoffverdampfung wird ausschließlich durch Air-Entrainment in den Einspritzstrahl kontrolliert. Unter Dieselmotor ähnlichen Bedingungen limitieren lokale Massen-, Impuls- und Energietransportraten zwischen den Phasen, die Strahlzerfall und Tropfenverdampfung kontrollieren, die Gesamtverdampfungsrate nicht. Im Falle des Dieselmotors ist die Kraftstoffverdampfung also mischungskontrolliert. Zweitens, hochflüchtige Anteile im Kraftstoff verdampfen als erste, die niedrigflüchtigen Anteile – als letzte. Damit bestimmen die niedrigflüchtigen Kraftstoffanteile die Flüssigkeitseindringtiefe. Aus den Erkenntnissen von Siebers in [136] lässt sich eine weitere, im Hinblick auf Betriebsstrategie positive Schlussfolgerung ziehen: eine Anhebung der Einspritzdrücke, die durchaus erwünscht ist, führt nicht zwingend zu dem unerwünschten Auftreffen von flüssigen Kraftstoffanteile auf Brennraumwände.

2.1.3. Selbstzündung

Die zeitliche Spanne zwischen Einspritzbeginn und dem ersten messbaren Druckerhöhung infolge der beginnenden Verbrennung wird Zündverzögerung genannt.

Der Prozess der Selbstzündung im Dieselmotor ist äußerst komplex und setzt sich aus vielen physikalischen und chemischen Teilprozessen zusammen. Die wesentlichen physikalischen Vorgänge sind die Zerstäubung des Brennstoffs, die Verdampfung und die Mischung von Brennstoffdampf und Luft bis zur Bildung eines zündfähigen Gemisches. Die chemischen Vorgänge umfassen die Vorreaktionen des verdampften Kraftstoffes mit dem Luftsauerstoff bis zur Selbstzündung, die je nach Kraftstoffzusammensetzung bei unterschiedlichen lokalen Luftverhältnissen erfolgt [5]. Die physikalischen und chemischen Prozesse laufen mit Beginn der Einspritzung teilweise zeitlich überlagert ab und beeinflussen sich dabei gegenseitig. Noch während des Verdampfens der ersten Brennstoffanteile beginnen chemische Vorreaktionen zwischen den Kraftstoff- und Sauerstoffmolekülen. Druck und Temperatur im Brennraum ändern sich aufgrund der andauernden Einspritzung sowie der Kolbenbewegung. Dies beeinflusst die weitere Aufbereitung und Verdampfung des eingebrachten Kraftstoffes sowie die sich fortsetzenden chemischen Vorreaktionen, welche schließlich zur Selbstzündung in der Gasphase führen [8].

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass der Zündverzug von der Mischungszeit, die den physikalischen Anteil der Selbstzündungsprozesse darstellt, und der Zündverzugszeit, die den chemischen Anteil dieser Prozesse repräsentiert [9], bestimmt wird. Die chemische Zündverzugszeit ihrerseits wird maßgeblich von Druck und Temperatur im Brennraum beeinflusst (s. Abb. 2.6).

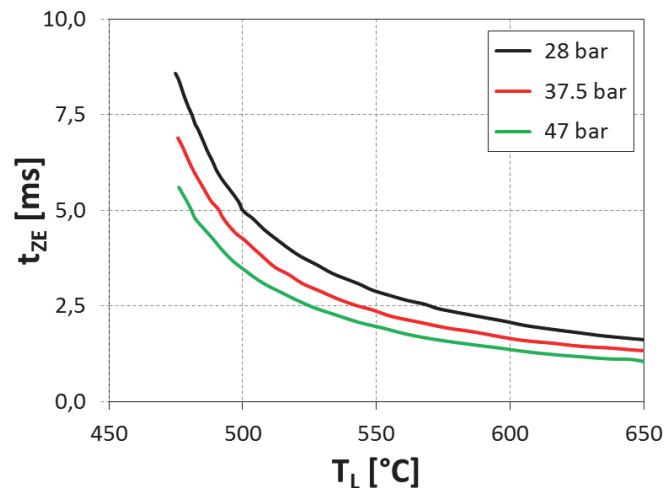


Abbildung 2.6.: Zündverzug im Dieselmotor [9]

Weitere Größen, die einen Einfluss auf den Zündverzug haben, sind die Zündwilligkeit des Kraftstoffes (Cetanzahl), die Temperatur der Brennraumwände und die Art des Mischungsvorganges im Brennraum.

Der Zeitpunkt der Zündung und damit die Zündverzugszeit werden letztendlich durch die Gemischzonen bestimmt, in denen als erstes ein brennbares Gemisch vorliegt [9]. Die Selbstzündung erfolgt dann zeitgleich in mehreren, räumlich getrennten Zonen des Brennraumes, welches auf die ungleichmäßige Temperatur- und Konzentrationsverteilung im Brennraum zurückzuführen ist. Je länger der Zündverzug, desto größer sind die Zonen, in denen die Selbstzündung stattfindet, und desto steiler sind die Druckgradienten infolge dieser explosionsartigen Verbrennung. Ein langer Zündverzug ist hinsichtlich schadstoffarmer Verbrennung durchaus erwünscht, da sich dadurch ein homogeneres Gemisch vor Brennbeginn einstellt.

2.1.4. Verbrennung

Mit der Selbstzündung schlägt die zuvor nicht-reagierende Brennraumströmung zu einer chemisch reagierenden Strömung um. Turbulente reaktive Strömungen werden dadurch charakterisiert, dass sie aus der Wechselwirkung zwischen strömungsmechanischen und chemischen Vorgängen resultieren. Geschwindigkeitsbestimmend für den Reaktionsablauf ist dabei immer der langsamere der beiden Prozesse. Ein geeignetes Maß für die Zeitskalen turbulenter reaktiver Strömungen ist die Damköhler-Zahl Da , die sie durch das Verhältnis

der turbulenten τ_{turb} zur chemischen Zeitskala τ_{chem} charakterisiert [10]:

$$Da = \frac{\tau_{\text{turb}}}{\tau_{\text{chem}}} \quad (2.1)$$

Sehr kleine Damköhler-Zahlen ($Da \ll 1$, d.h. $\tau_{\text{turb}} \ll \tau_{\text{chem}}$) bedeuten, dass die Mischung schneller abläuft als die chemischen Reaktionen. Demzufolge ist die Zeitskala des gesamten Vorgangs von der Chemie bestimmt (chemisch kontrolliert). Umgekehrt, bei sehr hohen Damköhler-Zahlen ($Da \gg 1$, d.h. $\tau_{\text{turb}} \gg \tau_{\text{chem}}$) verlaufen die chemischen Reaktionen um Größenordnungen schneller als die turbulenten Mischungsprozesse (mischungskontrolliert).

Der Verbrennungsablauf eines Dieselmotors kann durch die Damköhler-Zahl grob charakterisiert werden. Er lässt sich in folgende Zeitphasen einteilen:

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

Ein beispielhafter Brennverlauf eines DI-Dieselmotors wird in Abb. 2.7 dargestellt. Dazu eingetragen sind die Zeitfenster der unterschiedlichen reaktiven Phasen und die entsprechenden Damköhler-Zahl-Bereiche.

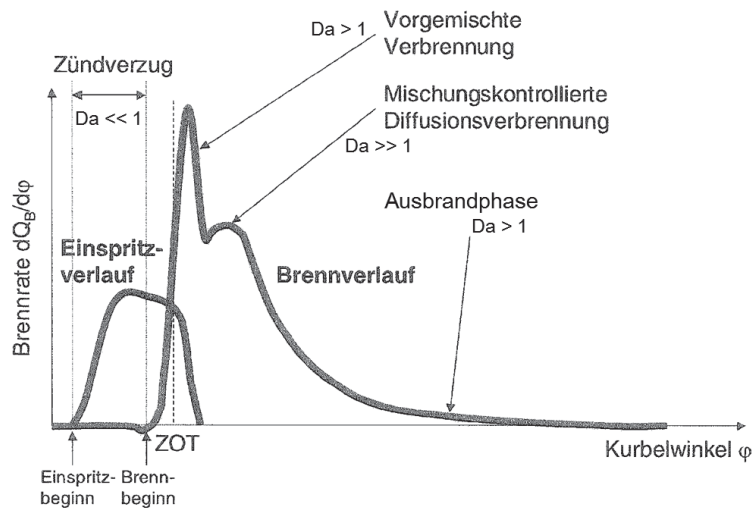


Abbildung 2.7.: Verbrennungsablauf des direkt einspritzenden Dieselmotors

Während der Zündverzugsphase bilden sich mehrere Zonen im Brennraum, die zündfähiges Gemisch beinhalten. Der Zündverzugszeit, die physikalisch und chemisch kontrolliert ist, folgt eine rasche Verbrennung des Gemisches in diesen Zonen, die vorgemischte Verbrennung oder Vormischverbrennung genannt wird [5]. Diese in der Regel zeitlich kurze Phase zeichnet sich durch hohe Wärmefreisetzungsraten und steile Druckgradienten aus.

Die Vormischverbrennung ist aufgrund der anfänglichen niedrigen Temperaturen und der hohen Turbulenzraten kinetisch kontrolliert [10].

Nachdem die Verbrennung der teilweise vorgemischten Zonen abgeschlossen ist, erfolgt der Übergang zur Diffusionsverbrennung. Die Gemischbildungsvorgänge dauern an und sind ausschlaggebend sowohl für den Verbrennungsablauf als auch für die Schadstoffbildung. Diese Vorgänge werden durch die Ladungsbewegung und die Turbulenz stark beeinflusst. Aufgrund der hohen Temperaturen und der damit verbundenen schnellen Reaktionszeiten verläuft die Diffusionsverbrennung mischungskontrolliert [5].

Gegen Ende der Verbrennung sind Druck und Temperatur in der Flammenfront soweit abgesunken, dass die Chemie im Vergleich zu den simultan ablaufenden Mischungsvorgängen langsam wird. Die Diffusionsverbrennung wird daher zunehmend reaktionskinetisch kontrolliert. Während der Ausbrandphase, in der die Wärmefreisetzungsraten kontinuierlich sinken, werden bis dahin noch nicht verbrannte Verbrennungszwischenprodukte sowie CO und Ruß oxidiert, die während der Hauptverbrennung aufgrund von lokalem Sauerstoffmangel entstanden sind.

Die Phase der Vormischverbrennung spielt eine untergeordnete Rolle bei der Schadstoffbildung und -abbau. Besonders wichtig dabei sind die Phase der Diffusionsverbrennung und die Ausbrandphase. Diese Verbrennungsphasen sind hauptsächlich reaktionskinetisch kontrolliert, weswegen hierbei die Schadstoffchemie mit Hilfe von Steady-State-Flamelets berechnet werden kann. Hierauf wird in Kapitel 4.4 eingegangen.

2.1.5. Thermodynamische Verbrennungsanalyse

Moderne Messtechnik, die heutzutage an Prüfständen zum Einsatz kommt, erlaubt eine hohe Genauigkeit. Dennoch muss die Messqualität stets kritisch geprüft werden. Dabei kommt der thermodynamischen Verbrennungsanalyse, auch Druckverlaufsanalyse genannt, eine entscheidende Rolle zu. Der Grundgedanke dabei ist, Brennverlauf bzw. Wärmefreisetzungsrates aus einem gemessenen (indizierten) Brennraumdruckverlauf zu berechnen. Die Kenntnis des Brennverlaufes ist sowohl für ausgeführte als auch für projektierte Motoren von großem Interesse, weil dieser maßgeblich die Qualität des thermodynamischen Prozesses bestimmt [11]. Bei dieser Berechnung kommen zwei Modellansätze in Betracht: das Einzonen- und das Zweizonenmodell. Da für die Überprüfung der Validierungsmessdaten im Rahmen dieser Arbeit nur das Einzonenmodell zum Einsatz kam, wird nur dieses näher erläutert.

Das Einzonenmodell wird durch einige Modellannahmen charakterisiert. Es gelten für den gesamten Brennraum ein Druck p und eine Temperatur T [11]. Die Annahme des einheitlichen Drucks ist im Falle des Dieselmotors sehr gut erfüllt, wogegen während der Verbrennung sehr große lokale Temperaturunterschiede auftreten. Örtliche Unterschiede bei der Gemischzusammensetzung werden genauso wenig berücksichtigt wie bei der Temperatur. Das momentan verbrennende Kraftstoff-Luft-Gemischelement vermischt sich augenblicklich und vollständig mit der gesamten Ladungsmasse, so dass diese homogen ist. Bei Dieselmotoren setzt sie sich aus dem Restgas vorangehender Arbeitsspiele, der Luftmasse

und dem Verbrennungsgas einschließlich des darin enthaltenen verbrannten Kraftstoffes zusammen. Die Restgasmasse besteht aus der Kraftstoffmasse und der für deren Verbrennung erforderlichen Luftmasse. In dem Einzonenmodell findet unverbrannter flüssiger oder dampfförmiger Kraftstoff keine Berücksichtigung. Der Kraftstoff wird dampfförmig angenommen und kommt in dem Moment in den Brennraum, in dem er auch verbrannt wird. Trotz der vielen Vereinfachungen ist das Einzonenmodell laut Pischinger et. al. [11] für die Berechnung des Brennverlaufes aus dem Druckverlauf oder umgekehrt gut geeignet.

Die Gleichung, die der Berechnung zugrunde liegt, basiert auf dem ersten Satz der Thermodynamik unter Vernachlässigung der äußeren Energien [11]:

$$\frac{dU}{d\varphi} = \frac{dQ_b}{d\varphi} + \frac{dQ_W}{d\varphi} + \frac{dW}{d\varphi} + \frac{dH_{Le}}{d\varphi} \quad (2.2)$$

In Gl. (2.2) werden die Einlass- und Auslassmassenströme wegen der alleinigen Betrachtung des Hochdruckprozesses gleich Null gesetzt. Nach Vernachlässigung der Leckageverluste erhält man für die Energieerhaltungsgleichung:

$$\frac{dU}{d\varphi} = \frac{dQ_b}{d\varphi} - p \frac{dV}{d\varphi} + \frac{dQ_W}{d\varphi} \quad (2.3)$$

Für die innerhalb eines Zeitintervalls an der Wand übergehende Wärme gilt weiterhin die Newtonsche Beziehung:

$$\frac{dQ_W}{d\varphi} = \alpha_{W,\varphi} A_{W,\varphi} (T_{G,\varphi} - T_W) \quad (2.4)$$

Die Wärmeübergangszahl $\alpha_{W,\varphi}$ hängt von mehreren Größen wie Druck, Temperatur, Geschwindigkeit und Brennraumgeometrie ab. Der brennraumseitige Wärmeübergang entsteht im Wesentlichen durch Konvektion zwischen Verbrennungsgas und Brennraumwand. Im Gegensatz zu der Modellvorstellung ist dies in der Realität ein lokaler Prozess, der in Brennraumwandnähe stattfindet. Dort wird dem Brennraumgas Energie entzogen, welches eine Abkühlung zur Folge hat.

Integration im Hochdruckanteil des Arbeitsspiels, also zwischen "Einlassventil schließt" (E_s) und "Auslassventil öffnet" ($A_ö$), liefert schließlich

$$Q_B = -W - Q_W + U \quad (2.5)$$

Gleichung (2.5) wird oft wie folgt angegeben:

$$\frac{-W - Q_W + U}{Q_B} = 1 \sim 100\% \quad (2.6)$$

Man spricht von einer 100%-Bilanz, wenn die Summe aus geleisteter Arbeit, Wandwärme und innerer Energie des Abgases gleich der eingebrachten Kraftstoffenergie ist. Kleine Abweichungen von bis zu $\pm 2\%$ sind angesichts der kleinen Unsicherheiten bei der Berechnung

von Wandwärme und innerer Energie akzeptabel. Bei größeren Abweichungen müssen die Messdaten hinsichtlich Kraftstoff- und Luftmasse sowie Druck- und Volumenverlauf geprüft werden.

2.2. Phänomenologie der Schadstoffbildung im Dieselmotor

Bei der vollständigen stöchiometrischen Verbrennung eines Kohlenwasserstoffs enthält das Abgas die Komponenten CO_2 , H_2O und N_2 . Da der Dieselmotor in der Regel mit Luftüberschuss betrieben wird tritt auch O_2 im Abgas auf. Bei der realen, unvollständigen Verbrennung enthält das Motorabgas weitere Komponenten wie Kohlenmonoxid (CO), unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC), Stickoxide (NO_x) sowie Partikel [5]. Neben diesen für die Gesundheit schädlichen Stoffen ist das für den Treibhauseffekt mitverantwortliche CO_2 im Abgas vorhanden. In diesem Kapitel soll über die Phänomenologie der Bildung dieser Schadstoffe diskutiert werden.

2.2.1. Ruß

Als Partikelgehalt im Abgas wird die Menge aller Stoffe bezeichnet, die von einem bestimmten Filter erfasst werden, nachdem das Abgas nach einem definierten Verfahren (EN ISO 8178) verdünnt und auf eine Temperatur von weniger als $52^\circ C$ abgekühlt worden ist [5]. Die unterschiedlichen, in motorischen Partikeln vorkommenden Bestandteile sind in Abb. 2.8 dargestellt. Den größten Anteil an der Gesamtpartikelmasse nehmen elementarer Kohlenstoff, der üblicherweise als Ruß bezeichnet wird, Kohlenwasserstoffe und Sulfate ein, wobei die exakte Zusammensetzung je nach Brennverfahren und Betriebspunkt variieren kann.

Ruß entsteht unter sauerstoffarmen Bedingungen. Zu Beginn der Verbrennung im Dieselmotor, wenn das Gemisch sehr deutliche Inhomogenitäten aufweist, wird Ruß gebildet, der wiederum während der Haupt- und Nachverbrennung teils wieder oxidiert wird. Dies ist ein Grund dafür, dass die dominierenden chemischen und physikalischen Prozesse bei der Rußbildung noch nicht vollständig verstanden und erfasst wurden. Der Temperatureinfluss auf die Rußemissionen ist schwer einheitlich zu beschreiben, weil hohe Temperaturen sowohl die Rußbildung als auch die Rußoxidation begünstigen. Unter vorgemischten Bedingungen gilt ein Temperaturfenster von $1500K < T < 1900K$ als kritisch für die Rußbildung. Bei nicht-vorgemischten Flammen, wie sie im Dieselmotor auftreten, steigt die Rußbildung in fetten Gemischbereichen mit der Temperatur an. Gleichzeitig führen hohe Temperaturen zu einer schnellen Oxidation von Ruß in mageren Gemischbereichen. Bei der Rußbildung ist deswegen eine phänomenologische oder experimentelle Untersuchung allein nicht ausreichend zum Verständnis der komplizierten Prozesse und Reaktionsmechanismen. Nur in Verbindung mit detaillierten Modellen lassen sich Wege zur Schadstoffminderung finden.

In dieser Arbeit sollen die Rohemissionsmodelle anhand Prüfstandsmessdaten validiert werden. Deswegen soll in diesem Kapitel ein kurzer Überblick über die Rußmesstechnik gegeben werden. An Motorenprüfständen hat sich für stationäre Messungen die Rauchwertmessung mittels Filterpapiermethode als Standard etabliert. Dabei wird eine Teilmenge des Abgases mittels einer Sonde in der Abgasleitung entnommen und durch ein











	Ruß (in Form und Größe unterschiedliche Teilchen)			Kohlenwasserstoffe sublimiert, kristallisiert kondensiert	
organische Partikel					
anorganische Partikel					
	Aschen von Öladditiven	Rostpartikel Salze	Metall- späne	keramische Fasern	Wasser

Abbildung 2.8.: Unterschiedliche Komponenten in Partikelemissionen [5],
*Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and
 Business Media. Merker, G. P., Stiesch, G., Otto, F.: Grundlagen
 Verbrennungsmotoren, 4. Schadstoffbildung, p. 201, Abb. 6-13, View-
 eg+Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009*

Filterpapier gesaugt [18]. Die dadurch verursachte Schwärzung des Filterpapiers, auch Papierschwärzung P_S genannt, wird mit einem Reflektometer erfasst und ist ein Maß für den Rußgehalt im Abgas. Die Schwärzung des Filterpapiers ist in erster Linie abhängig von der Rußkonzentration im Abgas und der effektiven Sauglänge (Abgasmenge bezogen auf die Filterfläche). Sie wird wie folgt definiert:

$$P_S = \frac{100 - R_R}{10} \quad (2.7)$$

$$R_R = \frac{R_P}{R_F} \cdot 100\% \quad (2.8)$$

Dem unbeladenen, sauberen Filterpapier wird damit der Wert 0 zugeordnet und dem völlig schwarzen, mit Ruß beladenen Papierfilter der Wert SZB 10 (Schwärzungszahl nach Bosch), oder 100% Schwärzung [18]. Der entscheidende Parameter beim Filter-Rauchwertmessgerät ist das Abgasvolumen bezogen auf die beladene Filterfläche, also die "effektive Sauglänge". Diese wird in ISO DP 10054 wie folgt definiert (s. Abb. 2.9) [18]:

$$\text{effektive Sauglänge} = \frac{\text{Saugvolumen} - \text{Totvolumen} - \text{Leckvolumen}}{\text{Filterfläche}} \quad (2.9)$$

Um vergleichbare Bedingungen zu schaffen, ist die effektive Sauglänge auf Normbedingungen zu beziehen. Die Schwärzung des Filterpapiers, die sich bei einer effektiven Sauglänge von 405 mm sowie auf Normvolumen bei 298 K und 1 bar bezieht (s. Gl. 2.9), wird in ISO

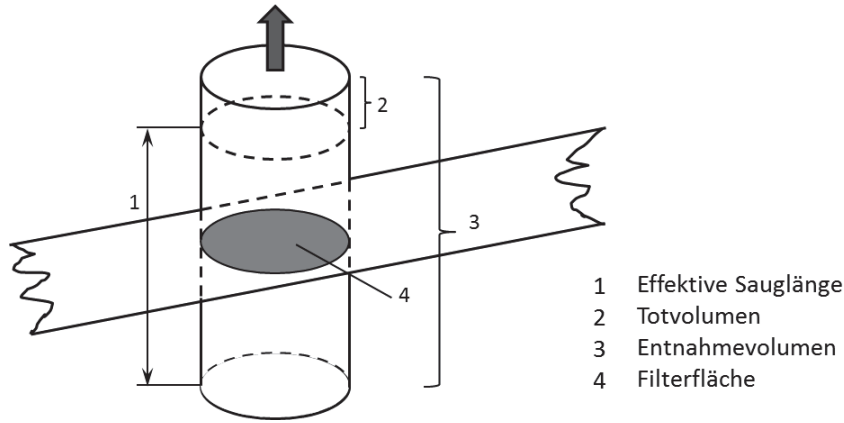


Abbildung 2.9.: Prinzipskizze zur Abgasentnahme mit FSN-Messgeräten [18]

DP 10054 als Filter Smoke Number (FSN) definiert. Unter diesen Bedingungen gilt:

$$\text{FSN} = P_S \quad (2.10)$$

Durch eine empirisch bestimmte Beziehung zwischen Papierschwärzung und Rußbelastung kann der so ermittelte FSN-Wert des Filterpapiers in relative Rußkonzentration umgerechnet werden (s. Abb. 2.10) [19]:

$$\varrho = \frac{1}{0.405} \cdot \alpha \cdot \exp \beta \cdot \text{FSN} \quad \text{für } \text{FSN} \leq 8 \quad (2.11)$$

mit

ϱ = Rußkonzentration [g/m^3]

α = 4.95 (5.32 für thermisch gesondert konditionierte Messgeräte)

β = 0.38 (0.31 für thermisch gesondert konditionierte Messgeräte).

Die FSN-Messung und insbesondere die Umrechnung von FSN in Rußkonzentrationen weist Ungenauigkeiten bei niedrigen FSN-Werten auf. Die Messstreuung in diesem FSN-Bereich reicht bis zu 20%, während der Umrechnungsfehler bis 50% beträgt. Dabei sind gerade diese FSN-Werte relevant für moderne emissionsarme Dieselmotoren. Aus diesem Grund wird die Partikelmasse für Zertifizierungsbelange gewogen. Hierbei wird ein Teil des Abgases entnommen, definiert verdünnt und unter gesetzlich festgelegten Bedingungen durch ein Filterblättchen gesaugt. Auch in diesem Fall bleiben bestimmte Abgasanteile – insbesondere Ruß, aber auch Kohlenwasserstoffe, Öl und mechanische Abriebpartikel – an diesem Blättchen hängen. Nach einer gesetzlich vorgeschriebenen Konditionierung wird das Filterblättchen gewogen. Anhand des festgestellten Gewichtsunterschieds zwischen unbeladenem und beladenem Zustand wird unter Berücksichtigung der Verdünnungs- und Entnahmerate sowie der im Zertifizierungstest geleisteten Arbeit die spezifische Partikelmasse berechnet. Diese Messmethode wird insbesondere bei instationären Zertifizierungstests wie NEFZ, WHTC, NRTC oder FTP eingesetzt, da hierbei die FSN-Methode nicht anwendbar ist.

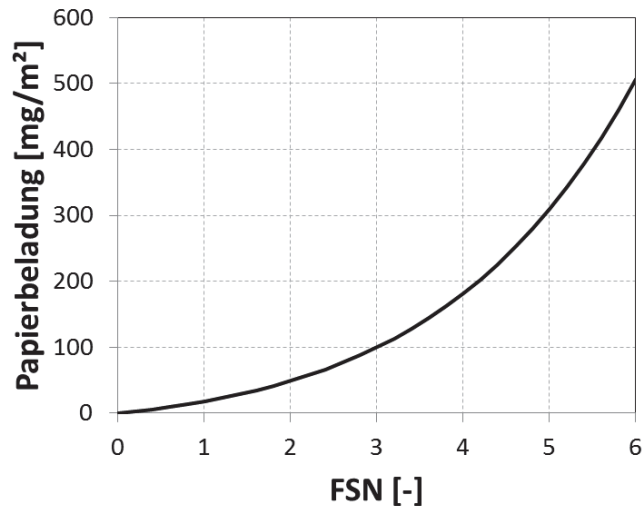


Abbildung 2.10.: Zusammenhang zwischen Papierschwärzung und Filterrußbeladung für thermisch gesondert konditionierte Messgeräte [188]

2.2.2. Stickoxide (NO_x)

Die Umweltbelastung durch Stickoxide nimmt in den letzten Jahren ständig zu. Diverse Studien haben bewiesen, dass NO und NO_2 (zusammen als NO_x bezeichnet) in der Troposphäre die Bildung des gefährlichen Ozons und des photochemischen Smogs begünstigen [20]. Gleichzeitig tragen Stickoxide zu den Kettenreaktionen bei, die das erwünschte stratosphärische Ozon abbauen. Dies hat eine erhöhte ultraviolette Strahlung auf die Erdoberfläche zur Folge [21]. Des Weiteren spielt N_2O eine wesentliche Rolle als Treibhausgas [22].

NO_x entsteht bei hohen Sauerstoffkonzentrationen und hohen Temperaturen. Solche Bereiche existieren während des gesamten Verbrennungsablaufs, insbesondere am Strahlrand. Eine NO_x -Reduktion findet nur in einem äußerst geringen Umfang statt. Der Temperatureinfluss auf die NO_x -Rohemission ist damit eindeutiger im Vergleich zu demselben auf die Rußemission. Bei nicht-vorgemischten Flammen, wie sie im Dieselmotor auftreten, steigt die NO_x -Bildung in mageren Gemischbereichen mit der Temperatur an. Auch wenn die NO_x -Bildungschemie einfacher ist als dieselbe der Rußbildung, sind auch hier reine phänomenologische oder experimentelle Untersuchungen nicht ausreichend zum Verständnis der komplizierten Prozesse und Reaktionsmechanismen, die zur NO_x -Bildung führen. Das Verständnis über reaktionskinetische Modelle kann auch hier zu einer Optimierung der Brennverfahren hinsichtlich Schadstoffminderung beitragen. Auf eine detaillierte Beschreibung der NO_x -Chemie wird an dieser Stelle verzichtet, da dies Gegenstand von Kapitel 4 ist.

2.2.3. Kohlenmonoxid (CO)

Die Oxidation von CO zu CO_2 hängt in erster Linie vom Luftverhältnis λ ab. Bei lokalem Luftmangel ($\lambda < 1.0$) entsteht deswegen CO als Produkt der unvollständigen Verbrennung.

Im unterstöchiometrischen Bereich konkurriert die CO -Oxidation wegen des Sauerstoffmangels mit der H_2 -Oxidation [5]:



und



Dabei fungieren das Hydroxylradikal (OH^*) und der atomare Wasserstoff (H^*) als Kettenträger. Während sich die Reaktion (2.13) praktisch im partiellen Gleichgewicht befindet, ist die Reaktion (2.12) kinetisch kontrolliert und läuft deswegen im Bereich des Sauerstoffmangels ($\lambda < 1.0$) viel langsamer ab. Mit steigendem Luftverhältnis und steigender Temperatur ändert sich das OHC-Gleichgewicht und die CO -Konzentration sinkt.

Im stöchiometrischen Bereich ($\lambda = 1.0$) lassen sich die Reaktionen (2.12) und (2.13) in sehr guter Näherung als Bruttovorgang durch die Wassergasreaktion beschreiben, die in diesem Fall in Gleichgewichtsnähe abläuft, da die Überschusskonzentrationen der Kettenträger H^* und OH^* dabei sehr groß sind:



Bei Luftüberschuss ($\lambda > 1.0$) verläuft die CO -Oxidation nicht mehr in Konkurrenz zur H_2 -Oxidation, sondern nach folgendem Schema:



und



In diesem Bereich und während der Expansion ist aufgrund des Nichtgleichgewichts der Reaktion (2.12) relativ mehr H^* als OH^* vorhanden, welches zu einer Verlangsamung der CO -Oxidation führt.

Bei sehr großen λ -Werten ($\lambda > 1.4$) entsteht wieder vermehrt CO . Grund dafür sind die niedrigen Verbrennungstemperaturen und die unvollständigen Verbrennung in den wandnahen Zonen. Generell ist die CO -Oxidation aufgrund ihrer hohen Aktivierungsenergie sehr stark temperaturabhängig, weswegen die Reaktion (2.12) in dem Expansionstakt verlangsamt wird.

2.2.4. Unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC)

Die Kohlenwasserstoffemissionen von Dieselmotoren sind ähnlich den Kohlenmonoxidemissionen sehr niedrig, welches auf eine fast vollständige Verbrennung des eingebrachten

Kraftstoffes zurückzuführen ist. Die HC-Emissionen entstehen in Zonen, die nicht oder nur teilweise von der Verbrennung erfasst werden. Eine solche Zone ist der äußere Rand des Kraftstoffstrahls. Hier ist das Gemisch zu mager und somit nicht zündfähig. HC-Emissionen entstehen auch in zu fetten Bereichen, z. B. in dem inneren Bereich des Kraftstoffstrahls. Aufgrund des dort herrschenden Sauerstoffmangels kann die HC-Oxidation nicht vollständig erfolgen. Ein Löschen der Diffusionsflamme aufgrund von raschem Druck- und Temperaturabfall in der Expansion kann auch zu erhöhten HC-Emissionen führen. Des Weiteren kann sich bei wandgeführten Dieselmotoren Kraftstoff an den Brennraumwänden anlagern. Wegen der niedrigen Temperaturen an dieser Stelle wird die HC-Oxidation verlangsamt oder sogar unterdrückt.

Die bedeutendste Quelle für HC-Emissionen in modernen Dieselmotoren ist allerdings der Kraftstoff, der nach Einspritzende in den Brennraum gelangt. Dies kann beispielsweise passieren, wenn die Düsenadel erneut öffnet. Dabei entstehen extrem große Tropfen, die nur langsam verdampfen und verbrennen können. Außerdem kann gegen Ende der Verbrennung unverbrannter Kraftstoff aus dem Sacklochvolumen ausdampfen. Aus diesem Grund spielt das Sacklochvolumen eine für die HC-Emissionen entscheidende Rolle, wie in Abb. 2.11 zu erkennen ist.

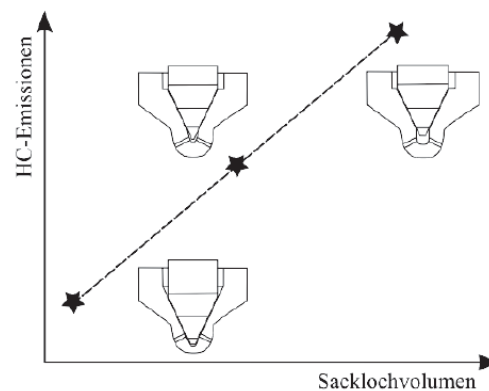


Abbildung 2.11.: HC-Emission in Abhängigkeit des Sacklochvolumens [5],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Merker, G. P., Stiesch, G., Otto, F.: Grundlagen Verbrennungsmotoren, 4. Schadstoffbildung, p. 195, Abb. 6-5, Vieweg+Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009

2.3. Einfluss der Kraftstoffeigenschaften auf die Emissionsbildung

Die am Markt verfügbaren Dieselmotorkraftstoffe werden fast ausschließlich aus Erdöl gewonnen. Sie bestehen aus mehreren hundert verschiedenen Kohlenwasserstoffverbindungen. Der Anteil der einzelnen Komponenten bestimmt die physikalischen und chemischen Eigenschaften der Kraftstoffe, die ihrerseits ganz erheblich die Verbrennung und die Schadstoffbildung beeinflussen. Davon betroffen sind insbesondere die Rußemissionen, da die modernen Dieselmotorkraftstoffe praktisch keinen Stickstoff beinhalten und somit keinen direkten Einfluß auf die

Stickoxidbildung haben. Die Kraftstoffeigenschaften bzw. -kennzahlen, die sich wesentlich auf die Gemischbildung und die Rußemissionen auswirken, sind Siedeverlauf, Viskosität, Cetanzahl und Aromaten- und Sauerstoffgehalt.

Im Gegensatz zu reinen Stoffen, die bei einer bestimmten Temperatur sieden, zeichnen sich die aus mehreren Komponenten bestehenden Kraftstoffe dadurch aus, dass die verschiedenen Bestandteile bei unterschiedlichen Temperaturen verdampfen [6]. Demzufolge wird das Siede- bzw. Verdampfungsverhalten von Kraftstoffen durch die sogenannte Siedelinie charakterisiert (s. Abb. 2.12). Je höher der Anteil an langkettigen Kohlenwasserstoffen (z. B. *n*-Alkane) ist, desto höher liegt die Siedelinie des Kraftstoffs. Dies liegt an den intermolekularen Kräften, welche mit der Kettenlänge ansteigen [5]. Eine hohe Siedelinie führt zu einer langsameren Verdampfung und demzufolge zu einer langsameren bzw. inhomogenen Gemischbildung, die wiederum die Rußbildung begünstigt.

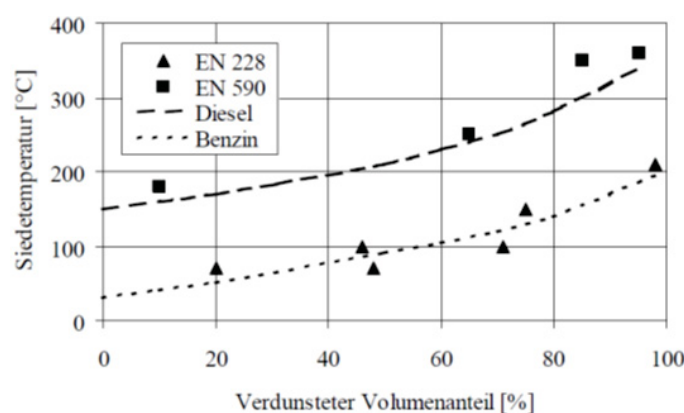


Abbildung 2.12.: Typische Siedelinien für Benzin und Diesel [5],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Merker, G. P., Stiesch, G., Otto, F.: Grundlagen Verbrennungsmotoren, 4. Motorische Verbrennung, p. 119, Abb. 4-5, Vieweg+Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009

Die Viskosität einer Flüssigkeit beschreibt ihre Fließfähigkeit. Die Viskosität von Dieselmotorkraftstoffen nimmt in der Regel mit steigendem Kohlenstoffanteil zu. Auch ein hoher Anteil an langkettigen Kohlenwasserstoffen bewirkt eine Erhöhung der Kraftstoffviskosität, die eine wesentliche Rolle bei der Gemischbildung spielt. Eine zu hohe Viskosität bewirkt eine niedrige Eindringtiefe des Einspritzstrahls bei gleichzeitigem Anstieg des mittleren Tropfendurchmessers [28], welches wiederum zu einer schlechteren Gemischbildung und damit zu erhöhten Rußemissionen führt. Die Kraftstoffviskosität darf aber andererseits einen bestimmten Wert nicht unterschreiten, da in diesem Fall die Schmierung der gleitenden Teile des Einspritzsystems nicht mehr gewährleistet ist.

Für die Bewertung der Zündwilligkeit von Dieselmotorkraftstoffen wird die Cetanzahl (CZ) herangezogen. Dieselmotorkraftstoffe besitzen in der Regel eine hohe Zündwilligkeit. Die maßgebende Cetanzahl gibt an, wie viel Volumenprozent *n*-Hexadecan (Cetan ist die triviale Bezeichnung von *n*-Hexadecan) eine Mischung aus *n*-Hexadecan ($C_{16}H_{34}$; CZ = 100) und α -Methylnaphthalin ($C_{10}H_7 - CH_3$; CZ = 0) enthält, die in einem Prüfmotor dieselbe

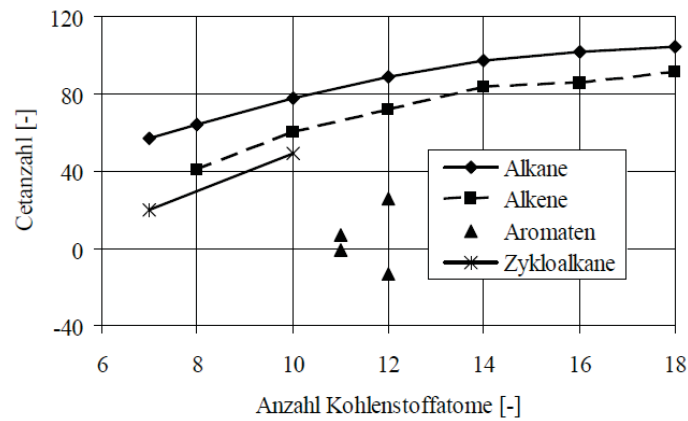


Abbildung 2.13.: Cetanzahlen für Kohlenwasserstoffe unterschiedlicher Gruppen und Kettenlängen [5],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Merker, G. P., Stiesch, G., Otto, F.: Grundlagen Verbrennungsmotoren, 4. Motorische Verbrennung, p. 121, Abb. 4-7, Vieweg+Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009

Zündwilligkeit bzw. Zündverzugszeit aufweist wie der zu prüfende Dieselkraftstoff [6]. Ein höherer Anteil an geradförmigen langkettigen Kohlenwasserstoffen im Kraftstoff bewirkt eine Erhöhung der Cetanzahl.

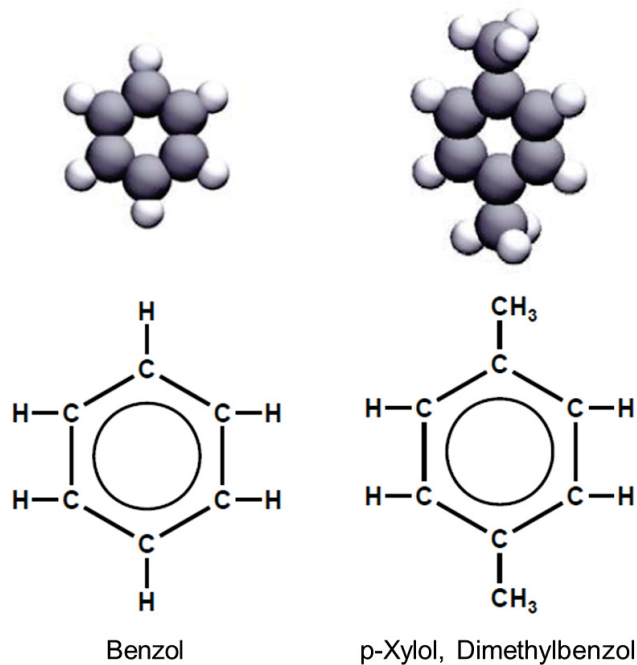


Abbildung 2.14.: Strukturformeln und räumliche Darstellung von Aromaten [5],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Merker, G. P., Stiesch, G., Otto, F.: Grundlagen Verbrennungsmotoren, 4. Motorische Verbrennung, p. 117, Abb. 4-2, Vieweg+Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009

Abbildung 2.13 stellt die Cetanzahlen für unterschiedliche Kohlenwasserstoffgruppen in Abhängigkeit von der Kettenlänge dar. Eine hohe Cetanzahl führt in der Regel zu einer kurzen Flammenabhebelänge. Je kürzer die Abhebehöhe ist, desto höher ist die Temperatur in den fetten Düsennahen Bereichen, welches eine Erhöhung der Rußemissionen zur Folge hat [43]. Aromate sind ringförmige Kohlenwasserstoffe mit delokalisierten Doppelbindungen [6]. Der Grundbaustein für alle aromatischen Verbindungen ist der Benzolring mit 6 Kohlenstoffatomen (s. Abb. 2.14). Die charakteristische Struktur der Aromaten wird durch die delokalisierte Ladungswolke im Zentrum des Moleküls beschrieben. Am Ring können verschiedene Gruppen (z. B. Methyl, Ethyl etc.) angehängt sein, wodurch komplexere Formen von Aromaten entstehen. Aromaten mit mehr als einem Benzolring werden entsprechend als Di-, Tri- bzw. Tetraaromaten bezeichnet. Aromaten stellen neben den Alkanen die häufigste Fraktion in motorischen Brennstoffen dar und sind maßgeblich an der Entstehung von Rußpartikeln beteiligt [29], [30].

2.4. Diskussion der Emissionsbildung bei Dieselbrennverfahren

Ruß- und NO_x -Bildung sind Prozesse, die eine stark ausgeprägte Temperaturabhängigkeit aufweisen (s. Kapitel 2.2). Sie werden auch von dem lokalen Luftverhältnis entscheidend beeinflusst (s. Abb. 2.15). Diese seit längerem bekannten Abhängigkeiten können zur Ableitung verschiedener Strategien zur Minimierung der beiden Abgaskomponenten verwendet werden [32].

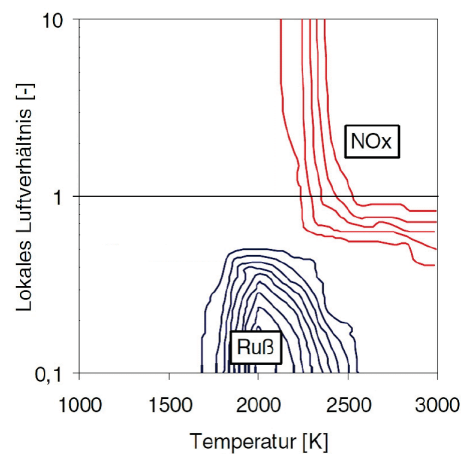


Abbildung 2.15.: Ruß- bzw. NO_x -Bildung in Anhängigkeit von lokalem Luftverhältnis und Temperatur [31], *Nachdruck genehmigt von Dr. Figer*

Eine Betrachtung einzelner Zellen eines 3D-CFD-Modells eines Einspritzstrahles nach Kamimoto [33] zeigt, wie in Abb. 2.16 dargestellt, dass bei der konventionellen Diffusionsverbrennung immer Bereiche vorhanden sind, wo Ruß bzw. Stickoxid entsteht (Bereich A).

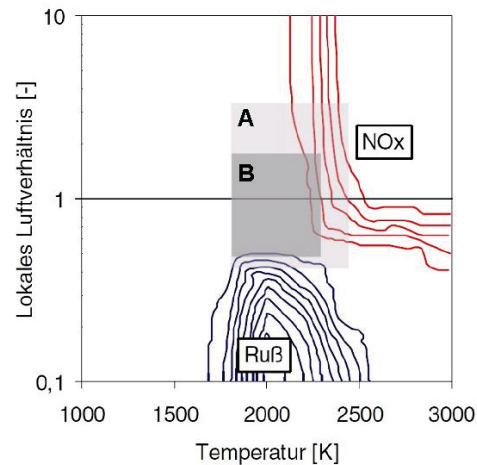


Abbildung 2.16.: Konventionelle Diffusionsverbrennung [31], *Nachdruck genehmigt von Dr. Figer*

Das Ziel der Weiterentwicklung des konventionellen Dieselmotors ist durch geeignete Maßnahmen - wie Abgasrückführung zur Senkung der Verbrennungstemperatur oder Erhöhung des Einspritzdrucks zur besseren Gemischbildung - diese Zone stark zu verkleinern (Bereich B) [34]. Die grundsätzliche Überlegung bei der Konzeption neuartiger Brennverfahren ist es, im Rahmen der Verbrennung Zustände zu vermeiden, bei denen Ruß bzw. NO_x entstehen. Wie in Abb. 2.17 dargestellt, erschließt sich außerhalb dieser Gebiete ein Bereich, innerhalb dessen eine vollständig ruß- und stickoxidfreie Verbrennung realisierbar ist [31].

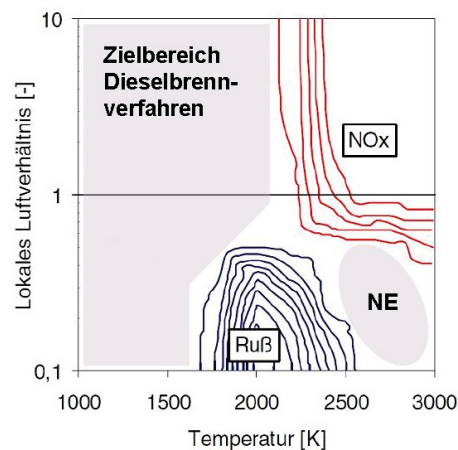


Abbildung 2.17.: Zielbereich neuer Dieselmotoren [31], *Nachdruck genehmigt von Dr. Figer*

Ein weiterer Bereich, in dem eine theoretisch ruß- und stickoxidfreie Verbrennung denkbar wäre, ist der mit NE bezeichnete Bereich in Abbildung 2.17. Eine Verbrennungsprozessführung innerhalb dieses Luftmangelgebietes ist jedoch praktisch nicht darstellbar, da die

adiabate Flammentemperatur für Dieselkraftstoff im unterstöchiometrischen Gebiet unterhalb der notwendigen Temperatur zur Rußvermeidung liegt.

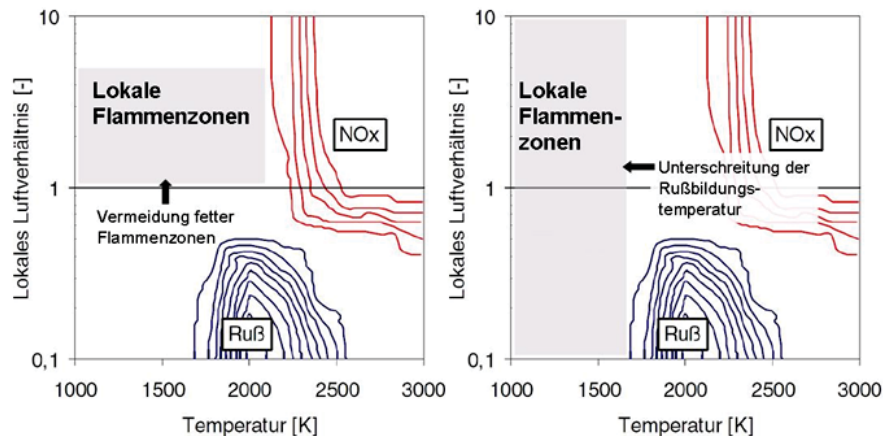


Abbildung 2.18.: Möglichkeiten der rußfreien Verbrennungsführung [31], *Nachdruck genehmigt von Dr. Figer*

Eine rußfreie Verbrennung kann demnach durch zwei Methoden erreicht werden. Die erste Möglichkeit besteht darin, dass lokale fette Zonen ($\lambda_{\text{lokal}} < 0.7$) vermieden werden (s. Abb. 2.18). Die heterogene Diffusionsverbrennung muss dabei teilweise durch eine intensivere homogene Vormischverbrennung ersetzt werden. Im Hinblick auf die Rußbildung ist hierbei keine Einschränkung der Verbrennungstemperatur notwendig. Die zweite Methode zur Vermeidung der Rußbildung erfordert eine Unterschreitung der Rußbildungstemperatur (s. Abb. 2.18). Ein wesentlicher Nachteil hierbei ist der schlechtere Wirkungsgrad aufgrund des niedrigen Temperaturniveaus dieser Prozessführung.

Zur Vermeidung der Stickoxidbildung gilt es hohe lokale Flammentemperaturen ($T_{\text{lokal}} > 2200\text{K}$) zu vermeiden, wie in Abb. 2.19 dargestellt. Dies kann durch Ladungsverdünnung mittels zurückgeführten Abgases (AGR) erreicht werden. Eine zweite Möglichkeit, die lokale Flammentemperatur unter der NO_x -Bildungsgrenze zu halten, besteht darin, das Gemisch möglichst zu homogenisieren, welches eine Verteilung der Verbrennung auf viele Zonen im Brennraum zur Folge hat.

Vor den oben beschriebenen Hintergründen ist die Anstrengung zu erklären, eine Verbrennungsprozessführung mit einer möglichst homogenen Ladung zu realisieren. Das bekannteste Brennverfahren, das auf einer homogenen Prozessführung basiert, ist das HCCI-Brennverfahren (Homogeneous Charge Compression Ignition). Dabei wird ein homogenes Luft-Kraftstoff-Gemisch soweit verdichtet, bis es schließlich kurz vor dem oberen Totpunkt durch Selbstzündung nahezu gleichzeitig verbrennt [35]. Dies hat ein erhöhtes Verbrennungsgeräusch sowie eine erhöhte mechanische Belastung zur Folge. Die Aufbereitung des homogenen Gemisches kann sich dabei aufgrund der hohen Siedelinie des Dieselkraftstoffs (s. Kapitel 2.3) auch als problematisch gestalten. Bei einer Direkteinspritzung von Dieselkraftstoff muss außerdem das Verdichtungsverhältnis gegenüber dem konventionellen Dieselmotor gesenkt werden, damit die Zeitspanne zwischen Einspritzung und Selbst-

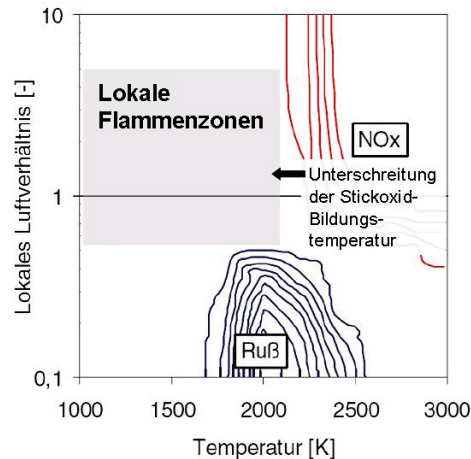


Abbildung 2.19.: Stickoxidfreie Verbrennung [31], *Nachdruck genehmigt von Dr. Figer*

zündung, die für die Homogenisierung des Gemisches nötig ist, verlängert wird. Die Absenkung des Verdichtungsverhältnisses bringt Wirkungsgradeinbußen mit sich. Weiterhin ist die Regelbarkeit der bei dem HCCI-Brennverfahren reaktionskinetisch kontrollierten Zündung äußerst schwierig. Trotz dieser Herausforderungen haben viele Arbeitsgruppen weltweit von vielversprechenden Ergebnissen im Motorbetrieb berichtet [31], [35], [36], [37], [39], [40], [129]. Eine großflächige Anwendung von HCCI konnte aber bisher nicht erreicht werden.

Ein weiterer Ansatz zur homogenen Dieselerverbrennung ist das HPLI-Brennverfahren (Highly Premixed Late Injection). Dieses Brennverfahren, das hauptsächlich durch die Arbeiten von Kimura et al. geprägt wurde [41], [42], basiert auf einer vollständigen Gemischhomogenisierung im Expansionstakt vor der Selbstzündung der Ladung. Durch einen sehr späten Einspritzzeitpunkt (ca. 5° - 10° KW n. OT) wird der Zündverzug so weit verlängert, dass Einspritzung und Gemischbildung abgeschlossen sind bevor die Verbrennung ansetzt. Durch die späte Verbrennungslage und moderate AGR-Raten (30% - 40%) kann die Verbrennungstemperatur stark reduziert werden, so dass die NO_x -Emissionen ein sehr niedriges Niveau erreichen. Aufgrund der vorgemischten Verbrennung weist das HPLI-Brennverfahren auch sehr niedrige Rußemissionen auf. Der Nachteil dieses Verfahrens liegt in dem aufgrund der späten Verbrennungslage relativ schlechten Wirkungsgrad. Auch das HCLI-Brennverfahren (Homogeneous Charge Late Injection) bezweckt eine homogene schadstoffarme Verbrennung. Die Einspritzung erfolgt dabei im Verdichtungshub relativ spät (ca. 30° - 50° KW v. OT). Dadurch kann eine weitestgehend homogene Kraftstoff-Luft-Mischung erzielt werden. Mittels hoher AGR-Raten wird die Verbrennungstemperatur soweit abgesenkt, dass die Rußbildung unterdrückt wird. Das HCLI-Brennverfahren bietet einen annehmbaren Kompromiss zwischen Schadstoffemissionen und Wirkungsgrad an. Aufgrund der Wirkungsgradverluste dem konventionellen Dieselerbrennverfahren gegenüber und eines nach oben hin eingeschränkten Lastbereichs konnte es sich jedoch nicht durchsetzen.

Das konventionelle Dieselerbrennverfahren wurde nicht zuletzt wegen aktuell fehlender Al-

alternativen weiter entwickelt. Die Ruß- und NO_x -Emissionen können auch hier durch innermotorische Maßnahmen reduziert werden. In den letzten Jahren haben sich insbesondere zwei Ansätze durchgesetzt: Abgasrückführung (AGR) und Verschiebung des Verbrennungsschwerpunkts nach spät. Bei der Abgasrückführung wird Restgas von dem letzten Arbeitsspiel in den Brennraum rückgeführt. Aufgrund der im Restgas vorhandenen dreiatomigen Gase wie CO_2 und H_2O wird die Wärmekapazität der Zylinderladung erhöht, welches eine Senkung der Verbrennungstemperatur zur Folge hat. Ein Nachteil der Abgasrückführung sind die niedrigeren lokalen Sauerstoffkonzentrationen, die zu einer Zunahme der Rauchentwicklung führen. Durch moderne Aufladungssysteme kann man dem heutzutage entgegenwirken, indem man den Druck im Saugrohr erhöht. Somit sind hohe globale λ -Werte ($\lambda \approx 1.5$) auch bei hohen AGR-Raten (ca. 50%) möglich. Die Rußbildung kann damit zwar nicht unterdrückt werden, aber durch eine intensive Durchmischung von Kraftstoff und Luft im Brennraum – z. B. mittels hoher Einspritzdrücke, geeigneter Strahl-Wand-Interaktion und Strömungsbewegungen – kann die Rußoxidation intensiviert werden. Auf diese Art muss die Verbrennungslage nur so weit nach spät verschoben, dass die gezielten NO_x -Rohemissionen erreicht werden, womit die Verbrauchsnachteile eingeschränkt werden.

Die Weiterentwicklung des konventionellen Dieselmotors kann nicht von der Gesamtfahrzeugentwicklung abgekoppelt werden. Dabei muss man oft Kompromisse hinsichtlich der Rohemissionen eingehen. Für den Einsatz im PKW-Bereich muss der Dieselmotor beispielsweise gewisse Komfortanforderungen erfüllen, insbesondere im Hinblick auf das Verbrennungsgeräusch. Gerade die hohen Zylinderdruckgradienten, die aus der Vormischverbrennung resultieren (Dieselschlag, s. Kapitel 2.1), führen zu einer erhöhten Geräuschentwicklung. Um dem entgegenzuwirken wird ein kleiner Teil des Kraftstoffs vor der eigentlichen Einspritzung in den Brennraum eingebracht. Dabei spricht man von einer Voreinspritzung (VE) bzw. Haupteinspritzung (HE). Durch die Verbrennung des mit der VE eingespritzten Kraftstoffs steigen Zylinderdruck und -temperatur. Dadurch wird die Zündverzugszeit nach der HE deutlich verkürzt, weshalb die Vormischverbrennung an Intensität verliert. Gleichzeitig sinken aber auch die Flammenabhebelängen, welches zu einer Erhöhung der Rußbildung führt (s. Kapitel 2.3) [43]. Des Weiteren benötigen moderne Abgasnachbehandlungssysteme eine gewisse Betriebstemperatur zur Erreichung der gewünschten Umsatzraten. Dies macht eine Erhöhung der Abgastemperatur bzw. eine Anpassung der Betriebsstrategie erforderlich. Dabei kann die notwendige Abgastemperatur nicht immer durch eine späte Verbrennungslage sichergestellt werden. In diesen Fällen ist unter Umständen eine Nacheinspritzung (NE) zweckmäßig. Dabei wird ein kleiner Teil des Kraftstoffs sehr spät in dem Expansionstakt in den Brennraum eingespritzt. Die Nacheinspritzung kann je nach Betriebspunkt entweder zu einer geringfügigen Erhöhung der Rußrohmissionen oder zu einer wegen der erhöhten Brennraumtemperatur intensiveren Rußoxidation führen.

3. Modellierung dieselmotorischer Prozesse

Die strömungsmechanische Simulation von innermotorischen Verbrennungsprozessen beinhaltet Fragestellungen aus verschiedenen Disziplinen - Physik, Chemie, Mathematik, Numerik und Datenverarbeitung. Die Modellierung von innermotorischen Strömungen ist insbesondere deswegen herausfordernd, weil sie instationär, kompressibel, turbulent und reaktiv verlaufen. Des Weiteren müssen bei direkteinspritzenden Motoren Zweiphasenströmungen in Betracht gezogen werden, welches die Komplexität der Modellbildung steigen lässt. In diesem Kapitel wird auf das mathematische Grundgleichungssystem zur Lösung der Gasphasenströmung innermotorischer Verbrennungsprozesse eingegangen, wobei auf eine ausführliche Abhandlung verzichtet wird (siehe dazu Lehrbücher der Strömungsmechanik, z.B. [22], [44], [45], [46], [47]).

3.1. Allgemeine Erhaltungsgleichungen für turbulente reaktive Strömungen

Die mathematische Beschreibung von strömungsmechanischen Problemstellungen basiert auf Transportgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Dieser Gleichungssatz ist unter dem Namen Navier-Stokes-Gleichungen bekannt. Strömungsmechanische Transportgleichungen besitzen gemeinsame Grundelemente, die in einer allgemeinen Transportgleichung für die Fluideigenschaft ψ zusammengefasst werden können. Diese sind die Terme für die zeitliche Änderung, die Konvektion, die Diffusion und der jeweiligen Transportgleichung angepasste Quellterme \dot{Q}^i .

$$\frac{\partial \rho\psi}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\psi\vec{u}) = \nabla \cdot [\rho\Gamma\nabla\psi] + \sum_i \dot{Q}^i \quad (3.1)$$

Grundsätzlich unterscheidet man zwischen laminaren und turbulenten Strömungen. Die laminaren Strömungen werden durch ihre Gleichmäßigkeit ohne jegliche Störungen gekennzeichnet. In diesem Fall liegen zu jedem Zeitpunkt an jedem Ort in der Strömung

die gleichen Geschwindigkeiten, aber auch die gleichen skalaren Größen wie Temperatur, Dichte usw. vor. Eine turbulente Strömung dagegen weist Fluktuationen auf, die auf die Interaktion von kleinen Wirbeln und Viskositätseffekten zurückzuführen sind. Die Strömungsgrößen sind demzufolge nicht orts- und zeitkonstant, sondern fluktuieren um einen zeitlichen Mittelwert. Mit einer Transportgleichung von rein deterministischem Charakter wie z. B. Gleichung 3.1 kann demzufolge die Statistik der turbulenten Fluktuationen nicht berücksichtigt werden. Dies macht eine zusätzliche mathematische Modellierung der Turbulenz notwendig.

Für die Beschreibung einer turbulenten Strömung haben sich zwei mathematische Verfahren etabliert. Bei der ersten Methode, die unter dem Namen Ensemble-Mittelung bekannt ist, wird der Momentanwert einer Strömungsgröße ψ durch einen zeitlichen Mittelwert $\bar{\psi}$ und eine Schwankungsgröße ψ' beschrieben.

$$\psi = \bar{\psi} + \psi' \quad \text{mit} \quad \overline{\psi'} = 0 \quad (3.2)$$

Da bei Verbrennungsvorgängen meistens beträchtliche Dichteschwankungen vorliegen ist hier eine dichtegewichtete Mittelung, die sog. Favre-Mittelung sinnvoller:

$$\psi = \tilde{\psi} + \psi'' \quad \text{mit} \quad \tilde{\psi} = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}} \quad \text{mit} \quad \overline{\rho\psi''} = 0 \quad (3.3)$$

Nach Einsetzen der Favre-Mittelung in Gleichung 3.1 erhält man:

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{\psi}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\psi}\tilde{\mathbf{u}}) = \nabla \cdot [\bar{\rho}\Gamma\nabla\tilde{\psi}] - \nabla \cdot (\bar{\rho}\psi''\tilde{\mathbf{u}}'') + \sum_i \bar{Q}^i \quad (3.4)$$

Dadurch entstehen in der jeweiligen Transportgleichung Zusatz-Terme der Form $\bar{\rho}\psi''\tilde{\mathbf{u}}''$. Diese müssen durch einen entsprechenden Schließungsansatz modelliert werden. Für gewöhnlich wird dazu ein dem laminaren Transportterm ähnlicher Gradientenansatz gewählt, dem ein Faktor μ_t vorangestellt wird, der die turbulente dynamische Viskosität quantifiziert. Der Faktor μ_t wird dann auf Basis des turbulenten Zustands bestimmt.

$$\bar{\rho}\psi''\tilde{\mathbf{u}}'' = -\mu_t\nabla\tilde{\psi} \quad (3.5)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Simulationssoftware STAR-CD [48] verwendet. Die Turbulenzmodellierung in den Strömungsgleichungen basiert auf der zuvor beschriebenen dichtegewichteten Favre-Mittelung. Zur Schließung der turbulenten Transportterme kommt in dieser Arbeit das aus zwei zusätzlichen Transportgleichungen bestehende k- ϵ -Turbulenzmodell zum Einsatz. Alle folgenden Transportgleichungen, die von STAR-CD gelöst werden, sind im nachfolgenden Abschnitt in differentieller Form dargestellt.

Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = Q_m \quad (3.6)$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j - \tau_{ij}) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + Q_i \quad (3.7)$$

Wiederholende Indizes bezeichnen dabei Summation. Beispielsweise gilt:

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial \rho u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial \rho u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial \rho u_3}{\partial x_3} \quad (3.8)$$

τ_{ij} in Gl. 3.7 stellt die Spannungstensorkomponenten in „Newtonscher Form“ dar:

$$\tau_{ij} = 2\mu s_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (3.9)$$

Der Energietransport in STAR-CD wird durch die folgende Enthalpieerhaltungsgleichung für eine Fluidmischung beschrieben:

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho h u_j + F_{h,j}) = \frac{\partial p}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + Q_h \quad (3.10)$$

Dabei bezeichnet h die totale Enthalpie (engl. chemico-thermal enthalpy). Sie wird definiert als die Summe von thermischer und chemischer Enthalpie.

$$h \equiv \bar{c}_p T - c_p^0 T_0 + \sum Y_m h_m = h_t + \sum Y_m h_m \quad (3.11)$$

Energiequellterme, die aufgrund von exothermen oder endothermen chemischen Reaktionen zustande kommen, werden durch diese Formulierung implizit berücksichtigt.

Für jede Komponente m einer Mischung, deren lokale Konzentration durch den Massenbruch Y_m ausgedrückt wird, gilt in STAR-CD die Spezieserhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_m) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j Y_m + F_{m,j}) = s_m \quad (3.12)$$

Für die turbulente kinetische Energie gilt:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j k - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] = \mu_t (P + P_B) - \rho \varepsilon - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \rho k \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \mu_t P_{NL} \quad (3.13)$$

wobei

$$P \equiv S_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \quad (3.14)$$

$$S_{ij} = \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (3.15)$$

$$P_B \equiv -\frac{g_i}{\sigma_{h,t}} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \quad (3.16)$$

$$P_{NL} = -\frac{\rho}{\mu_t} \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \left[P - \frac{2}{3} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\rho k}{\mu_t} \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] \quad (3.17)$$

Dabei ist σ_k die auf die turbulente kinetische Energie angepasste Prandtl-Zahl.

Für die turbulente Dissipationsrate der kinetischen Energie gilt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j \varepsilon - \left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \left[\mu_t P - \frac{2}{3} \left(\mu_t \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \rho k \right) \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] + \\ C_{\varepsilon 3} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t P_B - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + C_{\varepsilon 4} \rho \varepsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \mu_t P_{NL} \end{aligned} \quad (3.18)$$

wobei hier σ_ε die turbulente Prandtl-Zahl, $C_{\varepsilon 1}$, $C_{\varepsilon 2}$, $C_{\varepsilon 3}$ und $C_{\varepsilon 4}$ die Modellkonstanten beschreiben (s. Tab. 3.1). Die Letztere setzt sich aus einem laminaren und einem turbulenten Anteil zusammen:

$$\mu = \mu_l + \mu_t \quad (3.19)$$

Für die Berechnung der laminaren Viskosität wird die sog. Sutherland-Formel herangezogen, während die turbulente Viskosität sich aus den Turbulenzgrößen ergibt:

$$\mu_l = \frac{A_1 T^{3/2}}{T + A_2} \quad \mu_t = c_\mu \frac{\bar{k}^2}{\varepsilon} \quad (3.20)$$

C_μ	σ_k	σ_ε	σ_k	σ_m	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$C_{\varepsilon 3}$	$C_{\varepsilon 4}$	κ	E
0.09	1.0	1.22	0.9	0.9	1.44	1.92	0.0 oder 1.44	-0.33	0.419	9.0

Tabelle 3.1.: Standard-Konstanten des k- ε -Turbulenzmodells [48]

Bei Strömungen, die hohe Reynoldszahlen aufweisen, verläuft der turbulente Transport meistens viel schneller als die laminaren Transportprozesse, sodass $\mu \sim \mu_t$ gesetzt werden kann. Näherungsweise wird weiter angenommen, dass die turbulenten Transportkoeffizienten für alle Spezies gleich sind, weswegen die Lewis-Zahl für alle Spezies gleich 1.0 ist. Für die turbulente Prandtl- und Schmidt-Zahl wird jeweils der Wert 0.9 vorgegeben. Diese Werte werden unter Umständen korrigiert, damit eine realistischere Einspritzstrahlaufweitung abgebildet werden kann.

Die thermische Zustandsgleichung für ein ideales Gas ist eine weitere Schließungsgleichung, die mit \bar{M} als mittlerer molarer Masse des Gemischs und \mathcal{R} als universeller Gaskonstante formuliert wird:

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{\mathcal{R}}{\bar{M}} \tilde{T} \quad (3.21)$$

Als letzte Schließungsbedingung ist die kalorische Zustandsgleichung gegeben, die für ein ideales Gas die Form

$$\tilde{u}_{in} = \sum_{i=1} \tilde{y}_i \int_{\tilde{T}_0}^{\tilde{T}} \bar{c}_{v,i}(\tilde{T}) d\tilde{T} \quad (3.22)$$

hat mit $\bar{c}_{v,i}$ als spezifischer Wärmekapazität.

Die Einspritzstrahlquellterme werden in [48] bzw. [49] im Detail erläutert werden. Für die Ansätze zur Schließung der chemischen Quellterme und des Terms zur Modellierung des Wandwärmeübergangs wird auf [10] verwiesen.

3.2. Modellierung des turbulenten Mischungszustandes

Bei Betrachtung von nicht-vorgemischten Flammen ist der lokale Gemischzustand – mager, stöchiometrisch oder fett – von großem Interesse. Eine wichtige Größe zur Beschreibung dieses Zustands 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:

$$Z_j = \sum_{i=1}^{N_s} \frac{a_{ij} M_j}{M_i} y_i \quad j = 1, \dots, N_{el} \quad (3.23)$$

Der Mischungsbruch Z lässt sich anhand eines Zweistromproblems mit einem Kraftstoff- und Oxidatorstrom mit Hilfe der Elementmassenbrüche Z_j definieren [22]:

$$Z = \frac{Z_j - Z_{j,2}}{Z_{j,1} - Z_{j,2}} \quad (3.24)$$

Dabei bezeichnen die Indizes 1 und 2 die beiden Ströme. Der Mischungsbruch ist damit linear mit den Massenbrüchen verknüpft. Aufgrund der Elementbetrachtung wird der Mischungsbruch – im Gegensatz zu den molekularen Stoffgrößen – während der Verbrennung erhalten. Im Falle von einem DI-Dieselmotor ist der Mischungsbruch trotzdem nicht konservativ, da aufgrund der Kraftstoffverdampfung die Elementmassenbilanz verändert wird [10].

Da zwischen dem Mischungsbruch und den Spezies-Massenbrüchen linearer Zusammenhang besteht, kann das Luftverhältnis λ als Funktion von Z angegeben werden:

$$\lambda = \frac{1 - Z}{Z} \frac{Z_{st}}{1 - Z_{st}} \quad (3.25)$$

Dabei bezeichnet Z_{st} den stöchiometrischen Mischungsbruch, der bei einem Luftverhältnis von $\lambda = 1$ vorliegt. Damit gilt in mageren Bereichen $\lambda > 1$ und $Z < Z_{st}$, in fetten Bereichen - $\lambda < 1$ und $Z > Z_{st}$.

Der Mischungsbruch kann mit Hilfe einer Gegenstrom-Diffusionsflamme, des sogenannten Flamelets, verdeutlicht werden. Die räumliche Koordinate der Diffusionsflamme wird dazu in den Mischungsbruchraum transformiert. Die Massenbrüche der an der Reaktion beteiligten Spezies werden somit dem entsprechenden Mischungsbruch zugeordnet. In Abb. 3.1 sind eine Gegenstrom-Diffusionsflamme sowie die Massenbruchverläufe der Systemspezies im Mischungsbruchraum schematisch dargestellt. Die Bruttoreaktionsgleichung wird mit



angegeben. Im Falle einer reaktiven Strömung ergibt sich die sogenannte Burke-Schumann Lösung [50], die die idealisierte vollständige Verbrennung darstellt. Die Reaktionszone wird dabei unabhängig von der Reaktionskinetik als unendlich dünne Schicht betrachtet, in der Kraftstoff und Oxidator zu Produkten reagieren. Wegen der irreversiblen unendlich schnellen Chemieannahme, weisen die Massenbrüche lineare Verläufe im Mischungsbruchraum auf. Kraftstoff und Sauerstoff dürfen nicht koexistieren, da die Mangelkomponente direkt konsumiert wird.

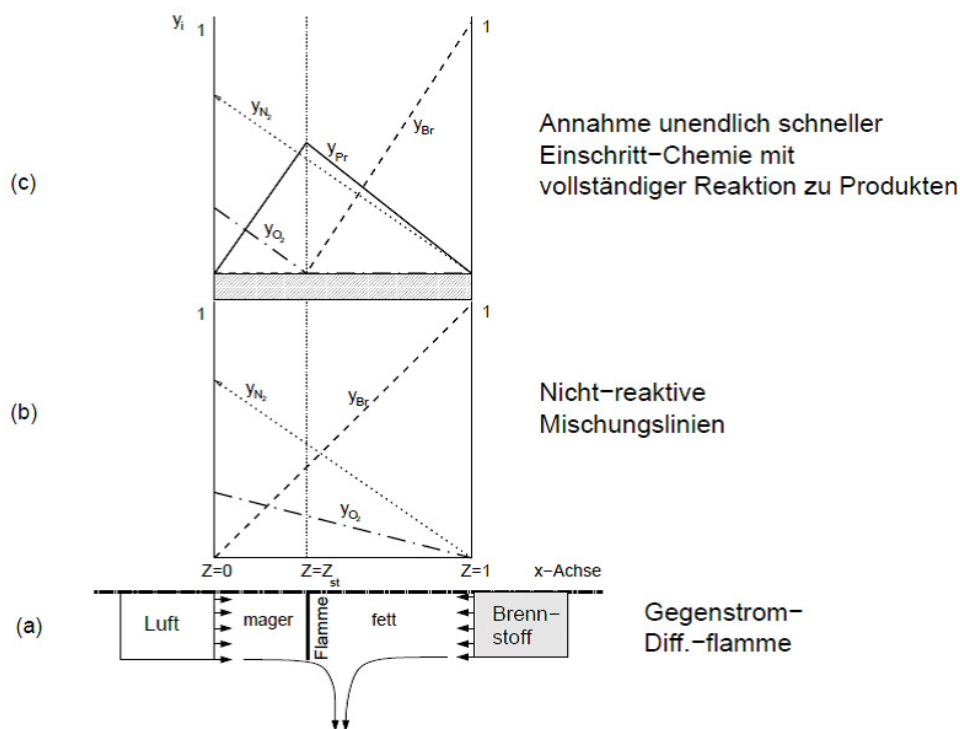


Abbildung 3.1.: (a) Beispiel einer Gegenstrom-Diffusionsflamme
 (b) Projektion der Massenbrüche von Kraftstoff y_{Br} , Sauerstoff y_{O_2} und Stickstoff y_{N_2} in den Mischungsbruchraum Z bei Annahme einer nicht-reaktiven Strömung
 (c) Burke-Schumann Lösung der Reaktanden im Mischungsbruchraum für eine reaktive Strömung [10],
 Nachdruck genehmigt von Dr. Steiner

Die Diffusivität aller Spezies kann näherungsweise gleichgestellt werden (Lewis-Zahl gleich

1.0). Damit kann mit Hilfe der laminaren Transportgleichungen für die Massenbrüche y_i eine Transportgleichung für den Mischungsbruch aufgestellt werden [22], [46]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Z) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\rho u_j Z - \left(\rho D_Z + \frac{\mu}{Sc_t} \right) \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right] = \dot{\rho}^s \quad (3.27)$$

Der Quellterm $\dot{\rho}^s$ ist dabei ein Verdampfungsquellterm. Gl. (3.27) weist keinen chemischen Quellterm auf, da Elemente durch chemische Reaktionen weder konsumiert noch gebildet werden können.

Die Favre-gemittelten Erhaltungsgleichungen für den Mischungsbruch \tilde{Z} und seine Varianz \tilde{Z}''^2 werden unter Vernachlässigung der molekularen Diffusion wie folgt angegeben:

Mischungsbruch \tilde{Z} :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Z} - \frac{\mu}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] = \tilde{\rho}^s_i \quad (3.28)$$

Varianz des Mischungsbruchs \tilde{Z}''^2 :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{Z}''^2) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}\tilde{u}_j\tilde{Z}''^2) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\mu}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Z}''^2}{\partial x_j} \right] + 2\frac{\mu}{Sc_t} \left(\frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right)^2 - \bar{\rho}\tilde{\chi} + \tilde{\rho}^s \quad (3.29)$$

Hierbei gelten für die turbulente Viskosität μ und die turbulente Schmidt-Zahl Sc_t die gleichen Werte wie für die Transportgleichungen der chemischen Spezies. $\tilde{\chi}$ bezeichnet die turbulente mittlere skalare Dissipationsrate, die nach Jones [52] folgendermaßen modelliert wird:

$$\tilde{\chi} = c_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \tilde{Z}''^2 \quad (3.30)$$

c_χ gibt das Verhältnis zwischen der Skalar- und Strömungszeitskala wieder. Für dieselmotorische Verbrennungsprozesse wird für dieses Verhältnis $c_\chi = 2.0$ angenommen [46].

Die Bilanzgleichung für die Varianz des Mischungsbruchs ist von entscheidender Bedeutung für die dieselmotorische Simulation, da sie die Gemischinhomogenitäten im Brennraum direkt beschreibt. In dieser Gleichung finden neben den Termen für die zeitliche Änderung, Konvektion und Diffusion, zusätzlich ein Produktions- und ein Dissipations-term Berücksichtigung. Der Einfluss der Kraftstoffverdampfung muss an dieser Stelle auch berücksichtigt werden, welches eine besondere Herausforderung darstellt. Auf Basis von DNS-Rechnungen für verdampfende Tropfen in einer turbulenten Strömung schlugen Reveillon und Vervisch in [53] eine Schließung des Strahlquellterms in der Varianzgleichung vor. Ihr Ansatz ist jedoch für die dieselmotorische Verbrennungssimulation weniger geeignet, da der Einfluss der Sättigung nicht berücksichtigt wurde.

3.3. Modellierung der Einspritzung und Gemischbildung

Die Simulation von innermotorischen Verbrennungsprozessen, bei denen flüssiger Kraftstoff direkt in den Brennraum eingespritzt wird, erfordert die Modellierung der sogenannten Strahlquellterme (s. Kapitel 3.1) zur Schließung des Gasphasen-Gleichungssystems. Im Rahmen dieser Arbeit kommt dazu ein von Krüger [49] vorgestelltes Modell zur Simulation der dieselmotorischen Einspritzung zum Einsatz.

Die Qualität der Modellierung motorischer Einspritzvorgänge hängt entscheidend von der Kopplung zwischen Gas- und Flüssigphase hinsichtlich Massen-, Impuls und Energieaustausch. Eine direkte numerische Simulation von Tropfen-Ensembles ist an dieser Stelle nicht geeignet, da dazu das Strömungsfeld um jeden einzelnen Tropfen aufgelöst werden muss, welches zu untragbaren Rechenzeiten führt. Aus Konsistenzgründen ist zudem neben der statistischen Beschreibung der Gasphase auch eine statistische Beschreibung der Flüssigphase notwendig. Eine Möglichkeit dies zu realisieren ist die Einführung einer Tropfen-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Tropfen-PDF), die in der Praxis im mindestens 8-dimensionalen Phasenraum (drei Ortskoordinaten, drei Komponenten des Tropfen-Geschwindigkeitsvektors, Tropfendurchmesser und Tropfentemperatur) aufgespannt wird. Williams [54] hat mit der sog. „Spray Equation“ einen Ansatz zur Beschreibung der Tropfen-PDFs vorgeschlagen. Für die Lösung dieser Gleichung bestehen zwei Möglichkeiten: Lösung der Entwicklung der Tropfen-PDFs direkt im 8-dimensionalen, ortsfesten Phasenraum, die aus Rechenzeitgründen ausscheidet, und Einführung stochastischer Partikel (Parcels) [49], [55].

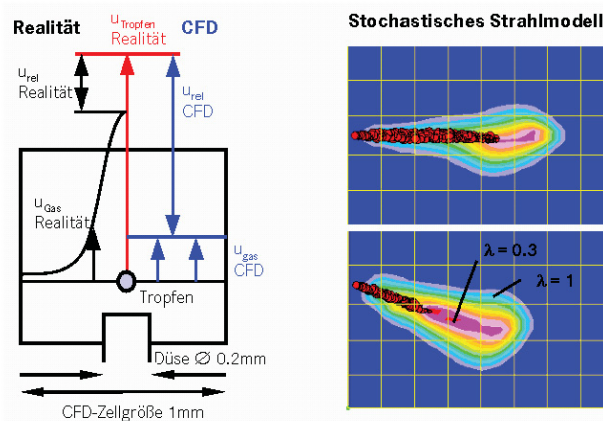
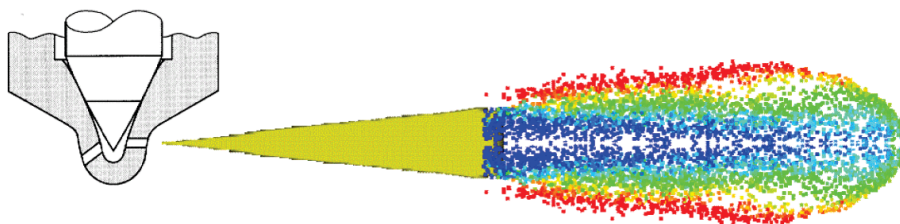


Abbildung 3.2.: Vergleich zwischen physikalischer und numerischer Relativgeschwindigkeit der Gas- und Flüssigphase. Aufgrund der schlechten Auflösung des Düsenlochs wird die Relativgeschwindigkeit zwischen den Phasen überschätzt. Die Netzauflösung bestimmt die Strahlausbreitung [49],
Nachdruck genehmigt von Dr. Krüger

Bei dem zweiten Ansatz, der derzeit den Standard zur Berechnung von motorischen Einspritzvorgängen darstellt, werden alle Prozesse, deren deterministischer Charakter auf Partikelebene nicht aufgelöst werden können, stochastisch über ein Monte-Carlo-Verfahren si-

muliert. Die Partikel repräsentieren folglich die Tropfen-Eigenschaften, worauf der Modellname – Discrete-Droplet-Model (DDM) – zurückzuführen ist. Die stochastischen Strahlmodelle weisen allerdings schwerwiegende numerische und physikalische Schwächen auf, so dass eine korrekte Vorausberechnung der Strahlausbreitung und Gemischbildung nicht möglich ist. Dabei sind insbesondere unphysikalische Abhängigkeiten der Strahlstruktur von Rechennetz, Orientierung des Strahls zum Rechennetz, Tropfengröße und Umgebungsturbulenz zu erwähnen (s. Abb. 3.2) [49].

Aus den oben genannten Gründen wird im Rahmen dieser Arbeit das von Krüger [49] entwickelte Konzept zur Simulation der dieselmotorischen Hochdruckeinspritzung angewandt. Dieses Model basiert auf dem ICAS-Konzept (Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray) von Wan und Peters [56], [57]. Abbildung 3.3 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. Nach einer definierten Länge stromabwärts wird auf das konventionelle stochastische 3D-Strahlmodell umgeschaltet, um mehrdimensionale Effekte abbilden 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 3.3.: Berechnungskonzept für die dieselmotorische Einspritzung nach Krüger [49], *Nachdruck genehmigt von Dr. Krüger*

Der Hauptunterschied des ICAS-Modells zum stochastischen Strahlmodell liegt in der numerischen Behandlung des Strahls im Düsenbereich. Die numerischen Probleme des stochastischen Ansatzes werden hier durch eine statistische Beschreibung der Momente der "Spray Equation" in Eulerscher Formulierung umgangen [49], [58]. Auf Basis der "Spray Equation" werden Bilanzgleichungen für gemittelte Strahleigenschaften (Momentengleichungen) wie z. B. Tropfendurchmesser und Tropfentemperatur formuliert. Nach Integration der abgeleiteten Bilanzgleichungen über den Strahlquerschnitt bleibt die Strahlachse als alleinige Raumkoordinate übrig [56]. Aufgrund des hohen Strahlimpulses ist diese Betrachtungsweise im Düsenbereich zulässig. Eine Verteilung der Strahleigenschaften über den Strahlquerschnitt kann durch Profilvergaben berücksichtigt werden, womit sich eine Düsenauflösung erübrigt. Da nur erste Momente transportiert werden, werden zur Ab-

bildung der Korrelationen zwischen den Phasenraumdimensionen (z. B. Tropfentemperatur und -durchmesser) Tropfenklassen eingeführt, die sich in Zeit und Raum ändern können. Dadurch wird im Ortsraum eine Euler-Formulierung verwendet, welches zu einem besseren Konvergenzverhalten führt. Die Transportgleichungen für die Gas- und Flüssigphase im ICAS-Gebiet werden in Euler-Formulierung gelöst, wodurch eine strenge Kopplung der Phasen gewährleistet wird.

3.4. Modellierung der Selbstzündung

Der in dieser Arbeit verwendete von Streule [59] entwickelte Progress-Ansatz zur Simulation der dieselmotorischen Selbstzündung, im Folgenden PDF-Zündmodell genannt, basiert auf der Idee, repräsentative chemische Spezies als sogenannte Progressvariablen zu identifizieren, die als Indikator für die Selbstzündung dienen.

Diagnostische und reaktionskinetische Untersuchungen bestätigen, dass chemisch reaktive Orte durch Spezies-Konzentrationsverläufe lokalisiert werden können. In Abhängigkeit der Konzentrationen einer für die Selbstzündung repräsentativen Spezies ist somit eine Aussage zum Zündstatus möglich. Als geeignete Progressvariable hat sich für das Selbstzündungsmodell die Konzentration von Kohlenmonoxid (CO) erwiesen. Dies ist damit zu erklären, dass CO während der Zündphase hinreichend gut reaktionskinetisch beschrieben werden kann und einen monoton-steigenden Konzentrationsverlauf aufweist (s. Abb. 3.4).

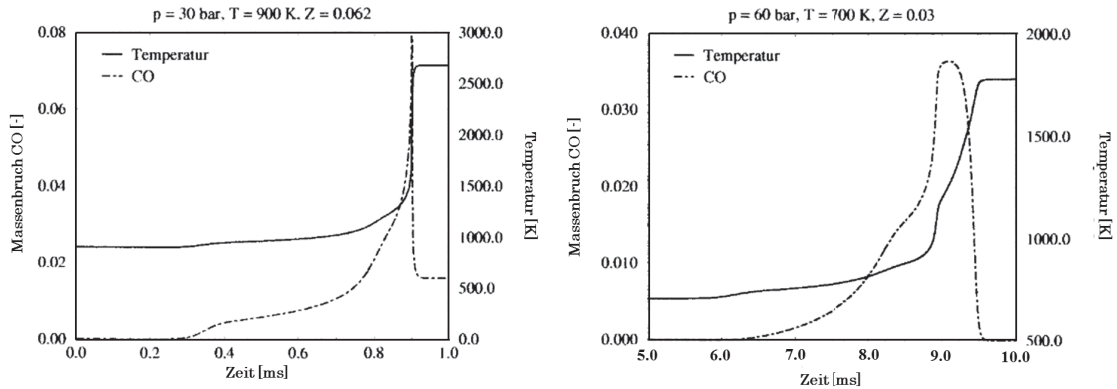


Abbildung 3.4.: Temperatur und CO-Massenbruchverläufe für homogene Reaktoren mit den Anfangsbedingungen: $p_0 = 30 \text{ bar}$, $T_0 = 900 \text{ K}$ und $\lambda_0 = 1.0$ (links), $p_0 = 30 \text{ bar}$, $T_0 = 900 \text{ K}$ und $\lambda_0 = 2.0$ (rechts) [59],

Nachdruck genehmigt von Dr. Streule

Die Bilanzgleichung für eine beliebige Progressvariable ψ_i lautet entsprechend der allgemeinen statistischen Transportgleichung (Gl. 3.4) unter Vernachlässigung des molekularen Transports:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\psi}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\psi}_i) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{\psi}_i \right] + \tilde{\Psi}_i^c \quad (3.31)$$

Zur Schließung der Massen-Bilanzgleichung für Kohlenmonoxid $\tilde{\psi}_i = \tilde{y}_{CO}$ als Zünd-Progressvariable muss die mittlere chemische Reaktionsrate $\tilde{\psi}_i = \tilde{\omega}_{CO}$ berechnet werden. Sie ergibt sich mit $P_{Z,T}$ als einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zu:

$$\tilde{\omega}_{CO}^c(\vec{x}, t) = \int_{T=0}^{\infty} \int_{Z=0}^1 \dot{\omega}_{CO}(Z, AGR, y_{CO}, p, T) \tilde{P}_{Z,T}(\vec{x}, t) dT dZ \quad (3.32)$$

Die CO -Reaktionsraten hängen somit von dem Gemischzustand und der Thermodynamik ab. Unter der Annahme eines Kohlenwasserstoff-Brennstoffes bestimmt sich der Gemischzustand aus der lokalen Kraftstoffkonzentration und der AGR-Rate, während der thermodynamische Zustand durch den Druck und die Temperatur definiert wird. Die laminaren Reaktionsraten von Kohlenmonoxid wurden a-priori mit Hilfe von isobaren 0D-Reaktorrechnungen bestimmt und in einer Bibliothek tabelliert. Dafür wurde auf einen detaillierten n -Heptan-Mechanismus von Nehse et. al. [60] zurückgegriffen.

Bei dem PDF-Zündmodell wird die Indikatorspezies CO als passiver Skalar behandelt. Nachdem ihr Massenbruch einen aus homogenen Reaktorrechnungen empirisch bestimmten Wert von 0.02 übersteigt [59] oder die Temperatur eine bestimmte Zündgrenze erreicht (in der Regel 1300 K) wird in der entsprechenden Zelle vom Zünd- auf das 7-Spezies-PDF-Timescale Verbrennungsmodell (siehe Kapitel 3.5) umgeschaltet.

3.5. Modellierung Verbrennung

Im vorherigen Abschnitt wurde das PDF-Zündmodell beschrieben, das zur Berechnung des Zündverzugs und des Zündortes dient. Aufgabe von dem in diesem Kapitel beschriebenen Verbrennungsmodell ist die Modellierung der Wärmefreisetzung. Der Verbrennungsvorgang kann, wie im Kapitel 2.1. beschrieben, in reaktionskinetisch kontrollierte Vormischverbrennung ($Da > 1$), mischungskontrollierte Diffusionsverbrennung ($Da \gg 1$) und eine Ausbrandphase ($Da > 1$) eingeteilt werden. Vor diesem Hintergrund ist leicht erkennbar, dass die Herausforderung bei der Verbrennungsmodellierung darin liegt, zwei unterschiedlich verlaufende Verbrennungsvorgänge – die Vormisch- und die Diffusionsverbrennung – zu beschreiben.

Der in dieser Arbeit verwendete Ansatz zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung, im Folgenden 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell oder nur PDF-Timescale-Modell genannt, basiert auf einer Idee von Rao und Rutland [61], [62]. Das 7-Spezies-PDF-Timescale Verbrennungsmodell verbindet Eigenschaften eines stationären Flamelet-Modells [51] (dazu s. Kapitel 5) bzw. des 0D-Reaktormodells mit Eigenschaften des sogenannten Mixing-Timescale Modells [63], [64].

Basierend auf dem Mixing-Timescale-Modell hat Steiner [10], [65] das 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell vorgeschlagen. Das Modell baut auf dem 7-Spezies-Progressvariablenkonzept auf. Der Hauptunterschied zum Mixing-Timescale-Modell ist die Einführung des Mischungsbruchraums Z mit entsprechender Berücksichtigung der turbulenten Gemischverteilung auf Basis einer β -PDF. Da die Abbildung von Turbulenzeffekten implizit durch die Varianz der PDF erfolgt, entfällt die explizite Berechnung der turbulenten Zeitskala τ_{turb} .

Diese kann somit in der ursprünglichen Modellgleichung zur Berechnung der charakteristischen Zeitskala τ_{chem} eliminiert werden (s. [10]). Damit ergibt sich:

$$\frac{dy_i}{dt} = \frac{\tilde{y}_i^* - y_i}{\tau_{chem}} \quad (3.33)$$

Die chemische Zeitskala τ_{chem} wird dabei weiterhin mit Hilfe eines Arrhenius-Ansatzes bestimmt. Der Einfluss der Turbulenz auf die Gemischverteilung wird durch die turbulente Berechnung der Gleichgewichts-Spezieskonzentration \tilde{y}_i^* gemäß folgender PDF-Integration berücksichtigt:

$$\tilde{y}_i^* = \int_0^1 y_i^*(Z) \tilde{P}(Z) dZ \quad (3.34)$$

Die Gleichgewichtskonzentrationen $y_i^*(Z)$ stammen dabei, wie auch beim Mixing-Timescale-Modell, von einem analytischen Gleichgewichtslöser. Zur Integration der β -PDF kommt ein semianalytisches Integrationsverfahren [10], welches die Rechenzeiten zudem auf einem niedrigen Niveau hält.

4. Stand der Technik

Emissionsmodellierung

Bei der idealen Verbrennung eines nur aus C- und H-Atomen bestehenden Brennstoffes enthält das Abgas die Komponenten Stickstoff (N_2), Kohlendioxid (CO_2) und Wasser (H_2O). Außerdem enthält das Abgas bei überstöchiometrischem Luft-Kraftstoff-Verhältnis Sauerstoff (O_2) und bei Verbrennungstemperaturen von über 2000 K Stickoxide (NO_x). Bei einer realen Verbrennung treten zusätzlich zu diesen Bestandteilen auch die Produkte der unvollständigen Verbrennung Kohlenmonoxid (CO) und unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC) sowie Rußpartikel auf (s. Kapitel 2). Die Entstehung dieser Schadstoffe ist ein sehr komplexes Problem. Insbesondere die Rußentstehung ist einer der komplexesten chemischen Vorgänge bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen. Innerhalb weniger Millisekunden entstehen aus einfach strukturierten Kohlenwasserstoffen Rußpartikel, die im Falle von Rußagglomeraten aus 100.000.000 Kohlenstoffatomen bestehen können. Gleichzeitig werden viele der existierenden Partikel oxidiert, weswegen die Rußmodellierung wesentlich komplexer als die NO_x -Modellierung ist. Die Rußbildung reagiert sehr sensitiv auf Flammentemperatur und Radikalkonzentrationen. Für die korrekte Beschreibung der Schadstoffbildung müssen deswegen alle relevanten Prozesse im Dieselmotor – ausgehend von der Einspritzung, über Kraftstoffstrahlzerstäubung, Massen-, Impuls- und Energietransfer zwischen Flüssig- und Gasphase bis zur Zündung und Energiefreisetzung – korrekt modelliert werden.

4.1. Rußphänomenologie

Die chemischen und physikalischen Mechanismen bei der Partikelentstehung sind zwar in groben Zügen verstanden, jedoch in vielen Details nicht hinreichend gut. So verläuft die Partikelentstehung nach heutigem Verständnis nach dem Schema ab, das in Abb. 4.1 dargestellt ist und im Folgenden erläutert wird.

Unter sauerstoffarmen Bedingungen findet chemische Reduktion der Brennstoffmoleküle zu kleinen Kohlenwasserstoffen statt. Dabei sind kleine Alkene, Dialkene und Alkine und

deren Radikale von besonderer Bedeutung. In dieser Phase werden die ersten Benzolringe gebildet. Durch Polymerisation von Ringen und fortschreitender Dehydrierung werden die sogenannten polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen **PAK** (engl. polycyclic aromatic hydrocarbons **PAH**) gebildet. Der prozentuale Anteil der Kohlenstoffatome steigt dabei an.

Der nächste Schritt der Rußentstehung wird durch Kondensation und Bildung von Rußkernen (Nukleation) mit Abmessungen von etwa 1 bis 2 nm charakterisiert. Bei diesen schon dreidimensionalen Gebilden handelt es sich um die ersten Rußpartikel. Durch Oberflächenwachstum und Koagulation von Rußkernen entstehen Rußprimärteilchen mit Durchmessern von etwa 20-30 nm, wobei sich an der Oberfläche anschließend verschiedene Substanzen anlagern können. Durch Agglomeration schließen sich diese Rußprimärteilchen im nächsten Schritt zu langen kettenförmigen Strukturen.

Die so entstandenen Agglomerate und deren Zwischenspezies können durch Fragmentierung und insbesondere durch Oxidation mit O_2 -Molekülen und OH -Radikalen verkleinert werden.

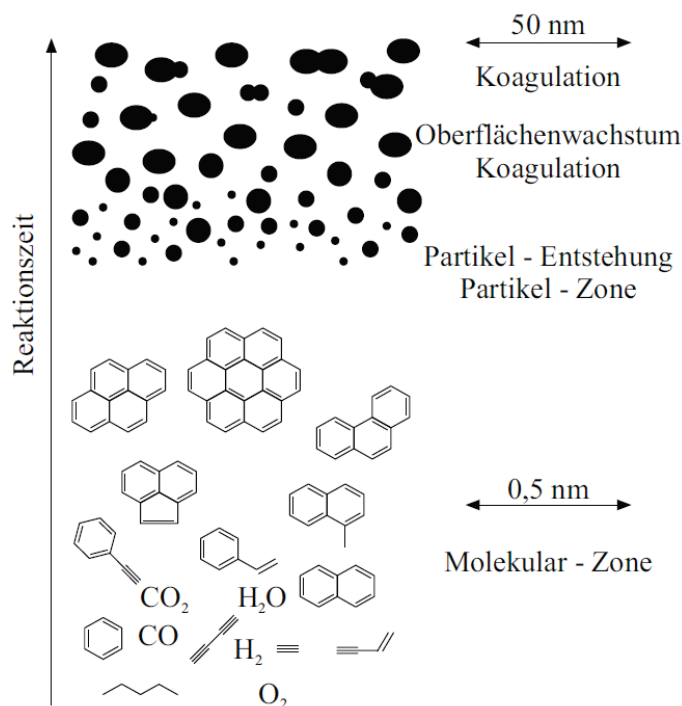


Abbildung 4.1.: Prinzipskizze der Rußbildung [12],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Bockhorn, H., (Ed.): Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models, A Short Introduction to the Problem - Structure of the Following Parts, Springer Series in Chemical Physics, Vol. 59, p. 4, Fig. 1, Springer-Verlag, Berlin, 1994

4.1.1. Polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK)

Die Bildung des ersten aromatischen Kohlenwasserstoff-Ringes (auch Benzol-Ring genannt) ist ein wichtiger Schritt in der Rußbildung. Er kann oftmals der geschwindigkeitsbe-

stimmende Schritt sein. So skaliert beispielsweise die Rußbildung in mit unterschiedlichen Heptanisomeren angereicherten, nicht-vorgemischten Methanflammen linear mit der gebildeten Benzolkonzentration [13].

Die Bildung des ersten Benzolringes kann über unterschiedliche Reaktionspfade ablaufen, deren relative Anteile vom Brennverfahren und dem eingesetzten Kraftstoff abhängen [5]. In diesem Unterkapitel sollen die zwei meist verbreiteten Hypothesen zur Bildung des ersten Benzolrings - die Acetylen- und die Ionen-Hypothese - näher beschrieben werden.

Aufgrund der hohen Verbrennungstemperaturen werden die Kraftstoffmoleküle durch Zeretzungsprozesse sowie durch Pyrolyse unter Abspaltung von Wasserstoff zu Acetylen (C_2H_2) abgebaut. Die Acetylen-Hypothese besagt, dass sich mehrere Moleküle dieses bei fetter Verbrennung entstehenden Acetylens zu einem ersten Benzolring unter Anlagerung von H^* und Abspaltung von H_2 zusammenfügen. In einer ersten Reaktion reagiert ein Acetylen-Molekül mit einem Vinylradikal (C_2H_3). Nachfolgend sind je nach lokaler Temperatur zwei verschiedene Reaktionswege möglich wie in Abb. 4.2 dargestellt. Dabei wird jeweils noch ein Acetylen-Molekül zur Schließung des Benzolrings verbraucht [14]. Bei hohen Temperaturen entsteht ein Phenyl-, bei niedrigen Temperaturen ein Benzolring.

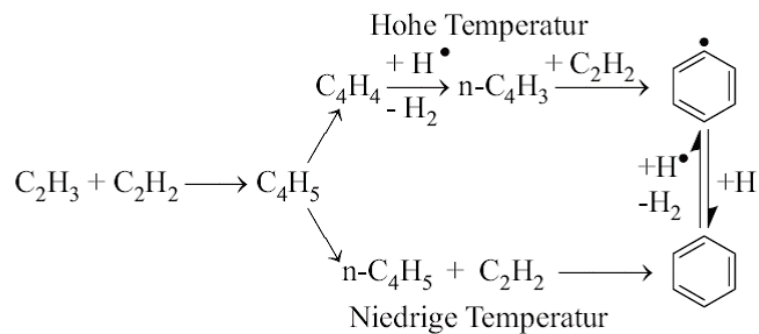


Abbildung 4.2.: Acetylenhypothese zur Entstehung von Benzolringen [14],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Frenklach, M., Wang, H.: Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models, Detailed Mechanism and Modeling of Soot Particle Formation, Springer Series in Chemical Physics, Vol. 59, p. 167, Fig. 10-1, Springer-Verlag, Berlin, 1994

Die neue Hypothese, die dieser Arbeit zugrunde liegt, geht dagegen davon aus, dass die Acetylen-Moleküle zunächst mit bei fetten Gemischen vorliegenden CH - oder CH_2 -Gruppen zu C_3H_3 reagieren [130], [189]. Propargyl, eine stabile Form von C_3H_3 , ist relativ unreaktiv, weswegen seine Konzentration in der Flamme signifikant ansteigt. Zwei solcher C_3H_3 -Radikale können zu der Zwischenspezies Fulven reagieren, aus dem anschließend durch H assistierte Isomerisation ein Benzol-Ring gebildet wird (s. Abb. 4.3).

Anschließend findet durch fortschreitende H -Abspaltung und C_2H_2 -Anlagerung ein planares Wachstum der PAKs statt, das zusammenhängende PAK-Ringe zur Folge hat (s. Abb. 4.4a). Dieser Mechanismus wird HACA-Mechanismus genannt (engl. Hydrogen Abstraction Carbon Addition). Obwohl dieser Mechanismus dominierend ist, ist unter gewissen Umständen auch eine Reaktion der aromatischen Ringe mit anderen Spezies möglich. Das

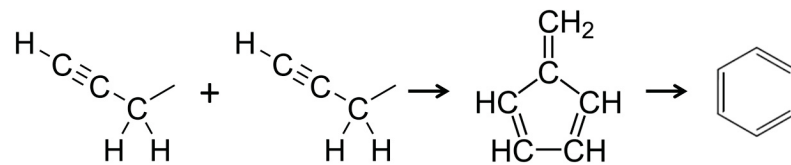


Abbildung 4.3.: Hypothese zur Entstehung von Benzolringen nach [130], [189]

Wachstum des ersten Ringes kann nach [15] auch als schnelle Polymerisation aufgefasst werden. Des Weiteren können solche zusammenhängende PAK-Strukturen auch durch den direkten Zusammenschluss von Benzolringen entstehen (s. Abb. 4.4b). Man geht heute davon aus, dass im Brennstoff enthaltenen Aromaten unter sauerstoffarmen Bedingungen zunächst nicht in kleinere Kohlenwasserstoffe zerfallen, sondern direkt an dem PAK-Bildungsprozess teilnehmen [16].

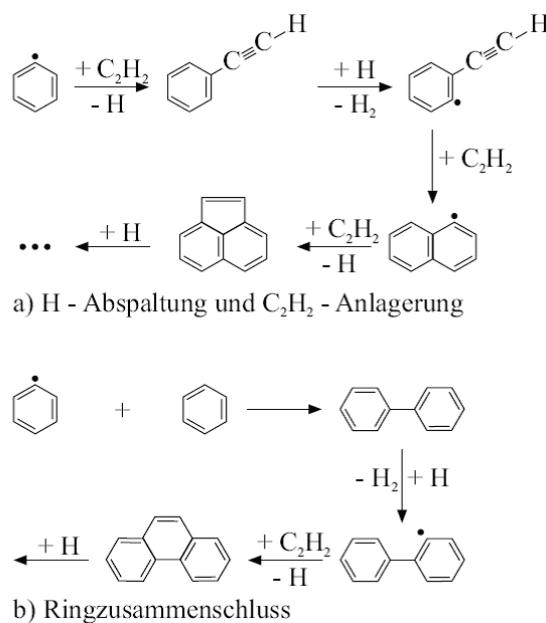


Abbildung 4.4.: PAK-Wachstum [14],

Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Frenklach, M., Wang, H.: Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models, Detailed Mechanism and Modeling of Soot Particle Formation, Springer Series in Chemical Physics, Vol. 59, p. 169, Fig. 10-3, Springer-Verlag, Berlin, 1994

4.1.2. Die Entstehung von Ruß

Die polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffe wachsen zu immer größeren Gebilden an. Von Rußpartikeln spricht man ab dem Moment, in dem die zusammengeschlossenen PAKs nicht mehr in einer Ebene liegen, sondern räumliche Strukturen darstellen. Ein möglicher Mechanismus, der zur Bildung solcher Gebilde führt, ist die Kollision zwischen zwei PAK-Molekülen. Die auf dieser Weise gebildeten Rußkerne weisen einen Durchmesser von

etwa 1 bis 2 nm auf. Diese Rußkerne machen nur einen kleinen Anteil der Gesamtpartikelmasse aus, dennoch sind sie von entscheidender Bedeutung für die weitere Rußbildung. Auf ihnen findet das sogenannte Oberflächenwachstum statt, bei dem sich Moleküle aus der Gasphase an die Rußpartikel anlagern. Man geht davon aus, dass das Oberflächenwachstum zu einem großen Teil über Acetylen-Moleküle, in einem dem HACA-Mechanismus ähnlichen Prozess, stattfindet. Oberflächenwachstum kann auch über Kondensation von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen auf der Rußoberfläche erfolgen. Auch Sulfate können auf der Oberfläche haften bleiben [5].

Die Kollision von relativ kleinen Partikeln führt zu Koagulation, d. h. zwei kollidierende, näherungsweise sphärische Partikel bilden ein größeres, ebenfalls sphärisches Partikel. Größere Partikel agglomerieren, d. h., die an der Kollision beteiligten Partikel behalten ihre Form und haften aneinander [5]. Die einzelnen agglomerierten Partikel nennt man Rußprimärteilchen. Unter dieselmotorischen Bedingungen besitzen sie einen Durchmesser von etwa 15 nm bis 35 nm [17]. Die agglomerierten Partikel bilden oft eine verzweigte, kettenförmige Struktur.

Während des gesamten Rußbildungsprozesses kann es gleichzeitig zur Rußoxidation kommen, wobei je nach Randbedingungen molekularer Sauerstoff O_2 , das Hydroxylradikal OH oder das Sauerstoffradikal O die Rolle des Reaktionspartners einnehmen können [138]. Die Rußoxidation durch Sauerstoffradikale spielt dabei eine untergeordnete Rolle. Im Vergleich zu Rußbildung ist die Rußoxidation nicht so detailliert erforscht. Die Kinetik der OH -Oxidation wurde aber schon von Fenimore und Jones in [149] beschrieben. Sie stellten fest, dass ca. 10% aller Kollisionen von Rußpartikeln und OH -Radikalen in einen Kohlenstoffreduktion resultieren. Neoh zeigte in [151] auf, dass der OH -Rußoxidationspfad dominierend unter stöchiometrischen oder fetten Bedingungen ist. Eine Beschreibung der Rußoxidation durch atomaren Sauerstoff wurde zuerst von Nagle und Strickland [79] vorgeschlagen. Sie entwickelten ein semi-empirisches Modell, das zwei Reaktionszonen auf dem Rußpartikel berücksichtigen: (1) eine reaktive Zone A und (2) eine weniger reaktive Zone B. Dieses Modell wird später in diesem Kapitel detailliert beschrieben, weswegen hier auf eine Erläuterung verzichtet wird.

4.2. Rußmodellierung

In diesem Unterkapitel sollen bisher vorhandene Ansätze zur Rußmodellierung beschrieben und bewertet werden. Einen umfangreichen Überblick über die Arbeiten bis 1981 gibt die Zusammenfassung von B. S. Haynes and H. Gg. Wagner [66]. Aktueller sind die Resümees von I. Glassman [67] and M. Frenklach [68]. Der Schwerpunkt von Glassman's Arbeit liegt auf experimentellen Ergebnissen, während Frenklach hauptsächlich kinetische Reaktionsmechanismen der Rußbildung behandelt. Eine Sammlung von theoretischen und experimentellen Untersuchungen auf dem Gebiet der Rußforschung findet sich auch in dem Buch "Soot Formation in Combustion" von Bockhorn [12]. Unterschiedliche Modellansätze für Rußbildung und Oxidation wurden auch in einem sehr umfassenden Artikel aus dem Jahr 1997 von I. M. Kennedy [69]. Die unterschiedlichen Ansätze zur Rußmodellierung werden in der Arbeit von Kennedy in drei Kategorien eingeteilt [69]:

- empirische Modelle
- semi-empirische Modelle, bei denen Rußraten (Rußbildung und Rußoxidation) auf Basis von experimentellen Daten berechnet werden
- detaillierte Modelle, bei denen für die Berechnung von Rußraten auf die elementaren chemischen Reaktionen zurückgegriffen wird, die zur Rußbildung bzw. Rußoxidation führen

Diese Kategorisierung bezieht sich in erster Linie auf den Detaillierungsgrad der Modellierung der Rußchemie. Ein weiterer sehr wichtiger Aspekt bei der Beschreibung der Rußbildung bzw. Rußoxidation in turbulenten Flammen ist die Chemie-Turbulenz-Interaktion. Diese ist deswegen so entscheidend, da Turbulenzmodellierung Einfluss auf die Güte der Gemischbildungs- und somit der Simulation der Diffusionsverbrennung hat. Die Klassifizierung der hier beschriebenen Modelle erfolgt deswegen in Abhängigkeit von dem Detaillierungsgrad der Rußchemiemodellierung und dem Detaillierungsgrad der Modellierung der Chemie-Turbulenz-Interaktion (s. Abb. 4.5).

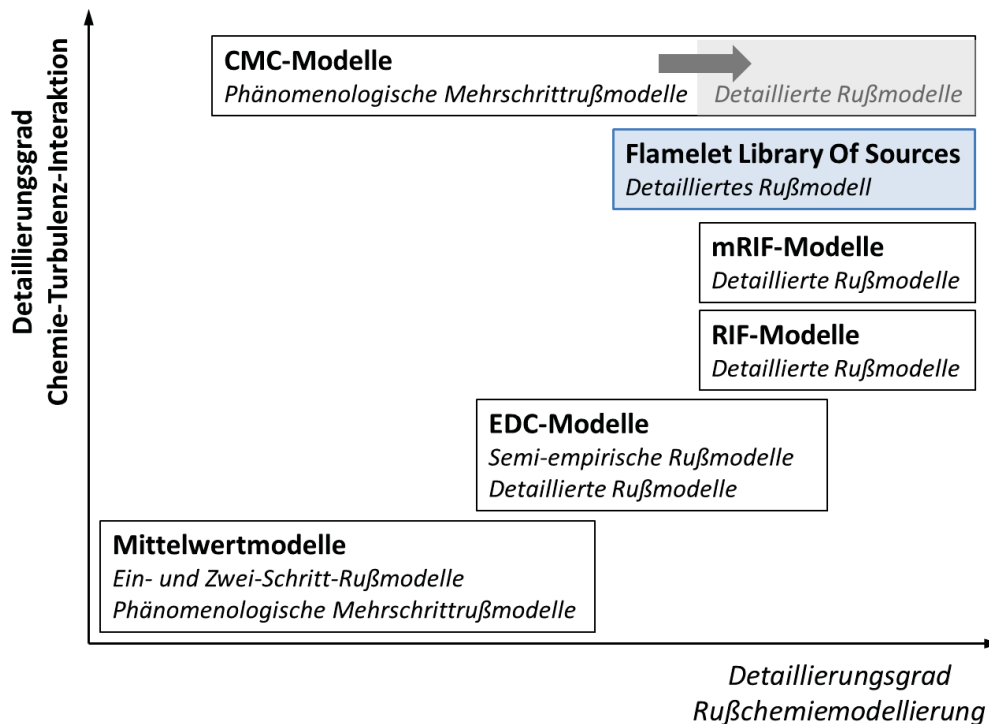


Abbildung 4.5.: Klassifizierung von Rußmodellen in Abhängigkeit vom Detaillierungsgrad der Rußchemie- und Turbulenzmodellierung

Ganz unten auf der Skala der Turbulenzmodellierung finden sich Mittelwertmodelle, bei denen Mischungsinhomogenitäten nicht berücksichtigt werden. Die Rußchemie wird dabei meistens sehr einfach modelliert werden, indem nur ein Reaktionsschritt – Rußbildung – oder zwei Reaktionsschritte – Rußbildung und –oxidation – modelliert werden. Der Einsatz von sehr einfachen Chemie-Turbulenz-Interaktionsmodellen mit detaillierten Rußmodellen wird nicht verfolgt, da eine hohe Genauigkeit bei der Darstellung der Chemie

Fehler in der Chemie-Turbulenz-Interaktion nicht ausgleichen kann. EDC-Modelle, die im Vergleich zu Mittelwertmodellen einen höheren Detaillierungsgrad der Chemie-Turbulenz-Interaktion aufweisen, werden häufig mit semi-empirischen oder detaillierten kinetischen Rußmodellen verknüpft. Interaktive Flamelet-Modelle (RIF, engl. representative interactive flamelet) können Zündung und Verbrennung mit detaillierten chemischen Modellen beschreiben. Für die Emissionsberechnung fehlt jedoch die räumliche Auflösung. Dieser Nachteil kann teilweise durch die Berücksichtigung von mehreren Flamelets ausgeglichen werden (Multiple-RIF-Modelle).

Das in dieser Arbeit vorgestellte Verfahren verknüpft ein PDF-Timescale-Modell mit einem detaillierten Rußmodell. Dabei werden die Rußquellterme mit Hilfe von Flamelets tabelliert, wodurch die CPU-Zeit-Effizienz deutlich gesteigert wird. Außerdem gewinnt das Gesamtmodell aufgrund von transportierten Rußerhaltungsgrößen eine hohe räumliche Auflösung. Nachteilig ist die Annahme von konstanten Rußgrößen im Mischungsbruchraum. Bei den genauesten Modellen hinsichtlich Modellierung der Chemie-Turbulenz-Interaktion - den sogenannten CMC-Modellen [153] - ist diese Vereinfachung nicht erforderlich (s. Kapitel 4.4.4). Allerdings konnten die CMC-Modelle aufgrund der CPU-Zeit intensiven Erhaltungsgleichungen bisher nur mit einfachen Rußmodellen gekoppelt werden.

Stellvertretend für die unterschiedlichen Rußmodellkategorien werden in diesem Kapitel hauptsächlich Modelle vorgestellt, bei denen eine Validierung auf Basis von Messungen aus typischen technischen Anwendungen wie Gasturbinen und insbesondere Dieselmotoren vorgenommen wurde. Zur Bewertung der Eignung dieser Modelle für den industriellen Einsatz sollen hier Kriterien eingeführt werden. Ein Rußmodell als Teil des gesamten CFD-Simulationspakets, das für dieselmotorische Brennverfahrensentwicklung eingesetzt wird, soll folgende Merkmale aufweisen:

- **CPU-Effizienz:** Brennraumoptimierung innerhalb eines akzeptablen Zeitrahmens ermöglichen, welches meistens die Einführung einer limitierten Anzahl von zusätzlichen Variablen und Transportgleichung bedeutet
- **Allgemeingültigkeit:** für unterschiedliche Motoren und Betriebsstrategien gültig sein
- **Detaillierte Rußchemiemodellierung:** wenn notwendig, detaillierte Rußchemie abbilden können, ohne dabei detaillierte Chemie für das gesamte Strömungsfeld lösen zu müssen
- **Abbildung lokaler Rußphänomene:** in der Lage sein, abhängig von lokalen Temperaturen und Spezieskonzentrationen lokale Rußbildungs- und -oxidationsraten bzw. lokale Rußkonzentrationen zu liefern
- **Chemie-Turbulenz-Interaktion:** in der Lage sein, abhängig von lokalen Strömungsverhältnissen Einfluß auf lokale Rußbildungs- und -oxidationsraten abzubilden

Vor dem Hintergrund der Vor- und Nachteile der jeweiligen Modellgruppen, die in Abb. 4.5 dargestellt sind, wird im Kapitel 5 die Modellauswahl für diese Arbeit begründet.

4.2.1. Empirische Mittelwertmodelle

Die meisten empirischen Rußmodelle wurden zur Vorausberechnung der Rußemissionen im Dieselmotoren- und Gasturbinenbereich entwickelt [69], [71], [72], [73], [74]. Ein typisches Beispiel für ein einfaches empirisches Rußmodell ist das Rußmodell von Khan et al. [75] aus dem Jahr 1971. Dieses Modell bildet die Basis für zahlreiche empirische Modelle aus späterer Zeit. Eine Grundannahme bei dem Rußmodell von Khan ist die konstante Rußpartikelgröße (unabhängig von Drehzahl und Last). Des Weiteren nehmen sie an, dass die Rußbildungsrate ausschließlich von der Nukleationsrate (Rußpartikelentstehung) abhängt. Diese wird als Funktion von Druck, Luftverhältnis des unverbrannten Gases und Temperatur modelliert. Die entsprechende Gleichung sieht wie folgt aus:

$$\frac{dC_s}{dt} = c \frac{V_u}{V_{\text{NTP}}} P_u \chi^n \exp\left(\frac{-E}{RT_u}\right) \quad (4.1)$$

Die Modellparameter wurden anhand von Rußmessdaten von einem DI-Dieselmotor angepasst. Die Intensität der Luft-Kraftstoff-Durchmischung wird durch zwei zusätzliche Parameter berücksichtigt. Der Erste modelliert die großräumigen Mischungseffekte und wurde „air entrainment ratio“ (Rate der Luftansaugung am Strahlrand) genannt. Dieser Parameter hängt von der Drehzahl ab. Der zweite Mischungsparameter, die Diffusionskonstante, soll die kleinskaligen Mischungseffekte abbilden und ist somit für die Mischung der Reaktanden in der Mischungszone bzw. die Wärmefreisetzungsrate entscheidend. Insbesondere der erste Mischungsmodellparameter, das sog. „air entrainment ratio“, beeinflusste ausschlaggebend die berechnete Rußemissionen.

In einer späteren Veröffentlichung haben Khan et al. [76] die Vorhersagefähigkeit ihres Rußmodells demonstriert. Dabei wurden Modellergebnisse mit Messdaten von einem DI-Dieselmotor verglichen (s. Abb. 4.6). Im Allgemeinen konnten relativ gute Ergebnisse für einen breiten Drehzahl- und Lastbereich erzielt werden. Als Hauptnachteil des Modells kann die Nicht-Modellierung der Rußoxidation genannt werden. Die trotzdem guten Ergebnisse können mit der genügend hohen Anzahl an Modellparametern erklärt werden, die eine exakte mathematische Modellierung ermöglichen. Nichtsdestotrotz ist von einem Modell dieser Art keine Übertragbarkeit auf andere Motoren zu erwarten. Des Weiteren sind sie absolut ungeeignet für den CFD-Einsatz

Bei dem oben beschriebenen Modell von Khan spricht man von einem 1-Schritt-Modell. Das heißt, dass Ruß nur durch eine Reaktion - die Rußbildung - beschrieben wird. Hiroyasu et al. [70] gingen bei ihrer Modellierung einen Schritt weiter und modellierten zusätzlich die Rußoxidation. Deshalb spricht man hier von einem Zwei-Schritt-Modell. Der erste Schritt ist ein Bildungsschritt, bei dem die Rußbildungsrate direkt von der Kraftstoffdampfmasse anhängt. Der zweite Schritt ist der Konsumationsschritt, der die Rußoxidation in Abhängigkeit der Sauerstoffkonzentration beschreibt. Die akkumulierte Rußreaktionsrate ist gleich der Differenz zwischen Rußbildungs- und Rußoxidationsrate:

$$\frac{dm_{\text{soot}}}{dt} = \left(\frac{dm_{\text{soot}}}{dt}\right)_{\text{form}} - \left(\frac{dm_{\text{soot}}}{dt}\right)_{\text{oxid}} \quad (4.2)$$

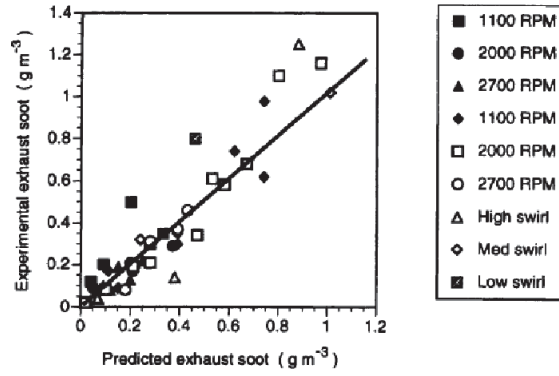


Abbildung 4.6.: Vergleich von gemessenen und berechneten Rußemissionen mit dem Modell von Khan et. al. [76],
 Khan, I. M., Greeves, G.: *International Seminar, Trogir, Yugoslavia, 1973, with permission from Elsevier*

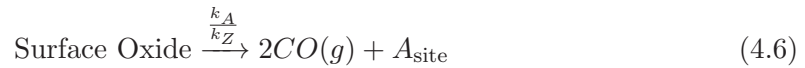
Dabei wird die Rußbildungs- bzw. Rußoxidationsrate in Arrhenius-Form angegeben:

$$\left(\frac{dm_{\text{soot}}}{dt}\right)_{\text{form}} = A_f m_{\text{fuel}} p^{0.5} \exp\left(\frac{-E_f}{RT}\right) \quad (4.3)$$

$$\left(\frac{dm_{\text{soot}}}{dt}\right)_{\text{oxid}} = A_O m_{\text{soot}} X_{\text{O}_2} p^{1.8} \exp\left(\frac{-E_O}{RT}\right) \quad (4.4)$$

mit $E_f = 8.0 \cdot 10^4$ [J/mol] und $E_O = 1.2 \cdot 10^5$ [J/mol].

Die Modellkonstanten A_f und A_O dienen zur Modellkalibrierung. Patterson et al. [77] ersetzen den Oxidationsschritt durch das Rußoxidationsmodell von Nagle-Strickland-Constable (NSC) [79]. Das Letztere ist ein semi-empirisches Modell, das zwei Reaktionszonen auf dem Rußpartikel berücksichtigt: (1) eine reaktive Zone A und (2) eine weniger reaktive Zone B. Der relative Anteil des Reaktionszone A bzw. B wird dabei mit x_A bzw. $(1 - x_A)$ bezeichnet. Das NSC-Reaktionsschema wird wie folgt angegeben:



Somit wird die NSC-Oxidationsrate mit:

$$\dot{R}_{\text{NSC}} = \left[\left(\frac{k_{A\text{PO}_2}}{1 + k_{Z\text{PO}_2}} \right) x_A + k_{B\text{PO}_2} (1 - x_A) \right] \quad (4.9)$$

angegeben. Der relative Anteil x_A kann mittels einer Steady-State-Annahme für die reaktive Zone A bestimmt werden:

$$x_A = \frac{k_{B\text{PO}_2}}{1 + k_T} \quad (4.10)$$

Damit ergibt sich für die Rußoxidationsrate nach Nagle-Strickland-Constable:

$$\left(\frac{dm_{\text{soot}}}{dt} \right)_{\text{oxid}} = \frac{6m_{\text{soot}}}{\rho_{\text{soot}} D_{\text{soot}}} M_C \dot{R}_{\text{NSC}} \quad (4.11)$$

mit $\rho_{\text{soot}} = 2000 \text{ kg/m}^3$ und $D_{\text{soot}} = 25 \text{ nm}$.

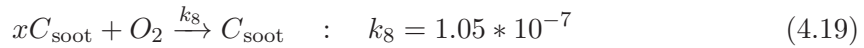
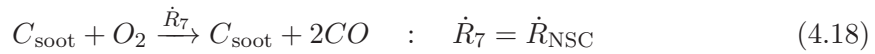
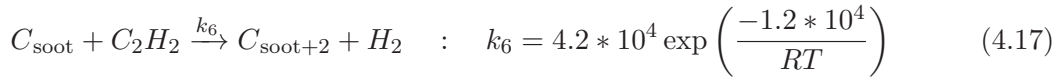
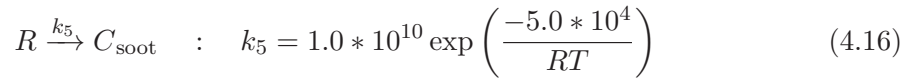
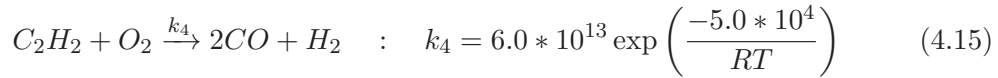
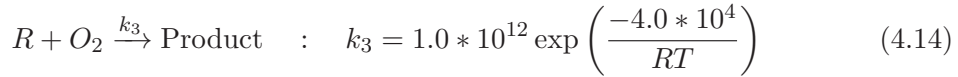
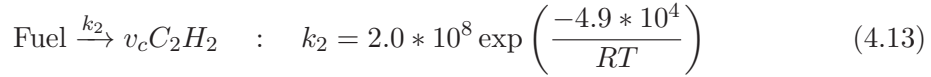
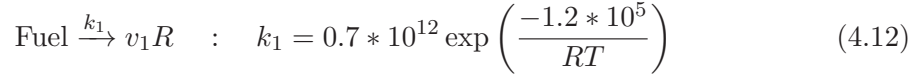
Das Modell von Hiroyasu [70] und seine Modifikation durch das NSC-Rußoxidationsmodell [79] wurden von zahlreichen Arbeitsgruppen angewandt und adaptiert [80], [81], [82]. Dabei konnten nach erfolgreicher Einstellung der Modellkonstanten und -parameter meistens gute qualitative Ergebnisse erzielt werden. Aufgrund der wenigen zusätzlichen Gleichungen und Variablen ist das Modell sehr Rechenzeiteffizient. Für eine Applikation in neuen Betriebsbereichen oder für neue Motoren erfordert das Modell allerdings eine erneute Anpassung von Modellkonstanten und Modellparametern [84], [85], [86], [87], [88], [89], [90]. Dies liegt an der sehr einfachen Chemiemodellierung und der Nicht-Berücksichtigung der wichtigen Chemie-Turbulenz-Interaktion. Dies ist einer der Hauptnachteile empirischer Modelle, die in Tab. 4.1 bewertet sind.

Kriterium	Bewertung
CPU-Effizienz	++
Allgemeingültigkeit	--
Detaillierte Rußchemiemodellierung	--
Abbildung lokaler Rußphänomene	-
Chemie-Turbulenz-Interaktion	-

Tabelle 4.1.: Bewertung empirischer Ein- und Zwei-Schritt-Modelle

Um den direkten Zusammenhang zwischen der Konzentration der Kraftstoffdampfmolekülen und Rußpartikeln zu unterbinden, wurden von zahlreichen Arbeitsgruppen zusätzliche chemische Rußbildungs- bzw. -oxidationsreaktionen berücksichtigt. Als Beispiel kann hierzu das 8-Schritt-Modell von Fusco et al. [84] oder das 9-Schritt-Modell von Tao et al. [91] genannt werden. Bei diesen Modellen handelt es sich um sog. MSP-Modelle (Multi-Step Phenomenological). Der Modell von Fusco et al. [84] weist beispielsweise zwei intermediäre Spezies zwischen Kraftstoffdampfmolekülen und Rußpartikeln auf. Die acht globalen Schritte beschreiben die Nukleation-, Partikelkoagulation-, Oberflächenwachstum- und

Oberflächenoxidationsreaktionen sowie die Reaktionen zur Bildung und Oxidation von den intermediären Spezies. Diese sind wie folgt:



Die kumulativen Bildungsrate vom Rußvorläufer R , Acetylen C_2H_2 , Rußvolumenbruch f_v und der Rußpartikeldichte f_N ergeben sich damit zu:

$$\frac{d}{dt}[R] = v_1 k_1 [\text{Fuel}] - k_3 [R][O_2] - k_5 [R] \quad (4.20)$$

$$\frac{d}{dt}[C_2 H_2] = v_2 k_2 [\text{Fuel}] - k_4 [C_2 H_2][O_2] - k_6 [C_2 H_2](A_{\text{soot}})^{0.5} \quad (4.21)$$

$$\frac{d}{dt}(\rho_s f_v) = \left(k_5 [R] + k_6 [C_2 H_2](A_{\text{soot}})^{0.5} - \frac{6m_{\text{soot}}}{\rho_{\text{soot}} D_{\text{soot}}} \dot{R}_{\text{NSC}} \right) M_C \quad (4.22)$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{f_N}{N_A} \right) = k_5 [R] - k_8 T^{0.5} f_v^{\frac{1}{6}} f_N^{\frac{11}{6}} \quad (4.23)$$

wobei v_1 und v_2 stöchiometrische Koeffizienten sind. Die Gesamttrüßflächendichte wird mit

$$A_{\text{soot}} = \pi D_{\text{soot}}^2 f_N \quad (4.24)$$

angegeben. In Abbildung 4.7 wird das Modell von Fusco et al. [84] schematisch dargestellt. Der Rußvorläufer R und Acetylen spielen dabei die Rolle der Oberflächenwachstumsspezies. Es wird angenommen, dass sie Produkte reiner Kraftstoffpyrolyse sind. Für eine bessere Modellierung der Physik der Partikelbildung wurde das Modell von Kazakov und Foster [92] weiterentwickelt, indem eine generische Spezies zur Beschreibung des Oberflächenwachstums und eine Koagulationskonstante eingeführt wurden. Das MSP-Modell von Fusco et al. [84] ist ebenso CPU-Zeit effizient wie das Hiroyasu-Rußmodell [70], liefert aber nützliche lokale Zusatzinformationen wie Acetylenkonzentration, Rußpartikeldichte und Rußpartikelgröße. Um gute globale Ergebnisse zu erreichen, bedarf es allerdings einer umfangreichen Kalibrierung der Reaktionskonstanten [83].

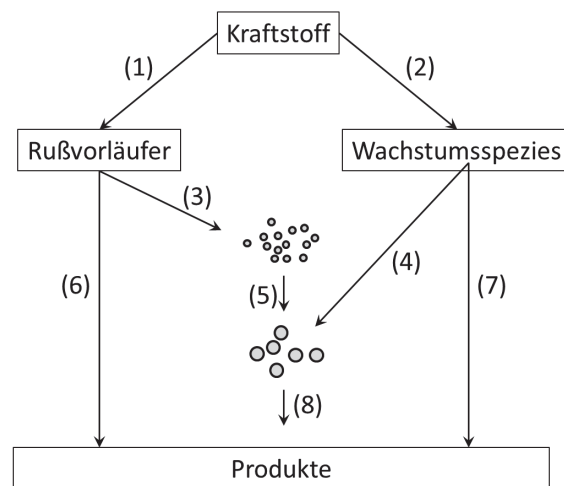


Abbildung 4.7.: Schematische Darstellung des 8-Schritt-MSP-Rußmodells von Fusco et al. [84]

Bemerkenswert ist der Ansatz von Tao et al. [93], [94]. Dabei wird ein eher einfaches MSP-Rußmodell, das viele Gemeinsamkeiten mit dem Modell von Fusco et al. [84] aufweist, mit einem detaillierten Verbrennungsmodell (65 Spezies und 268 Reaktionen) gekoppelt. Um auch Turbulenzeffekte in Betracht zu ziehen wird ein teilweise gemischter Reaktor als Subgrid-Modell implementiert. Die Applikation dieses Modells auf dieselmotorische Rußbildung brachte zwar einige Vorteile einfacheren phänomenologischen Modellen gegenüber, die aber die angestiegene Rechenzeit nicht rechtfertigten [83].

Phänomenologische Modelle wurden auch im dieselmotorischen CFD-Simulationsbereich eingesetzt, z. B. das Modell von Hong et al. [95], das einen globalen Reaktionsschritt zur Bildung des ersten Rußpartikels direkt über Acetylen aufweist. Solche Modelle werden oft mit Eddy-Dissipation basierten Verbrennungsmodellen gekoppelt. Die berechnete Ruß-Lift-off-Länge wird dabei entscheidend von der Wahl der Nukleationsspezies beeinflusst, wie von Vishwanathan et al. diskutiert [96]. Dies verdeutlicht die Notwendigkeit einer detaillierten PAK-Kinetik in einem Rußmodell, das in einem breiten Betriebs- sowie Motorenbereich angewandt werden soll.

Kriterium	Bewertung
CPU-Effizienz	++
Allgemeingültigkeit	-
Detaillierte Rußchemiemodellierung	o
Abbildung lokaler Rußphänomene	+
Chemie-Turbulenz-Interaktion	o

Tabelle 4.2.: Bewertung empirischer Mehr-Schritt-Modelle (MSP)

4.2.2. Semi-empirische Modelle

Der Detaillierungsgrad der Rußmodellierung bei semi-empirischen Modellen wird im Vergleich zu den empirischen Modellen dadurch gesteigert, dass einige physikalische und chemische Aspekte der Rußphänomenologie unter Berücksichtigung von Messdaten in der Rußmodellierung integriert werden. Dabei werden in der Regel einfache chemische Reaktionen für Vorläuferspezies und Rußpartikel in Betracht gezogen [81], [97]. Häufig werden solche Modelle auf Basis von Messungen in laminaren Flammen entwickelt und validiert, um später in Simulationtools für turbulente Verbrennung integriert zu werden. Damit wird eine Trennung von chemischen und physikalischen Aspekten der Rußbildung bezweckt. Diese Strategie wurde beispielsweise von Magnussen and Hjertager verfolgt [98]. Stellvertretend für diese Modelle wird hier das Modell von Moss [108] beschrieben. Das Modell wurde in vielen Arbeiten für Rußberechnung in turbulenten Flammen eingesetzt. Es weist zwei Transportgleichungen auf: eine für die Rußpartikeldichte (Y_N) und eine für den Rußmassenbruch (Y_s). Die beiden Transportgleichungen werden über die Annahme gekoppelt, dass die Partikel sphärische Form besitzen und die Partikelgrößenverteilung monodispers ist. Das Modell berücksichtigt alle physikalischen Phasen der Rußbildung: Partikelbildung, Oberflächenwachstum, Agglomeration und Oxidation.

Der Quellterm in der Transportgleichung für den Rußmassenbruch (Y_s) und die Gleichung für die Partikeldichte (Y_N) kann wie folgt formuliert werden:

$$\rho\omega_s = R_1 + R_2 - R_3 \quad \left[\frac{\text{kg soot}}{m^3s} \right] \quad (4.25)$$

$$\rho\omega_s = R_4 - R_5 \quad \left[\frac{\text{particles}}{m^3s} \right] \quad (4.26)$$

wobei R_i die unterschiedlichen Rußmechanismen darstellen:

R_1 – Nukleation,

R_2 – Rußmassenbildung,

R_3 – Rußoxidation,

R_4 – Nukleation,

R_5 – Agglomeration.

Der Quellterm für die Nukleation (R_1) und Rußmassenbildung (R_2) werden mit einem

modifizierten Arrhenius-Ansatz modelliert:

$$k_i = A_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT}\right) \quad (4.27)$$

Der Nukleationsschritt wird mit



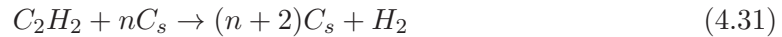
angegeben. Die dazu gehörigen Reaktionsrate ergibt sich zu:

$$R_1 = 2k_1(T)[C_2H_2]M_s \quad (4.29)$$

wobei $M_s = 12.011g/mol$ die Rußmolarmasse ist. Die Reaktionsrate der Rußpartikeldichte aufgrund von Nukleation wird angegeben mit:

$$R_4 = \frac{2}{C_{\min}} N_A k_1(T)[C_2H_2] \quad (4.30)$$

mit C_{\min} – der Anzahl der Kohlenstoffatome in der Rußpartikel. Die Rußpartikeloberfläche wächst durch Absorption von C_2H_2 nach



Das Oberflächenwachstum wird als Funktion erster Ordnung der Acetylenkonzentration angegeben:

$$R_2 = 2k_2(T)f(S)[C_2H_2]M_s \quad (4.32)$$

wobei $f(S)$ Funktion der Rußoberfläche ist. Unter der Annahme sphärischer Rußpartikel kann die Oberfläche mit

$$S = \pi d_p^2 \rho Y_N \quad (4.33)$$

angegeben werden. Mit dem Rußpartikeldurchmesser d_p

$$d_p = \left(\frac{6}{\pi} \frac{Y_s}{\rho_s Y_N}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (4.34)$$

ergibt sich die Oberfläche zu:

$$S = \pi \left(\frac{6}{\pi \rho_s Y_N}\right)^{\frac{2}{3}} Y_s^{\frac{2}{3}} \rho Y_N \quad (4.35)$$

Welcher Zusammenhang zwischen Rußoberflächenwachstum und verfügbarer Oberfläche genau besteht ist nicht hinreichend gut geklärt. Einige Experimentalstudien mit vorge-mischten Flammen haben ergeben, dass die Reaktivität der Rußpartikel mit der Verweilzeit in der Flamme abnimmt [109], [110]. Eine Möglichkeit dies zu berücksichtigen ist anzunehmen, so wie auch Lindstedt, dessen Modell sehr viele Gemeinsamkeiten mit dem Modell von Moss aufweist, dass die Anzahl der reaktiven Stellen proportional zur Wurzel der verfügbaren Rußoberfläche ist [111]. Brookes und Moss [108] haben anhand von Unter-suchungen mit Methan-Diffusionsflammen festgestellt, dass dieser Zusammenhang linear ist – eine Feststellung, die auch von Kronenburg et al. [112] bestätigt wurde.

Die Reaktionsrate für Rußwachstum kann somit folgendermaßen formuliert werden:

$$R_2 = k_2(T)\pi \left(\frac{6}{\pi\rho_s Y_N} \right)^{\frac{2}{3}} \rho Y_N Y_s^{\frac{1}{3}} [C_2H_2] M_s \quad (4.36)$$

Moss und Lindstedt betrachteten anfangs unterschiedliche Spezies als Oxidanten. Moss zog OH heran, während Lindstedt ursprünglich nur O_2 berücksichtigt hat. Da OH be-kanntermaßen eine sehr wichtige Rolle bei der Rußoxidation spielt, wurde später auch OH in Lindstedts Modell eingeführt. Die entsprechenden Oxidationsraten wurden dabei von Bradley et al. [82] übernommen. Die chemischen Modellgleichungen zur Beschreibung der Rußoxidation sind



Die Rußoxidationsrate ergibt sich somit zu:

$$R_3 = k_3(T)S[O_2]M_s + k_6(T)S[OH]M_s \quad (4.39)$$

Die Formulierung der Agglomeration wird von Wagner et al. [113] bzw. Howard et al. [114] übernommen:

$$R_5 = 2C_a \sqrt{d_p} \left(\frac{6\kappa T}{\rho_s} \right)^{\frac{1}{2}} (\rho Y_N)^2 \quad (4.40)$$

Nach Einsetzen von d_p in die Gl (4.40) ergibt sich für R_5 :

$$R_5 = 2C_a \left(\frac{6}{\pi\rho_s Y_N} \right)^{\frac{1}{6}} \left(\frac{6\kappa T}{\rho_s} \right)^{\frac{1}{2}} Y_s^{\frac{1}{6}} (\rho Y_N)^2 \quad (4.41)$$

wobei C_a die sog. Agglomerationsratenkonstante ist. Diese Formulierung, mit Ausnahme von C_a , stammt von der Kinetiktheorie der freien Moleküle. Die Korrektur durch C_a ist

deswegen notwendig gewesen, weil die gemessenen Werte für die Agglomerationsrate sonst um ein vielfaches die theoretisch berechneten überstiegen.

Kleiveland [119] untersuchte die semi-empirischen Rußmodelle von Moss und Lindstedt für turbulente Diffusionsflammen. In seiner Arbeit berichtet Kleiveland, dass sich eine Rückkopplung von Ruß- und Verbrennungsmodell bezüglich der rußrelevanten Spezies positiv auf die berechneten Rußemissionen auswirkt, während der Effekt auf die Verbrennung vernachlässigbar klein ist. Allerdings waren die simulierten lokalen Rußkonzentrationen nicht hinreichend genau: die maximale Rußkonzentration wurde überschätzt und die Ausbreitung der Rußwolke – unterschätzt. Dies wurde insbesondere auf Defizite der Modellierung der Chemie-Turbulenz-Interaktion zurückgeführt. Dies spiegelt sich auch in Tab. 4.3 wieder, in der die Bewertung der semi-empirischen Modelle dargestellt wird.

Kriterium	Bewertung
CPU-Effizienz	+
Allgemeingültigkeit	o
Detaillierte Rußchemiemodellierung	+
Abbildung lokaler Rußphänomene	+
Chemie-Turbulenz-Interaktion	o

Tabelle 4.3.: Bewertung semi-empirischer Modelle

4.2.3. Detaillierte Rußmodelle

Die detaillierten Rußmodelle zeichnen sich dadurch aus, dass der gesamte Prozess der Rußbildung – ausgehend von der Kraftstoffpyrolyse, über die Entstehung der Rußpartikel, ihr Wachstum, Koagulation bis zu ihrer Oxidation – abgebildet wird. Auf diese Art und Weise soll eine Allgemeingültigkeit der Rußchemiemodellierung gewährleistet werden. In diesem Unterkapitel werden nur die wesentlichen Merkmale von detaillierten Rußmodellen erläutert, da das detaillierte Rußmodell, das in dieser Arbeit zum Einsatz kommt, im Kapitel 5 ausführlich beschrieben wird.

Die Bildung des ersten Benzol-Rings - oftmals der geschwindigkeitsbestimmende Schritt der Rußbildung - findet in der Anwesenheit von Molekülen statt, die während der Kraftstoffersetzung entstehen. Dieser Prozess soll deshalb möglichst detailliert modelliert werden. Dabei kommen chemische Reaktionsmechanismen zum Einsatz, die den Prozess vom Reaktant zum Produkt mit den dazu gehörigen Elementarreaktionen und Zwischenprodukten beschreibt. Diese Reaktionsmechanismen stellen den ersten Schritt der detaillierten Rußchemiemodellierung dar. Ihre Anwendung für die Simulation von Praxis relevanten Verbrennungsanwendungen, z. B. Verbrennungsmotoren oder Gasturbinen, ist allerdings aufgrund der hohen Anzahl von Spezies und elementaren Reaktionen stark eingeschränkt. Um die Eigenschaften der realen Kraftstoffe genauer abzubilden, werden Reaktionsmechanismen für Multi-Komponenten-Modellkraftstoffe entwickelt, die eine noch höhere Anzahl von Spezies und Reaktionen aufweisen. Aus diesem Grund ist es wichtig, dass die detaillierten chemischen Reaktionsmechanismen der puren Modellkraftstoffe reduziert werden, so dass eine Vorhersagefähigkeit zu akzeptablen CPU-Kosten erreicht werden kann.

Zu diesem Zweck wurden zahlreiche Methoden vorgeschlagen. Eine Übersicht über diese Methoden wird in den Arbeiten von Tomlin et al. [102] und Saylam et al. [103] angeboten. Bei der Reduktion der Mechanismen kommen unterschiedlichen Verfahren zum Einsatz: Lumping (engl. für Klumpenbildung), Entfernen von unnötigen Spezies oder Reaktionen, Reduktion durch quasi-stationäre Annahmen (engl. quasi steady state assumption – QS-SA), Tabellierung usw. Durch geeignete Kombination von diesen Verfahren können sehr kompakte Mechanismen mit 40 oder weniger Schritten entwickelt werden [104]. Der Nachteil dieser Mechanismen ist, dass sie keine Allgemeingültigkeit besitzen und nur für bestimmte Anwendungen geeignet sind.

Vorreiter auf dem Gebiet der detaillierten Rußchemiemodellierung ist Frenklach [14]. Sein Modell stellt die Basis für die meisten Ansätze dieser Art dar - auch für das detaillierte kinetische Rußmodell von Mauß [15], das im Rahmen dieser Arbeit zum Einsatz kam. Die Beschreibung der verschiedenen Prozesse, die in der Gasphase und später auf der Rußoberfläche stattfinden, basiert auf detaillierten chemischen und physikalischen Modellen. Der erste Schritt der Rußbildung – die Entstehung des ersten PAKs – findet noch in der Gasphase statt.

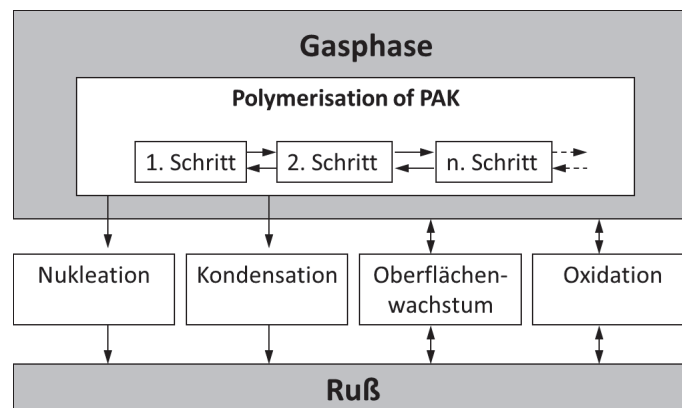


Abbildung 4.8.: Darstellung Rußmodell

Diese Spezies stellt die Schnittstelle zwischen dem Reaktionsmechanismus für die Gasphase und dem weiteren Wachstum der PAKs (s. Abb. 4.8) dar. Das PAK-Molekül wächst in einem sich wiederholenden Zyklus von H-Radikal-Abspaltung und Kohlenstoffanlagerung (HACA, s. Kapitel 4.1) [14]. Nach der Addition von zwei Acetylen-Moleküle (C_2H_2) findet ein planares Wachstum der PAKs statt, das zusammenhängende PAK-Ringe zur Folge hat. Dieser Prozess wiederholt sich, so dass anschließend große PAKs entstehen, die ihrerseits koagulieren und somit die ersten Rußpartikel bilden.

Die Ansätze, die detaillierte Rußchemiemodellierung aufweisen, unterscheiden sich im Wesentlichen durch die Kopplung zwischen Chemie und Turbulenz (s. Abb. 4.5). Eine Bewertung dieser Rußmodelle wird deswegen erst in Kapitel 4.4 erfolgen, in dem verschiedene Modelle für die Chemie-Turbulenz-Kopplung beschrieben werden.

4.3. NO_x-Modellierung

Die NO_x-Chemie ist wesentlich einfacher als die Rußchemie. Bei der Stickoxidbildung unterscheidet man drei verschiedene Prozesse, die in diesem Kapitel näher erläutert werden:

- Bildung aus Luftstickstoff bei hohen Temperaturen
- Bildung bei relativ niederen Temperaturen
- Bildung aus brennstoffgebundenem Stickstoff

4.3.1. Thermisches NO (Zeldovich-NO)

Die thermische NO-Bildung läuft "hinter" der Flammenfront im Verbrannten ab und wurde erstmals im Jahr 1946 von Zeldovich [161] beschrieben. Der von Zeldovich angegebene einfache Reaktionsmechanismus wurde später von Baulch [166] erweitert. Dieser erweiterte Zeldovich-Mechanismus besteht aus den drei Elementarreaktionen [5]:



Die Reaktionskonstanten k_1 , k_2 und k_3 werden nach [22] mit

$$k_1 = 7.6 * 10^{13} \exp\left(\frac{-38370}{T}\right) \left[\frac{m^3}{kmol*s}\right]$$

$$k_2 = T * 6.4 * 10^9 \exp\left(\frac{-3139}{T}\right) \left[\frac{m^3}{kmol*s}\right]$$

$$k_3 = 2.8 * 10^{10} \left[\frac{m^3}{kmol*s}\right]$$

angegeben. Für die NO-Bildungsgeschwindigkeit ergibt sich gemäß den Reaktionen (4.42 – 4.44) das folgende Geschwindigkeitsgesetz [5]:

$$\begin{aligned} \frac{d[NO]}{dt} = & k_{1,r}[O][N_2] + k_{2,r}[N][O_2] + k_{3,r}[N][OH] \\ & - k_{1,l}[NO][N] - k_{2,l}[NO][O] - k_{3,l}[NO][H] \end{aligned} \quad (4.45)$$

Weiterhin gilt für die zeitliche Änderung der Stickstoff-Konzentration

$$\begin{aligned} \frac{d[N]}{dt} = & k_{1,r}[O][N_2] - k_{2,r}[N][O_2] - k_{3,r}[N][OH] \\ & - k_{1,l}[NO][N] + k_{2,l}[NO][O] + k_{3,l}[NO][H] \end{aligned} \quad (4.46)$$

Wenn die momentane NO-Konzentration unterhalb der Gleichgewichtskonzentration der entsprechenden Temperatur liegt, wie dies in weiten Abschnitten der motorischen Verbrennung der Fall ist, hat die Hinreaktion entscheidenden Einfluss auf den Gesamtumsatz.

Wenn dagegen die momentane NO -Konzentration oberhalb der Gleichgewichtskonzentration der entsprechenden Temperatur liegt, wird der Gesamtumsatz durch die Rückreaktion bestimmt. Im Motor tritt diese Situation jedoch allenfalls gegen Ende des Expansionstaktes auf, wenn die Temperatur bereits weit abgesunken ist [5].

Den Namen "thermisch" verdankt dieser Mechanismus der NO -Bildung der Tatsache, dass die erste Reaktion (4.42) wegen der starken N_2 -Dreifachbindung eine hohe Aktivierungsenergie besitzt und daher erst bei sehr hohen Temperaturen ausreichend schnell abläuft. Aufgrund ihrer relativ kleinen Geschwindigkeit ist Reaktion (4.42) der geschwindigkeitsbestimmende Schritt bei der thermischen NO -Bildung. Abbildung 4.8 zeigt den Verlauf des Geschwindigkeitskoeffizienten $k_{1,r}$ in Abhängigkeit der Temperatur T .

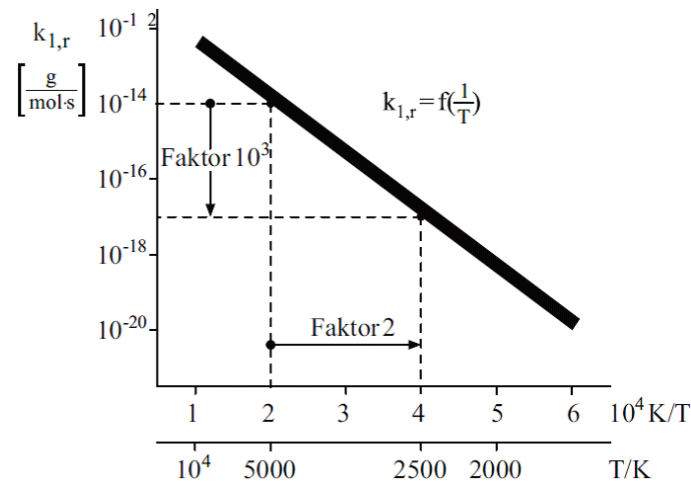


Abbildung 4.9.: Geschwindigkeitskoeffizient der ersten Zeldovich-Reaktion [5],
Darstellung mit freundlicher Genehmigung durch Springer Science and Business Media. Merker, G. P., Stiesch, G., Otto, F.: Grundlagen Verbrennungsmotoren, 4. Schadstoffbildung, p. 212, Abb. 6-22, Vieweg+Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden, 2009

Auf Abb. 4.8 ist zu erkennen, dass eine Verdopplung der Temperatur die thermische NO -Bildung um Faktor 10^3 steigert, bzw. bei Anhebung der Temperatur von $2000K$ auf $2500K$ das thermisch gebildete NO auf das etwa 50-fache ansteigt. Wegen dieser starken Temperaturabhängigkeit spricht man von einer kinetisch kontrollierten NO -Bildung. Das bedeutet, dass die chemische Reaktionskinetik bei den im Brennraum vorliegenden Temperaturen langsam im Vergleich zu den physikalischen Zeitskalen des Strömungsfeldes ist und dass der chemische Gleichgewichtszustand daher nicht erreicht werden kann. Die NO -Bildung bei der motorischen Verbrennung muss deswegen mit Hilfe der Reaktionskinetik berechnet werden [5].

Weil die Reaktionsgeschwindigkeit der Hinreaktionen (4.43) und (4.44) um Zehnerpotenzen größer als die der Reaktion (4.42) ist, wird der im ersten Reaktionsschritt gebildete atomare Stickstoff im zweiten und dritten Schritt sofort weiter zu NO umgesetzt. Die Konzentration des atomaren Stickstoffs bleibt deshalb nach einer kurzen Anlaufzeit praktisch konstant. Deshalb kann die Konzentration der Stickstoffatome als quasi-stationär

angenommen werden, d. h.

$$\frac{d[N]}{dt} \approx 0 \quad (4.47)$$

Somit kann das vereinfachte Geschwindigkeitsgesetz für die NO -Bildung aufgestellt werden:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{1,r}[O][N_2] - 2k_{1,l}[NO][N] \quad (4.48)$$

Da die Rückreaktionen bei den im Brennraum herrschenden Temperaturen zunächst vernachlässigt werden können, gilt für die NO -Bildungsrate oft das weiter vereinfachte Geschwindigkeitsgesetz

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2k_{1,r}[O][N_2] \quad (4.49)$$

Demnach ist eine Minimierung des NO nur durch eine Minimierung von k_1 (d. h. Verringerung der Temperatur), von der Sauerstoff- oder Stickstoffkonzentration möglich. Diese Gleichung kann jedoch nur als grobe Abschätzung angesehen werden, da sie eine zu hohe NO -Konzentration voraussagt. Grund dafür ist, dass die – wenn auch geringen – Rückreaktionen der Gleichungen (4.42) bis (4.44) die tatsächliche NO -Bildung verlangsamen und gegen Ende des Arbeitstaktes sogar zu einem geringfügigen Abfall der NO -Konzentration führen können.

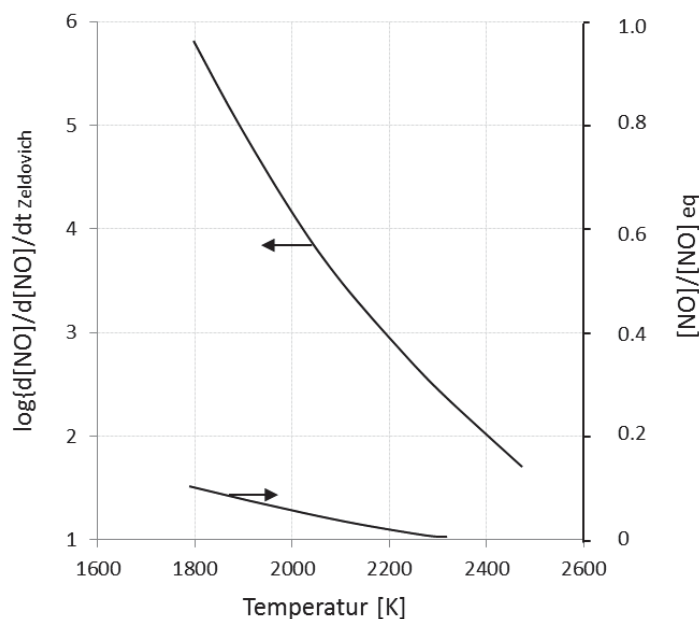
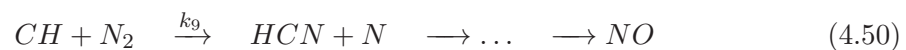


Abbildung 4.10.: Einfluss von Superequilibrium-Radikalkonzentrationen auf NO -Bildungsraten [155]

In [155] vergleichen Miller und Bowman den Zeldovich-Mechanismus mit einem detaillierten kinetischen Mechanismus. Insbesondere weisen sie darauf hin, dass in den Reaktionen (4.42) bis (4.44) O - und OH -Radikale involviert sind. Diese spielen auch bei der Verbrennung des Kraftstoffs eine wichtige Rolle, weswegen die NO -Gesamtbildungsrate mit der Oxidation des Brennstoffs gekoppelt werden muss. Bei dem Zeldovich-Mechanismus wird diese Rückkopplung nicht berücksichtigt, da hierbei davon ausgegangen wird, dass NO -Bildung viel langsamer als die Oxidation des Kraftstoffs abläuft. Im Falle des Zeldovich-Mechanismus hängen deswegen die NO -Bildungsraten von den Gleichgewichtstemperaturen und den Gleichgewichtskonzentrationen von O_2 , N_2 , O und OH . Die Fehler, die damit zustande kommen sind in Abb. 4.9 dargestellt. Bei dem dort angestellten Vergleich wird eine isotherme Reaktion angenommen, um eine unabhängige Temperaturvariation zu ermöglichen. Des Weiteren wurden die Prompt- NO -Reaktionen (s. später Kapitel 4.3.2) vom Mechanismus entfernt, so dass die Unterschiede in der NO -Bildung allein auf die Nicht-Gleichgewicht-Radikalkonzentrationen zurückgeführt werden können [155]. Insbesondere bei niedrigeren Temperaturen, die im Falle von Hoch-AGR-Verbrennung auftreten können, liegen deutliche Unterschiede zwischen den berechneten NO -Bildungsraten vor.

4.3.2. Promptes NO (Fenimore-NO)

Das Stickoxid, das als Zwischenprodukt während der Verbrennung direkt in der Flammenfront gebildet wird, wird als promptes NO bezeichnet. Die Prompt- NO -Bildung wurde erstmals von Fenimore (1979) beschrieben. Dessen Behandlung ist wesentlich komplizierter als die des thermischen NO , da seine Entstehung mit dem Radikal CH verbunden ist, das in vielfältiger Weise reagieren kann. Acetylen, C_2H_2 , als Vorläufer des CH -Radikals wird nur unter brennstoffreichen Bedingungen in der Flammenfront gebildet, deshalb auch der Begriff "Prompt- NO ". Im geschwindigkeitsbestimmenden Schritt reagiert intermediär gebildetes CH mit N_2 zu HCN (Blausäure) und anschließend schnell zu NO weiter.



mit $k_9 = 4.4 * 10^9 * \exp\left(\frac{-11060}{T}\right) \left[\frac{m^3}{kmol*s}\right]$.

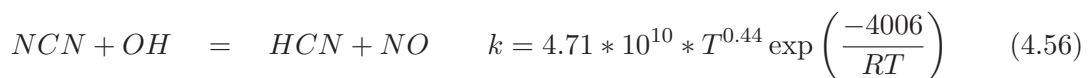
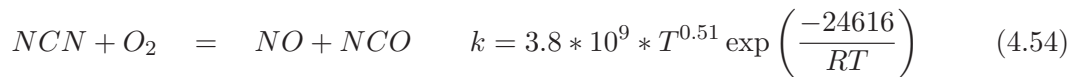
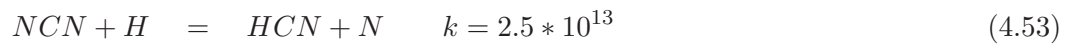
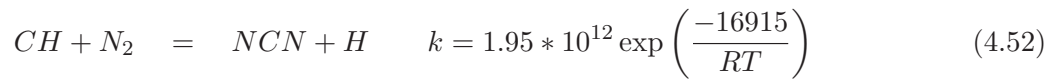
Die in der Literatur verfügbaren Informationen bezüglich der Reaktionskonstante k_9 sind nicht einheitlich [22]. Dementsprechend lässt sich die Bildung des Fenimore- NO nicht befriedigend durch Simulationen reproduzieren. Mit Sicherheit kann man jedoch behaupten, dass die Aktivierungsenergie für die Reaktion



nur $92kJ/mol$ beträgt und im Vergleich zu der Aktivierungsenergie für die Bildung des thermischen NO von $318kJ/mol$ wesentlich niedriger ausfällt. Demzufolge tritt das prompte NO auch schon bei viel tieferen Temperaturen (um $1000K$) auf.

In neueren Arbeiten wird darüber berichtet, dass Promptes NO in einem Reaktionspfad

über NCN entstehen kann. Mauß et al. geben den Reaktionspfad und die dazu gehörigen Reaktionskonstanten wie folgt an [156]:



Die motorische Relevanz des prompten NO ist unabhängig vom Reaktionspfad sehr gering. Seidel [159] quantifizierte diese Relevanz in seiner Arbeit. Dazu führte er Rechnungen in einem homogenen Reaktor bei unterschiedlichen Anfangstemperaturen und AGR-Raten durch. Ein Ergebnis seiner Arbeit ist in Abb. 4.10 dargestellt.

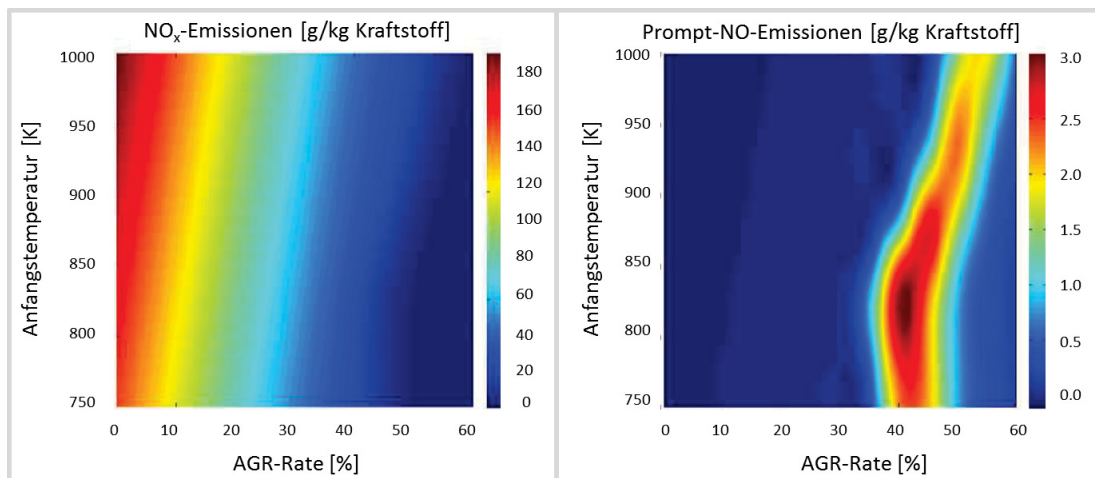


Abbildung 4.11.: Motorische Relevanz des prompten NO [159],
 Nachdruck genehmigt von Dipl. Ing. Seidel

Das Diagramm auf der linken Seite zeigt die gesamten NO -Emissionen, während auf der rechten Seite nur die Prompt- NO Emissionen dargestellt sind. Es ist zu erkennen, dass die Prompt- NO -Emissionen ein Maximum $3g/kg$ Kraftstoff erreichen, welches einem Anteil von ca. 5% der gesamten NO -Emissionen entspricht. Darüber hinaus liegen höhere Prompt- NO -Emissionen nur in Bereichen vor, in denen die NO -Emissionen insgesamt niedrig sind.

4.3.3. Über N_2O erzeugtes NO

Dieser NO -Bildungspfad gewinnt dann an Bedeutung, wenn magere Brennstoff-Luft-Gemische die Bildung von CH zurückdrängen und damit wenig Prompt- NO gebildet wird oder wenn niedrige Temperaturen die Bildung von thermischem NO unterdrücken [5]. Dabei wird N_2O analog zur ersten und geschwindigkeitsbestimmenden Reaktion des Zeldovich-Mechanismus gebildet.



Die Stabilisierung erfolgt aber durch ein Molekül M , so dass N_2O und nicht NO entsteht. Die NO -Bildung erfolgt dann durch Oxidation von N_2O .



Da N_2O in einer trimolekularen Reaktion gebildet wird, läuft dieser Reaktionsweg bevorzugt bei hohen Drücken ab. Die Reaktion wird von niedrigeren Temperaturen kaum verlangsamt. Dieser Mechanismus ist überwiegend bei Ottomotoren und Gasturbinen von Bedeutung, die mit magerer vorgemischter Verbrennung betrieben werden.

4.3.4. NO -Bildung aus dem im Kraftstoff gebundenen Stickstoff

Der im Kraftstoff gebundene Stickstoff bildet während der Verbrennung einfache Amine und Zyanide. Diese reagieren in Folge mit Sauerstoff weiter zu NO . Da der Stickstoffgehalt in üblichen Dieselmotoren praktisch 0 ist, kommt diesem Mechanismus nur eine untergeordnete Rolle bei der NO -Bildung zu.

4.3.5. NO_2 im Abgas

Die wichtigsten Reaktionen für die NO/NO_2 -Verteilung in Flammen sind [23]:



Dabei wird NO_2 überwiegend bei niedrigen Flammentemperaturen über Reaktion (4.59) gebildet, wobei hohe HO_2 -Konzentrationen vorliegen [5]. Üblicherweise ist das Verhältnis von NO_2 zu NO im Abgas von Verbrennungsmotoren relativ gering. Unter mageren Bedingungen, sehr hohen Abgasrückführraten oder sehr späten Einspritzzeitpunkten, wie sie z. B. teilweise in mager betriebenen Gasmotoren, HCCI- oder Diesel-Brennverfahren eingesetzt werden, wurden in den letzten Jahren jedoch deutlich höhere Anteile von NO_2 im Abgas festgestellt [24], [25], [26]. Eine Erklärung für diesen Anstieg ist, dass bei diesen Brennverfahren bei niedrigen Temperaturen verstärkt NO_2 über Reaktion (4.59) gebildet

wird, dieses NO_2 aufgrund schlechter Durchmischung und insgesamt langsamer Verbrennung aber nicht mehr zu NO zurückreagieren kann [160]. Des Weiteren kann NO_2 bei der DPF-Regeneration in Anwesenheit von hohen HO_2 -Konzentrationen entstehen.

In diesem Kapitel wurde mehrfach darauf hingewiesen, dass der wichtigste NO -Bildungsmechanismus der Zeldovich-Mechanismus ist. Dementsprechend konzentriert sich die Simulationsarbeit auf der Abbildung dieses Reaktionspfades. Die Transportgleichung für die NO_x -Konzentration lautet somit üblicherweise:

$$\rho \left(\frac{\partial}{\partial t} + \nu_i \frac{\partial}{\partial x_i} \right) c_{NO_x} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_t \rho \frac{\partial}{\partial x_i} c_{NO_x} \right) = Q_{\text{Zeldovich}}(c_{NO_x}, c_O, c_{OH}, c_H, \lambda, p, T) \quad (4.62)$$

wobei der Quellterm direkt nach dem Zeldovich-Mechanismus aus den Radikalkonzentrationen O , OH und H berechnet wird. Dabei wird angenommen, dass sich die Konzentration des N -Radikals im partiellen Gleichgewicht befindet [5]. Häufig wird davon ausgegangen, dass turbulente Temperaturfluktuationen für die NO_x -Bildung weniger relevant sind. Aus diesem Grund wird die NO_x -Bildung meistens laminar, d. h. rein reaktionskinetisch auf Basis der Ensemble-Mittelwerte berechnet [5]. Die Fehler, die dabei gemacht werden, sind allerdings nicht vernachlässigbar. Insbesondere führt die Annahme konstanter Zellentemperatur zu erheblichen Ungenauigkeiten. Wenzel [134] führte deswegen in seinem PDF- NO_x -Modell eine Temperaturverteilung im Mischungsbruchraum ein.

4.4. Chemie-Turbulenz-Kopplung

Bekanntermaßen sind Ruß- und NO_x -Bildung Prozesse, die insbesondere von den lokalen Spezieskonzentrationen und der lokalen Temperatur abhängen. Deshalb soll diese Kopplung eine Auflösung der lokalen Mischungs- bzw. Verbrennungsprozesse ermöglichen, die fein genug ist, um die lokalen Rußreaktionen genau modellieren zu können. Selbstverständlich ist die DNS (Direct Numeric Simulation) die perfekte Lösung dieses Problems. Aufgrund von den enormen CPU-Zeit-Anforderungen ist sie allerdings für den industriellen Einsatz nicht geeignet. In diesem Kapitel werden in der Literatur etablierte Ansätze beschrieben, die wie das in dieser Arbeit eingesetzte Modell (s. Kapitel 5) neben einer detaillierten Rußchemiemodellierung eine Chemie-Turbulenz-Interaktion aufweisen, die einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenzeitanforderungen anbietet.

4.4.1. Die Flamelet Transformation

In diesem Unterkapitel wird das laminare Flamelet-Konzept zur Beschreibung turbulenter Diffusionsflammen beschrieben. Anschließend werden die Flamelet-Modell-Gleichungen transient abgebildet – ein Sonderfall dieses Flamelet-Konzepts, der in dieser Arbeit zum Einsatz kam.

Das Flamelet-Konzept wurde erstmals von Williams [135] vorgestellt. Seine Anwendbarkeit setzt die sogenannten Flamelet-Annahmen voraus:

1. Die chemischen Zeitskalen sind viel kleiner als die kleinste turbulente Längenskala (Kolmogorov-Längenskala).
2. Die über die Flammendicke bestimmenden chemischen Zeitskalen sind viel kleiner als die turbulenten Längenskalen.

Wenn beide Annahmen erfüllt sind, kann eine turbulente, nicht-vorgemischte Flamme als ein Ensemble laminarer, dünner, eindimensionaler Diffusionsflammen (Flamelets) angesehen werden (Flamelet-Konzept). Damit können komplizierte, mehrdimensionale Verbrennungsprobleme auf eindimensionale Strukturen zurückgeführt werden. Die chemischen Reaktionen werden von den turbulenten Vorgängen im Strömungsfeld abgetrennt. Der Einfluss des turbulenten Strömungsfeldes beschränkt sich lediglich auf die Faltung und Dehnung der Flamelets, wobei die laminare, chemische Struktur nicht zerstört wird. Die Kopplungsfunktion zwischen den chemischen und den turbulenten Vorgängen ist der im Kapitel 3.2 definierte Mischungsbruch Z . Durch die skalare Dissipationsrate χ (s. Kapitel 3.2) werden wiederum die Faltung und die Dehnung des Flamelets modelliert. Die Spezieskonzentrationen hängen somit allein vom Mischungsbruch und der skalaren Dissipationsrate ab, solange die beiden Flamelet-Annahmen erfüllt sind.

Die Transportprozesse im Mischungsbruchraum ($Z \in [0, 1]$) werden durch die sogenannten laminaren Flamelet-Gleichungen beschrieben. Erstens wird der Mischungsbruch Z als konservativer Skalar eingeführt. Dessen Transport wird durch

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho u_j \frac{\partial Z}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\rho D_Z \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (4.63)$$

angegeben (s. Gl. (3.27)). Die Randwerte $Z = 0$ und $Z = 1$ beschreiben reinen Oxidator- bzw. Kraftstoffstrom. Der Z -Gradient ist somit senkrecht zur Flammenfront. Wird ein lokales Koordinatensystem mit $x_1 = Z$ und x_2, x_3 auf der Flammenfrontebene definiert (s. Abb. 4.12), können die Flamelet-Erhaltungsgleichungen nach folgenden Regeln transformiert werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z} \\ \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial}{\partial Z} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial Z_k} + \frac{\partial Z}{\partial x_k} \frac{\partial}{\partial Z} \end{aligned} \quad (4.64)$$

Nach Potenzanalyse ergeben sich die vereinfachten Flamelet-Gleichungen zu [131]:

Spezieserhaltung:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) = \frac{\rho \chi}{2} \frac{dF_i}{dZ} + \frac{G_i}{4} + \dot{\omega}_i \quad (4.65)$$

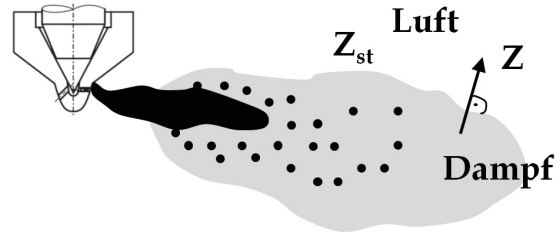


Abbildung 4.12.: Schematische Schnittdarstellung eines Diesel-Einspritzstrahls. Bei der Herleitung der Flamelet-Gleichungen wird senkrecht zur Fläche stöchiometrischer Mischung der Mischungsbruch Z als unabhängige Koordinate verwendet [10]

mit

$$F_i = \frac{Y_i}{Le_i X_i} \frac{dX_i}{dZ} - Y_i \sum_{k=1}^N \left(\frac{Y_k}{Le_k X_k} \frac{dX_k}{dZ} \right) \quad (4.66)$$

$$G_i = \left(F_i - \frac{dY_i}{dZ} \right) \left(\frac{d}{dZ}(\rho\chi) + \frac{\chi}{D} \frac{d}{dZ}(\rho D) \right) \quad (4.67)$$

Energieerhaltung:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho c_p T) = \frac{\rho\chi}{2} \left(\frac{d}{dZ} \left(c_p \frac{dT}{dZ} \right) + H \right) - \sum_{i=1}^N h_i \omega_i - q_R \quad (4.68)$$

mit

$$H = \sum_{i=1}^N (c_{p,i} F_i) \frac{dT}{dZ} \quad (4.69)$$

$$q_R = \sum_{i=1}^N \alpha_i \sigma (T^4 - T_0^4) \quad (4.70)$$

Hierbei steht N für die Anzahl der Spezies. Die Lewis-Zahl wird durch

$$Le_i = \frac{\lambda}{\rho D_i c_p} \quad (4.71)$$

angegeben. Diese Transformation der Flamelet-Erhaltungsgleichungen 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 [139]. Da alle Skalare mit der gleichen konvektiven Geschwindigkeit transportiert werden treten in Gl. (4.65) und (4.68) keine konvektiven Terme auf. Der Haupteinfluss des turbulenten Mischungsfeldes erfolgt durch die skalare Dissipationsrate (s. Gl. (3.30)).

Die vorgestellten Flamelet-Gleichungen basieren auf der Annahme konstanter Diffusivität für alle Spezies. Diese Annahme ist für motorische Verbrennungsprobleme erfüllt, da die differentielle Diffusion für Kohlenwasserstoff-Brennstoffe gegenüber Turbulenzeffekten vernachlässigt werden kann [46]. 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 $D = \lambda/(\rho_{cp})$ vorliegt.

In dieser Arbeit kommt das sogenannte Steady-State-Flamelet-Modell zum Einsatz. Bei diesen stationären Flamelets reduzieren sich die unabhängigen Variablen der Flamelet-Gleichungen auf den Mischungsbruch.

$$Y_i = Y_i(Z, \chi) \quad (4.72)$$

Die Spezies-Erhaltungsgleichungen vereinfachen sich somit zu:

$$-\rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} = \omega_i \quad (4.73)$$

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. Die charakteristische Flamelet-Diffusionszeit wird angegeben mit:

$$t_\chi = \frac{(\Delta Z)^2}{\tilde{\chi}_{st}} \quad (4.74)$$

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 (4.74) 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 berücksichtigt werden müssen. Während sich die Hauptreaktionen nahe dem chemischen Gleichgewichtszustand bewegen, werden instationäre Effekte vor allem für langsame kinetische Prozesse wichtig, wie beispielsweise für die Ruß- und NO_x -Bildung [46].

Bei dem Steady-State-Flamelet, das ein Bibliothekskonzept darstellt, 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, um beispielsweise mittlere

Schadstoffkonzentrationen zu berechnen. Liegen tabellierte Reaktionsraten vor, ist es zudem möglich, gemittelte Reaktionsraten zu bestimmen, die zur Schließung von Transportgleichungen dienen. Der große Vorteil des Bibliothekskonzepts liegt in der Möglichkeit, bei akzeptablem Rechenaufwand, die Flamelet-Parameter lokal zu berücksichtigen. 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. Da die Flamelet-Bibliotheken hierbei auf stationären Flamelet-Rechnungen basieren, erlaubt dieses Konzept zudem keine Beschreibung von Instationaritätseffekten.

4.4.2. RIF-Modell

Die Flamelet-Modellentwicklung wurde maßgeblich von Peters geprägt [46]. Die Grundidee aller Flamelet-Ansätze ist, die Lösung des turbulenten Mischungsfelds von der Lösung der detaillierten Chemie zu trennen. Auf dieser Art und Weise können detaillierte chemische Reaktionsmechanismen angewandt werden, die für die korrekte Modellierung der verschiedensten Prozesse in einem Dieselmotor (Selbstzündung, Vormisch- und Diffusionsverbrennung, Emissionsbildung etc.) notwendig sind. Die hochgradig nicht-lineare Reaktionsraten müssen somit nicht vereinfacht werden, weswegen die komplette Struktur des Verbrennungsprozesses erhalten bleibt. Das Gesamtmodell funktioniert wie folgt: für die detaillierte Chemie im Flamelet werden im 3D-CFD-Code eindimensionale instationäre partielle Differenzialgleichungen online gelöst. Die Lösung des Strömungsfelds liefert einige zeitabhängige Parameter (Enthalpie, Druck, skalare Dissipationsrate) als Input für die Flamelet-Rechnung. In umgekehrter Richtung liefert die Flamelet-Lösung Spezieskonzentrationen, die vom 3D-CFD-Code zur Berechnung von Temperatur und Dichte verwendet werden [148].

Aufgrund der häufig berechtigten Annahme, dass chemische Zeitskalen viel kleiner als die turbulenten Zeitskalen sind, kann die Folgerung gemacht werden, dass die kleinsten turbulenten Wirbel die Flammenfront lediglich strecken und verzerren. Die laminare Flammenstruktur wird dadurch zwar lokal gestört, bleibt aber grundsätzlich erhalten. Unter dieser Prämisse kann angestrebt werden, die sogenannten Flamelet-Gleichungen (s. Kapitel 5.1) eindimensional darzustellen.

Die Flamelet-Gleichungen werden von einem separaten Code gelöst und dann interaktiv mit dem CFD-Code gekoppelt (daher "Representative Interactive Flamelet" (RIF)). In jedem Zeitschritt der CFD-Rechnung löst der CFD-Code seine Gleichung und ruft den Flamelet-Code auf. Dieser seinerseits löst die instationären Flamelet-Gleichungen und zwar bei Bedarf mit kleineren Zeitschrittweiten (z. B. während der Zündung) als diese des CFD-Codes. Auf dieser Art und Weise werden die Zeitskalen von Strömungsfeld und Chemie voneinander entkoppelt [148].

Die Interaktion zwischen CFD-Code und Flamelet-Code ist in Abb. 4.13 schematisch dargestellt. Die Kopplung zwischen CFD- und Flamelet-Code erfolgt, indem die Flamelet-Parameter aus dem CFD-Code an den Flamelet-Code übergeben werden, um im nächsten

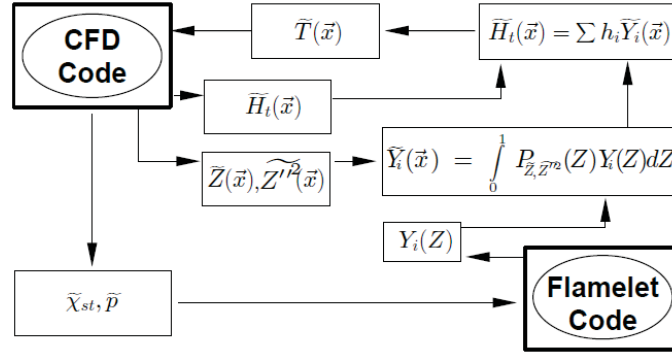


Abbildung 4.13.: Ablaufskizze des RIF-Modells (Representative Interactive Flamelet) [148]

Schritt über den Representative-Flamelet-Domain statistisch gemittelt zu werden. In umgekehrter Richtung, also zwischen Flamelet- und CFD-Code, werden die lokale Enthalpie und die Spezieskonzentrationen an den CFD-Code übergeben, womit die lokale Temperatur berechnet werden kann. Für die lokale Enthalpie gilt:

$$\tilde{H} = \sum_i^N \tilde{Y}_i h_i(\tilde{T}) \quad (4.75)$$

Die gemittelten Spezieskonzentrationen Y_i in Gl. (4.75) werden berechnet, indem die aktuelle Flamelet-Lösung mit einer PDF (engl. probability density function) integriert wird [148]:

$$\tilde{Y}_i(\vec{x}) = \int_0^1 P_{\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2}(Z) Y_i(Z) dZ \quad (4.76)$$

Die β -PDF ist zwar eine Funktion nur von Z , aber deren Form hängt von zwei Parametern ab: der gemittelte Mischungsbruch und dessen Varianz. Damit sind die gemittelten Speziesmassenbrüche auch eine Funktion von Z und Z''^2 . Folglich sind die ermittelten Speziesmassenbrüche unterschiedlich in den unterschiedlichen CFD-Zellen, obwohl immer die gleiche Flamelet-Lösung zugrunde liegt.

Das RIF-Modell besitzt eine sehr hohe CPU-Effizienz, da das Strömungsfeld und die detaillierte Chemie mit unterschiedlichen Zeitskalen gelöst werden können. Auch wenn die Mischungsvorgänge keine sehr feine zeitliche Auflösung erfordern (z. B. im Laufe der Diffusionsverbrennung) kann für die detaillierte Chemie eine Verkleinerung der Zeitschrittweiten vorgenommen werden, welches sich wiederum positiv auf die Genauigkeit der Lösung auswirkt. Dies hat einen relativ kleinen Rechenzeitnachteil, da im Rahmen eines Zeitschritts das instationäre Flamelet nur einmal gelöst werden muss. Über die Abhängigkeit der lokalen Spezieskonzentrationen und Reaktionsraten von Z und Z''^2 kann weiterhin die lokale Kraftstoffverteilung innerhalb der Rechenzelle berücksichtigt werden. Dies ist ein großer Vorteil den Mittelwertmodellen gegenüber.

Das RIF-Modell hat allerdings einen entscheidenden Nachteil. Die Flamelet-Gleichungen

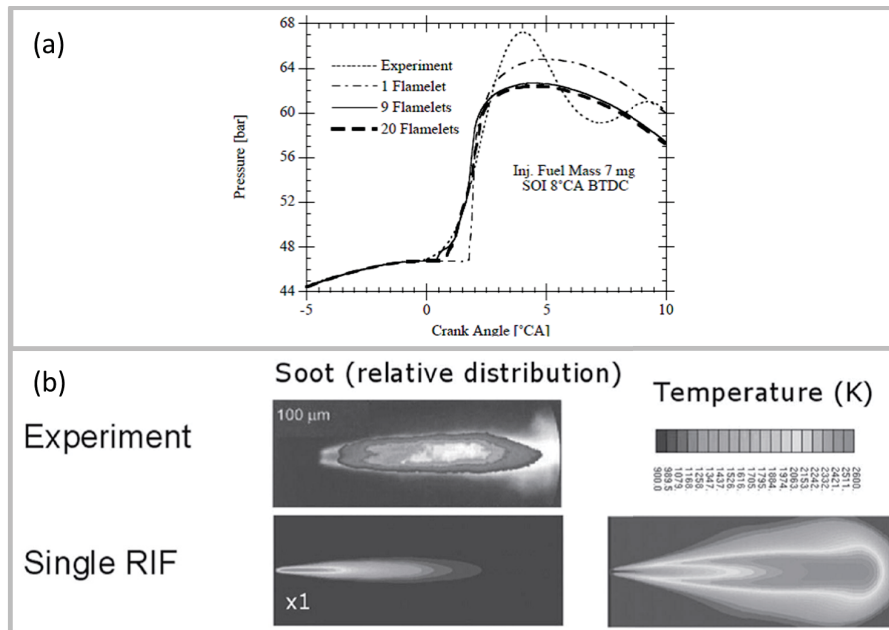


Abbildung 4.14.: (a) Einfluss Anzahl Flamelets auf den Druckverlauf [148]
 (b) Rußwolke und Temperaturfeld mit einem Flamelet [124]
 (a) Nachdruck genehmigt von Nachdruck genehmigt von IFPEN. Barths, H. and Pitsch, H. and Peters, N.: 3D Simulation of DI Diesel Combustion and Pollutant Formation Using a Two-Component Reference Fuel, *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP* 54, 233-244, 1999.

sind ein Satz von gekoppelten Partialdifferentialgleichungen. Somit hängt die Flamelet-Lösung wesentlich von den Anfangs- und Randbedingungen sowie von der zeitabhängigen skalaren Dissipationsrate ab. Mit Ausnahme von Dieselmotoren mit erheblichen internen AGR-Raten kann man davon ausgehen, dass die Anfangsbedingungen konstant im Brennraum sind. Da die Kraftstoff- und Oxidatorzusammensetzung sich zeitlich nicht verändern, bleiben auch die Randbedingungen konstant. Die skalare Dissipationsrate wiederum variiert innerhalb des Brennraums (s. Gl. (3.30)). Deswegen ist die Historie der skalaren Dissipationsrate von Partikeln mit unterschiedlichen räumlichen Anfangspositionen im Brennraum unterschiedlich. Folglich besitzt eine einzige Flamelet-Lösung bei einer einzigen skalaren Dissipationsrate keine Allgemeingültigkeit für alle Rechenzellen. Das Simulationsergebnis weicht somit deutlich von der Realität wie in Abb. 4.14 zu sehen ist.

Kriterium	Bewertung
CPU-Effizienz	o
Allgemeingültigkeit	++
Detaillierte Rußchemiemodellierung	++
Abbildung lokaler Rußphänomene	+
Chemie-Turbulenz-Interaktion	o

Tabelle 4.4.: Bewertung des RIF-Modells

Die Verwendung eines einzigen Flamelets führt zu deutlichen Ungenauigkeiten bei Zündver-

zug sowie bei der Lage der Rußwolke. Dies liegt daran, dass die skalaren Dissipationsraten im Düsennahen Bereich von einem einzigen Flamelet nicht genau genug abgebildet werden können [146]. Dies ist auch in der Bewertungstabelle Tab. 4.4 festgehalten. Abhilfe kann die Einführung von weiteren Flamelets schaffen wie auf Abb. 4.14a dargestellt.

4.4.3. Multiple-RIF-Modell

Die zentrale Annahme bei dem Modell mit mehr als einem Flamelet (engl. multiple RIF-Model oder mRIF) ist die gleiche wie bei dem RIF-Modell: an Stellen in der Flamme, die den gleichen Mischungsbruch und die gleiche skalare Dissipationsrate aufweisen, sind Spezieskonzentrationen, Enthalpie und Rußmasse auch gleich. Die Richtigkeit dieser Annahme wurde für Spezieskonzentrationen nachgewiesen [46], für die Rußmasse ist dies allerdings fraglich [124]. Der Vorteil des mRIF-Modells ist die räumliche Auflösung der skalaren Dissipationsrate, die durch die Einführung von weiteren Flamelets realisiert wird. Das bedeutet gleichzeitig, dass die Historie der skalaren Dissipationsrate von unterschiedlichen Massenpartikeln im Strömungsfeld bekannt werden muss. Partikel im Strömungsfeld müssen dementsprechend einem Flamelet zugeordnet werden.

Zum Tracking des gemittelten Massenbruchs von Partikeln, die einem Flamelet l zugeordnet sind, wird Gl. (4.77) gelöst, die für ein laminares Strömungsfeld (unter Vernachlässigung von Diffusion) folgende Form hat:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_l) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho Y_l u_j) = 0 \quad (4.77)$$

Für turbulente Strömungen wird die Gleichung wegen der turbulenten Diffusion umgeformt zu:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \tilde{Y}_l) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho} \tilde{Y}_l \tilde{u}_j) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \frac{\mu}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_l}{\partial x_j} \right) = 0 \quad (4.78)$$

wobei der Strich Ensemble-Mittelung und die Tilde Favre-Ensemble-Mittelung bezeichnen (s. Kapitel 3).

Aufgrund der turbulenten Mischung können Partikel am gleichen Ort im Brennraum vorkommen. Folglich ist der erwartete Wert für das Vorkommen eines Partikels kleiner als 1, aber es gilt immer:

$$\sum_{l=1}^{n_l} \tilde{Y}_l = 1 \quad (4.79)$$

mit n_l die Gesamtanzahl der Partikel.

Die Abhängigkeit der skalaren Dissipationsrate vom Mischungsbruch Z wird durch Gl. (3.30) angegeben. Nach [150] kann eine Oberflächenmittelung der skalaren Dissipationsrate

bei Stöchiometrie für jedes Flamelet durchgeführt werden. Zusätzlich wird oft mit dem Erwartungswert des Vorkommens eines Partikels l gerechnet:

$$\hat{\chi}_{st}(l) = \frac{\int_V \tilde{Y}_l(\vec{x}) \bar{\rho}(\vec{x}) \chi_{st}^{\frac{3}{2}}(\vec{x}) pdf(Z_{st}) dV'}{\int_V \tilde{Y}_l(\vec{x}) \bar{\rho}(\vec{x}) \chi_{st}^{\frac{1}{2}}(\vec{x}) pdf(Z_{st}) dV'} \quad (4.80)$$

Der Einfluß der unterschiedlichen Historie der skalaren Dissipationsrate wird in Abb. 4.15 illustriert. Dort werden die Temperaturen von drei unterschiedlichen Flamelets bei 0°KW n. OT und bei 1°KW n. OT dargestellt.

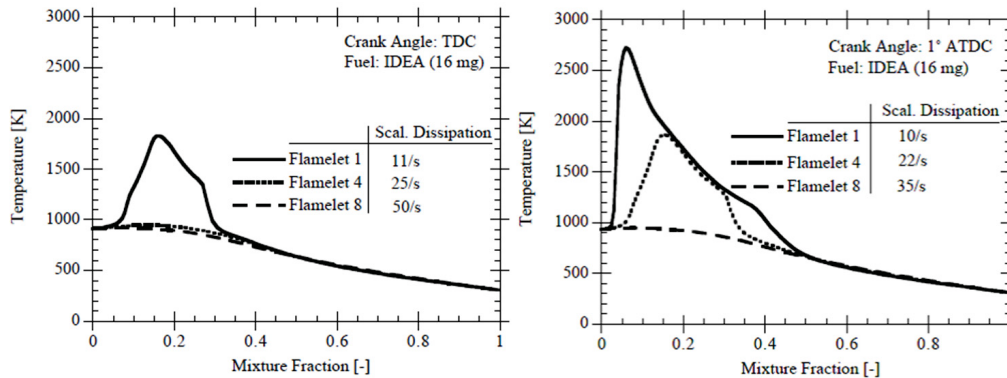


Abbildung 4.15.: (a) (b) Temperatur in unterschiedlichen Flamelets bei 0°KW bzw. 1°KW nach OT [148],

Nachdruck genehmigt von Nachdruck genehmigt von IFPEN. Barths, H. and Pitsch, H. and Peters, N.: 3D Simulation of DI Diesel Combustion and Pollutant Formation Using a Two-Component Reference Fuel, Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP 54, 233-244, 1999.

Der laminare diffusive Transport in den Flamelets ist proportional zu χ_{st} . Bei kleinen χ_{st} -Werten sind Wärmeverlust und Radikaltransport von der Reaktionszone niedrig. Daraus resultiert ein früherer Temperaturanstieg. Im OT ist χ_{st} niedrig bzw. umgekehrt die Diffusionszeit lang, so dass Flamelet 1 zünden kann. Auch in Flamelet 4 hat χ_{st} einen Wert erreicht, bei dem es zünden kann, während in Flamelet 8 noch kein Temperaturanstieg zu sehen ist. 1°KW später hat Flamelet 1 völlig gezündet, Flamelet 4 ist ungefähr so weit wie Flamelet 1 bei 0°KW und Flamelet 8 ist immer noch ungezündet. Erst dieser Prozess der sequenziellen Zündung von mehreren Flamelets ermöglicht einen weicheren Druckanstieg. Die Flamelet-Anzahl hat auch einen mittelbaren Einfluss auf das gemittelte Turbulenzniveau (s. Abb. 4.16).

Der erste Anstieg der Turbulenzintensität wird durch die Einspritzung hervorgerufen. Die turbulenten Längenskalen bleiben gleich, da sie nur von der Lösung des Strömungsfeldes abhängen. Die turbulente Viskosität, die durch:

$$\nu = Lk^{0.5} \quad (4.81)$$

angegeben wird, ist aus diesem Grund höher mit einem als mit 20 Flamelets. Dies führt zu

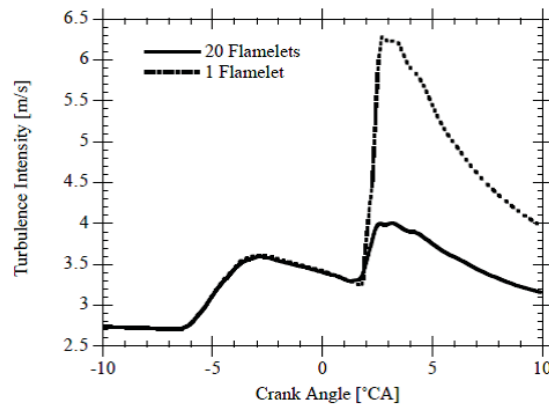


Abbildung 4.16.: Einfluss der Flamelet-Anzahl auf die Turbulenzintensität [148],
Nachdruck genehmigt von Nachdruck genehmigt von IFPEN. Barths, H. and Pitsch, H. and Peters, N.: 3D Simulation of DI Diesel Combustion and Pollutant Formation Using a Two-Component Reference Fuel, Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP 54, 233-244, 1999.

einer erhöhten Wärmefreisetzungsrate bzw. zu höherem Druck und Brennraumtemperatur.

Mit dem mRIF-Modell konnten beachtliche Rußsimulationsergebnisse erreicht werden [121], [123], [124], [127], [132]. Insbesondere in [124] wird eine sehr ausführliche Diskussion über den Einfluss von Flamelet-Anzahl auf die Simulationsgüte angeboten. Dabei wurden experimentelle Daten von Sandia National Laboratories herangezogen [130, 131, 151]. Bei dem Vergleich von lokalen Rußmassenkonzentrationen wird ersichtlich, dass die Simulationsergebnisse von der gewählten Anzahl von RIFs abhängig sind (s. Abb. 4.17). Unter Verwendung von einem oder 8 Flamelets sind die Temperaturen in unmittelbarer Düsenähe wesentlich höher als bei 16 oder 40 RIFs. Weiterhin wird das Temperaturmaximum bei höheren Anzahlen von Flamelets weiter stromabwärts berechnet. Dieser Effekt kann mit der Historie der einzelnen Flamelets erklärt werden so wie bereits in Abb. 4.15 dargestellt. Wenn genügend Flamelets vorhanden sind, bleiben "jüngere" Flamelets in der Nähe der Düse ungezündet, weswegen die Flammenabhebeänge bzw. das gesamte Temperaturfeld besser abgebildet werden kann. Damit zeigt auch die Lage der berechneten Rußwolke eine bessere Übereinstimmung mit der Messung.

In [124] wurden weiterhin quantitative Vergleiche der Rußkonzentrationen durchgeführt. Zu diesem Zweck wurde das experimentell bestimmte optische KL-Signal mit einem nach Gl. (4.82) berechneten KL-Wert verglichen.

$$KL \approx 2 \cdot 7.74 \cdot 10^6 \sum_{i=1,n} f_v(i) \Delta r(i) \quad (4.82)$$

Die Ergebnisse dieses Vergleichs sind in Abb. 4.18 zu sehen. Obwohl die Absolutwerte keine gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung aufweisen, ist die Form der KL-Verläufe für 16 oder 40 RIFs sehr ähnlich zu derselben aus der Messung. Bemerkenswert ist die Verschiebung der Simulation-KL-Kurven in Richtung Düse. Diese Verschiebung

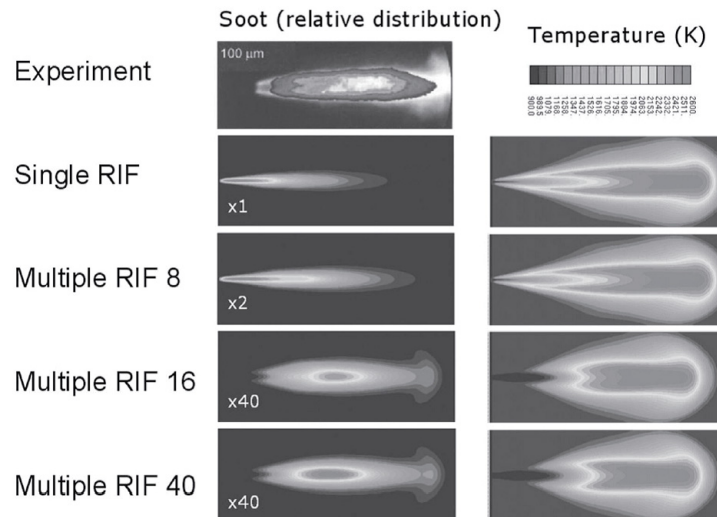


Abbildung 4.17.: Das Bild oben links zeigt qualitativ gemessene Rußkonzentration. In der linken Spalte werden berechnete Rußkonzentrationen, in der rechten – berechnete lokale Temperaturen dargestellt [124]

wurde auch bei der in [124] gezeigten Variation der Umgebungstemperatur beobachtet (s. Abb. 4.19). Für diese Rechnungen wurde nur das mRIF-Modell mit 40 RIFs angewandt, da 16 RIFs nicht genügend waren, um die Lift-off-Länge bei 1100 K korrekt abzubilden. In anderen Worten konnte keines der 16 Flamelets ungezündet bleiben, um das Abheben der Flamme darzustellen. Bei noch höheren Umgebungstemperaturen, 1200 K oder 1300 K, waren auch 40 RIFs ungenügend, um realistische Ergebnisse zu erzielen. Eine weitere Anhebung der RIF-Anzahl war nicht möglich, da die maximale Anzahl an Skalaren erreicht wurde, die vom CFD-Code unterstützt wird.

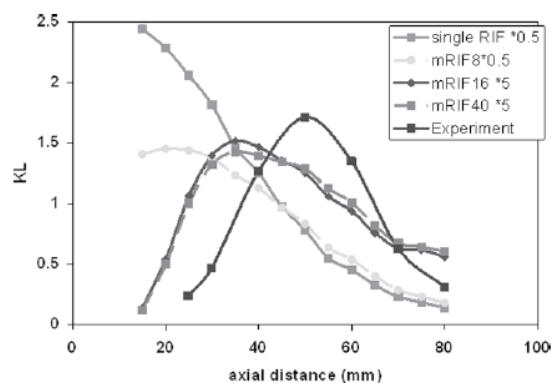


Abbildung 4.18.: Berechnete und gemessene KL-Werte an unterschiedlichen axialen Positionen [124]

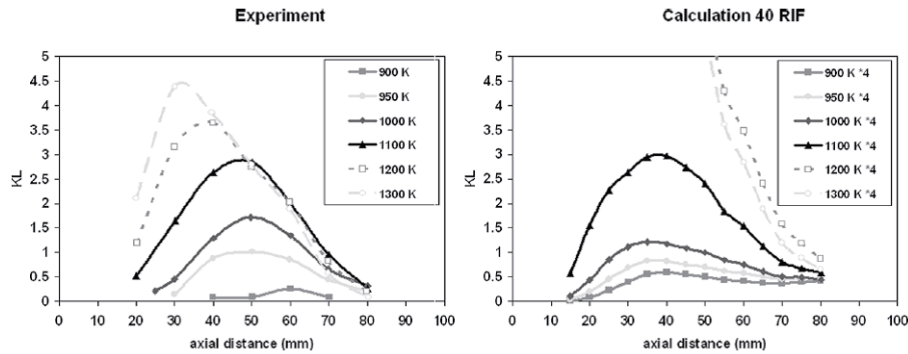


Abbildung 4.19.: Gemessene (links) und berechnete (rechts) KL-Werte für unterschiedliche Umgebungstemperatur [124]

Die eindeutige Abhängigkeit der Lift-off-Länge von der Flamelet-Anzahl wird durch die verbrennungsmotorischen Ergebnisse in Abb. (4.20) belegt. Während im Falle von einem Flamelet kein sichtbares Lift-off zu sehen ist, kann es bei 40 RIFs deutlich realistischer abgebildet werden.

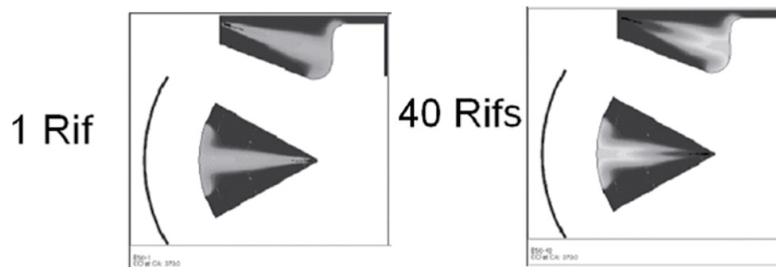


Abbildung 4.20.: Berechnete Rußkonzentrationen mit 1 bzw. 40 Flamelets [124]

Wie in [124] demonstriert können mit dem mRIF-Modell sehr beachtliche Rußsimulationsergebnisse erzielt werden. Einer der Hauptvorteile des Modells ist die Berücksichtigung der Instationarität der Verbrennungs- und Rußchemie. Viele Sensitivitäten werden richtig abgebildet, auch wenn die Position der Rußwolke nicht immer korrekt berechnet wird. Letzteres erfordert eine korrekte Darstellung der Flammenabhebelänge. Das ist im Falle des mRIF-Modells nur bedingt möglich. Die Anzahl der RIFs spielt hierbei eine entscheidende Rolle: für die genaue Modellierung der Lift-off-Länge sind sehr viele Flamelets nötig. Dies hat zwei wesentliche Nachteile. Erstens ist die Anzahl der RIFs häufig von der CFD-Code-Kapazität beschränkt. Zweitens ist die Verwendung von vielen RIFs mit beträchtlichen CPU-Zeiten verbunden. Die Fähigkeit, lokale Mischungseffekte fein aufzulösen, bleibt allerdings auch im Falle vom mRIF-Modell eingeschränkt. Weiterhin ist bei langsamer Chemie zu erwarten, dass dreidimensionale Effekte die Ergebnisse wesentlich beeinflussen. Dies gilt zum Beispiel für die NO_x - und Rußchemie. Wenn allerdings lokale Effekte sehr detailliert aufgelöst werden sollen, kann das mRIF-Modell nicht immer gute Ergebnisse liefern. Das ist der Fall, wenn etwa die Anfangsbildungsprozesse an Bedeutung gewinnen, z. B. bei Variationen der Ansaugtemperatur, oder wenn lokale Effekte in Düsen- oder Wandnähe ausschlaggebend sind.

Kriterium	Bewertung
CPU-Effizienz	-
Allgemeingültigkeit	++
Detaillierte Rußchemiemodellierung	++
Abbildung lokaler Rußphänomene	+
Chemie-Turbulenz-Interkation	+

Tabelle 4.5.: Bewertung des mRIF-Modells

4.4.4. CMC-Modell

Bei den in diesem Kapitel beschriebenen RIF-Modellen wird angenommen, dass die chemischen Prozesse, die in der Flammenfront stattfinden, viel schneller sind als die turbulenten Mischungsprozesse (unendlich schnelle Chemie). Die Flammenfront zwischen Oxidator und Kraftstoff wird somit unendlich dünn und konzentriert sich auf die stöchiometrische Zone. Da die chemischen Quellterme von dem Mischungsbruch abhängen, kann die Flammenstruktur vereinfacht werden: Kraftstoff, Oxidator und stöchiometrische Zone, in der sich die Reaktionsprodukte in chemischem Gleichgewicht befinden. Die CMC-Methode (Conditional Moment Closure), die unabhängig von Klimenko [152] und Bilger [153] vorgeschlagen wurde, weist dagegen keine a priori Parametrisierung der nicht-vorgemischten Flammen dieser Art auf. Sie ermöglicht Speziesentwicklung bei Zeitskalen, die viel größer sind als turbulenten Mischungszeitskalen.

Die Entwicklung des CMC-Modells wurde in den letzten Jahren von den Arbeiten von Mastorakos et al. und Kronenburg et al. stark geprägt. In [154] geben sie einen sehr detaillierten Einblick in die CMC-Modellierung. In Anlehnung an [154] wird in dieser Arbeit nur eine kurze Beschreibung dieses Modells gegeben. Die Hauptmotivation hinter den Entwicklungen der CMC-Methode ist die Notwendigkeit, die gemittelten nicht-linearen turbulenten reaktiven Quellterme akkurat zu berechnen [154]. Die Grundidee dabei ist eine starke Korrelation zwischen den reaktiven Spezies und dem Mischungsbruch aufzustellen. Die CMC-Methode ist somit rein konzeptionell den verschiedenen Laminar-Flamelet-Modellen sehr ähnlich. Mit dieser Korrelation können Fluktuationen des Mischungsbruchs auf Fluktuationen der reaktiven Spezies übertragen werden. Eine Konditionierung der reaktiven Spezies abhängig vom Mischungsbruch führt somit zu relativ kleinen Fluktuationen um den konditionierten Mittelwert. Für den chemischen Quellterm kann also eine relativ einfache Schließung erster Ordnung bestimmt werden. Bedingt dadurch ergibt sich eines der Hauptmerkmale der CMC-Methode: nämlich, dass Transportgleichungen für mittlere Spezieskonzentrationen gelöst werden, die bei einem bestimmten Mischungsbruchwert Z vorliegen (d. h. konditioniert sind). Für das CMC-Modell kann die Transportgleichung für chemisch reaktive Spezies wie folgt angegeben werden [154]:

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} + \rho u_i \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) = w_k \quad (4.83)$$

Der momentane Massenbruch wird in konditionierten Mittelwert und Fluktuation um die-

sen Mittelwert zerlegt:

$$Y_k(x, t) = Q_k(Z, x, t) + Y_k''(x, t) \quad (4.84)$$

Nach erneuter Konditionierung ergibt sich damit die finale CMC-Gleichung:

$$\begin{aligned} \langle \rho | Z^c \rangle \frac{\partial Q_k}{\partial t} = & -\langle \rho u_i | Z^c \rangle \frac{\partial Q_k}{\partial x_i} + \langle w_k | Z^c \rangle - \langle w_j | Z^c \rangle \frac{\partial Q_k}{\partial Z_j} \\ & + \langle \rho D_k \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} | Z^c \rangle \frac{\partial^2 Q_k}{\partial Z_j \partial Z_j} + \langle \rho D_k \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \frac{\partial Y_l}{\partial x_i} | Z^c \rangle \frac{\partial^2 Q_k}{\partial Z_j \partial Z_l} + e_q + e_y \end{aligned} \quad (4.85)$$

mit

$$e_q \equiv \left\langle \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Q_k}{\partial x_i} \right) + \rho D_k \frac{\partial Y_i}{\partial x_i} \frac{\partial^2 Q_k}{\partial x_i \partial Z_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\rho (D_k - D_j) \frac{\partial Y_j}{\partial x_i} \right] \frac{\partial Q_k}{\partial Z_j} \right\rangle | Z^c \rangle \quad (4.86)$$

und

$$e_y \equiv -\left\langle \rho \frac{\partial Y_k''}{\partial x_i} + \rho u_i \frac{\partial Y_k''}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{\partial Y_k''}{\partial x_i} \right) \right\rangle | Z^c \rangle. \quad (4.87)$$

Das Symbol $\langle X | Z \rangle$ bezeichnet die beim Mischungsbruchwert Z konditionierte Größe X . Die lokalen Ensemblemittelwerte ergeben sich nach Integration der konditionierten Größen über Z . Die Terme e_q und e_y können in Abwesenheit von differentialer Diffusion vernachlässigt werden.

Die Gründe für die Fluktuationen um den konditionierten Mittelwert sind sehr vielfältig. Für nicht-vorgemischte Flammen erweist sich der Mischungsbruch als ein zur Konditionierung sehr gut geeigneter Skalar [154]. Starke Fluktuationen der skalaren Dissipationsrate können aber auch die Flammenstruktur stark beeinflussen oder sogar zu lokaler Flammenlöschung führen. Dies ist in Abb. 4.21 deutlich illustriert.

Vor diesem Hintergrund untersuchte Mastorakos räumliche Fluktuationen der Selbstzündungsorte einer nicht-vorgemischten Flamme und stellte fest, dass Fluktuationen der skalaren Dissipationsrate entscheidend die konditionierten Fluktuationen der Reaktionsrate beeinflussen [162]. Zur Verbesserung der Schließung des chemischen Quellterms soll aus diesen Gründen auch die skalare Dissipationsrate herangezogen werden. Dabei spricht man von einem konditionierten Quelltermmittelwert zweiter Ordnung oder auch von CMC-Modellen zweiter Ordnung. Wenn sich die Konditionierung nur auf den Mischungsbruch beschränkt spricht man dagegen von CMC-Modellen erster Ordnung. Die Einführung der skalaren Dissipationsrate als zweite Konditionierungsvariable empfiehlt sich insbesondere bei Problemstellungen, bei denen die skalare Dissipationsraten stark variiert wie im Falle der dieselmotorischen Verbrennungssimulation. Im Rahmen einer Simulationsstudie

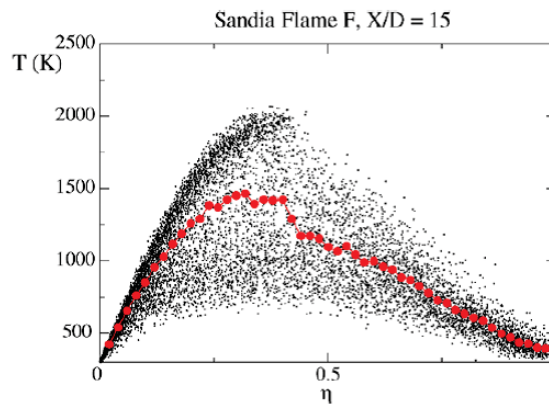


Abbildung 4.21.: Temperaturmessungen als Funktion des Mischungsbruchs in einer Methan-Luft-Diffusionsflamme mit signifikanter Flammenlöschung und erneuter Selbstzündung (Sandia Flame F). Die roten Symbole bezeichnen den konditionierten Temperaturmittelwert [157],

Frank, J.H., Barlow, R.S., Lundquist, C.: Radiation and nitric oxide formation in turbulent non-premixed jet flames. Proc. Combust. Inst. 28, p. 447-454, 2000, with permission from Elsevier

verglichen Cha et al. [163] das CMC-Modell zweiter Ordnung mit DNS. Mit dem CMC-Modell zweiter Ordnung konnte dabei die Flammenlöschung sehr gut abgebildet werden. Die Neuzündung fand allerdings zu früh statt. Daraus lässt sich schlußfolgern, dass die skalare Dissipationsrate ein guter Indikator der Flammenlöschung ist, korreliert allerdings nicht ausreichend gut mit den Spezieskonzentrationen nach Flammenlöschung [154]. Die Konditionierung auf momentane Werte der skalaren Dissipationsrate hat außerdem den Nachteil, dass der Einfluß der chemischen Zeitskalen auf die Flamme vernachlässigt wird. Beispielsweise führt eine zwar starke aber kurzzeitige Erhöhung der skalaren Dissipationsrate nicht unbedingt zu Flammenlöschung, da die Flamme dazu eine finite Reaktionszeit benötigt. Aus diesen Gründen schlug Bilger [164] eine Konditionierung auf Mischungsbruch und Enthalpie vor. Bestätigung für seine Hypothese fand er in experimentellen Daten von Diffusionsflammen, die in Abb. 4.22 dargestellt sind. Es ist klar ersichtlich, dass der Mischungsbruch alleine die Flammen nicht hinreichend gut beschreibt (s. Abb. 4.22a). Abb. 4.22b zeigt dieselben Daten diesmal als Funktion der Temperatur. Die Fluktuationen um den Mittelwert sind hierbei deutlich reduziert.

Die Genauigkeit des CMC-Modells kann durch die Einführung weiterer Konditionierungsskalare verbessert werden. Dies erhöht allerdings die Dimension von Q_k (s. Gl. (4.84)). Die daraus resultierenden Rechenzeiten sind sogar für die Berechnung von 2-dimensionalen Geometrien nicht mehr praktikabel [154].

Während für Diffusionsverbrennung viele unterschiedliche Modellansätze zufriedenstellende Ergebnisse liefern, bereitet der vorgemischte, chemiedominierte Anteil der Verbrennung immer noch Schwierigkeiten. Das liegt daran, dass keine Information vorliegt, wie sich der Reaktionsfortschritt in Anhängigkeit von den lokalen Gemischbedingungen (d. h. in erster Linie vom Mischungsbruch) gestaltet [5]. Die CMC-Modelle bieten an dieser Stelle

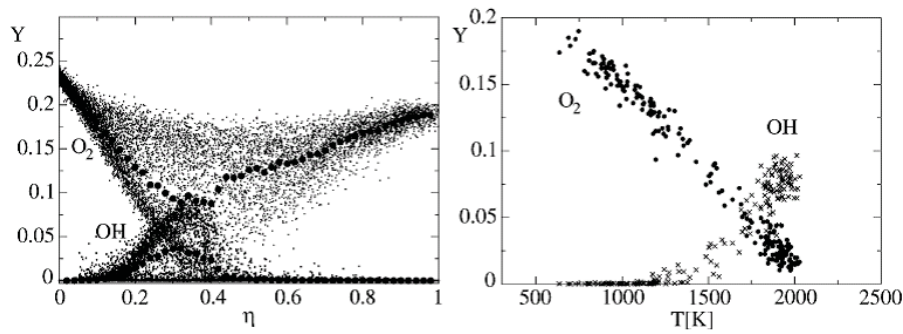


Abbildung 4.22.: O_2 - und OH -Massenbrüche bei einer Entfernung von $X/D = 15$ (Sandia Flame F) [165]

(a) als Funktion des Mischungsbruchs, wobei gefüllte Symbole die konditionierten Mittelwerte bezeichnen

(b) als Funktion von Mischungsbruch und Temperatur,

Kronenburg, A., Kostka, M.: *Modeling extinction and reignition in turbulent flames. Combust. Flame* 143, p. 342-356, 2005, with permission from Elsevier

konzeptbedingt einen deutlichen Vorteil: die Verteilung der Konzentration der Spezies im Mischungsbruchraum. Dies ist insbesondere für die exakte Modellierung der Zündung sowie der Schadstoffmodellierung von Bedeutung. Die Fähigkeit von CMC-Modellen erster Ordnung, die Verbrennung in einfachen Flammenanordnungen abzubilden, wurde in mehreren Arbeiten demonstriert [158], [167], [168], [169], [170]. Schon in einer frühen Arbeit von Kronenburg et al. [171] wurde damit Rußbildung und -oxidation in Methan-Luft-Flamme simuliert. Dabei kam das in diesem Kapitel bereits beschriebene Rußmodell von Moss [108] zum Einsatz. Damit konnte sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation hinsichtlich Mischungsbruch und Temperatur erzielt werden (s. Abb. 4.23a).

Obwohl in der Simulation die Flammenlänge leicht überschätzt und die Spitzentemperaturen leicht unterschätzt werden, konnten sehr zufriedenstellende Rußergebnisse erzielt werden. Das durchaus beeindruckende Simulationsergebnis, das stromabwärts zunächst einen Anstieg und anschließend einen Abfall des Rußvolumensbruchs aufweist, zeigt, dass die Balance zwischen Rußbildung und Rußoxidation gut wiedergegeben wird.

Erste Ansätze für die motorische Applikation des CMC-Modells werden in [172] und [173] vorgestellt. Noch ausführlicher ist die CMC-Studie von Wright et al. [174]. Als Validierungsgrundlage wurden hierbei 9 Betriebspunkte eines schweren LKW-Motors herangezogen, die aus dem sogenannten ESC-Test (European Stationary Cycle [175]) entnommen wurden. Damit soll die Fähigkeit des Modells demonstriert werden, Änderungen der Motorbetriebsstrategie hinsichtlich Luft- bzw. Kraftstoffpfad abzubilden. Die dabei verwendeten Bewertungskriterien waren Druck- und Brennverläufe sowie NO_x -Emissionen. Die verbrennungsschemischen Reaktionen wurden mit Hilfe von einem stark reduzierten reaktionskinetischen n -Heptan-Mechanismus mit 59 Spezies [176] (Skeleton-Mechanismus) modelliert, der einen NO_x -Submechanismus beinhaltet. Letzterer als aktiver Teil des Gesamtsimulationsmodells (kein Post-Flame-Modell) ermöglicht zum einen die Berücksichtigung der

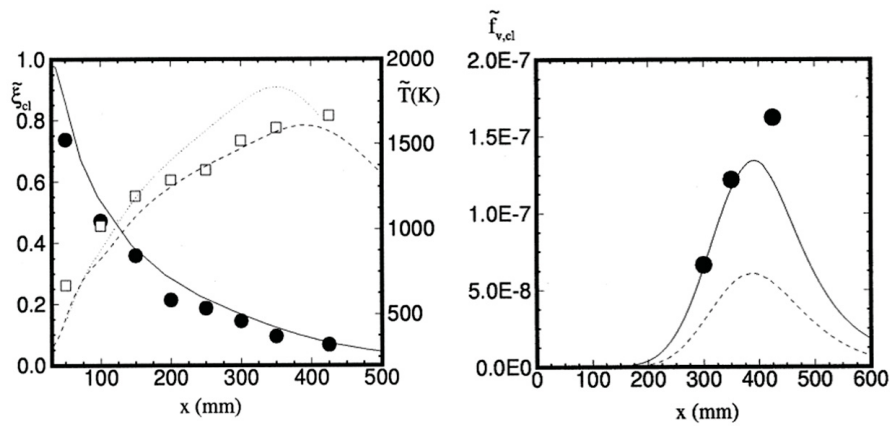


Abbildung 4.23.: (a) Mischungsbruch und Temperatur auf der Flammenmittellinie. Symbole bezeichnen experimentelle Daten, durchgezogene Linie – Mischungsbruch, gestrichelte Linie – Temperatur, gepunktete Linie – Temperatur bei adiabaten Bedingungen

(b) Rußvolumenbruch auf der Flammenmittellinie. Symbole bezeichnen experimentelle Daten, durchgezogene Linie – Diffusionskoeffizienten von Ruß und Partikelanzahldichte gleich 0, gestrichelte Linie – Lewis-Zahl für alle Spezies gleich 1 [171],

Kronenburg, A., Bilger, R. W., Kent, J. H., Modeling Soot Formation in Turbulent Methane-Air Jet Diffusion Flames, Combust. Flame, Vol. 121, p. 24-40, 2000, with permission from Elsevier

Chemie-Turbulenz-Interaktion und zum anderen NO_x -Rückreaktionen.

Leider werden in [174] keine Rußergebnisse angeboten. Dies liegt vermutlich daran, dass der aus Rechenzeitgründen gewählte *n*-Heptan-Skeleton-Mechanismus nicht alle wichtigen Rußvorprodukte beinhaltet. Um die CPU-Zeit-Effizienz zu steigern, verwendeten Wright et al. das Standard-3D-CFD-Netz mit einer sogen. 2D-Formulierung des CMC. Letztere eliminiert eine Raumdimension, indem die Strömungsparameter in azimuthaler Richtung PDF-gewichtet integriert werden [173]. Noch effizienter hinsichtlich CPU-Zeit ist die 0D-CMC-Formulierung, bei der die PDF-Mittelung über den gesamten Brennraum erfolgt [177]. Für alle 9 Betriebspunkte, die im Rahmen von [174] untersucht wurden, konnten gute Simulationsergebnisse erzielt werden (s. Abb. 4.24). Die Ergebnisse sind trotz Abweichungen des Brennverlaufs als gut zu bewerten, da die Modellkonstanten für alle Betriebspunkte identisch waren. Das Modell bildet relativ zuverlässig Zündverzug, Vormischverbrennung sowie Diffusionsphase der Verbrennung ab. Die NO_x -Ergebnisse auf der anderen Seite erreichen nicht ganz das Niveau der Verbrennungsergebnisse, insbesondere bei hohen Lasten, wo die gemessenen Werte deutlich überschätzt werden (s. Abb. 4.25).

Die in [174] vorgestellten Ergebnisse konnten nur zu hohen CPU-Kosten erreicht werden, weswegen die oben angesprochenen Vereinfachungen des CMC-Modells (s. 2D-CMC in [173]) eingeführt wurden. Aus demselben Grund wurde in [174] auf eine Berücksichtigung der konditionierten Fluktuationen verzichtet. Letztere haben deutlichen Einfluß auf Zündverhalten bzw. Flammenlöschung. Auch einfache Flammenanordnungen bringen diese Nachteile der CMC-Modelle erster Ordnung ans Licht (s. Abb. 4.21 und 4.22). Um

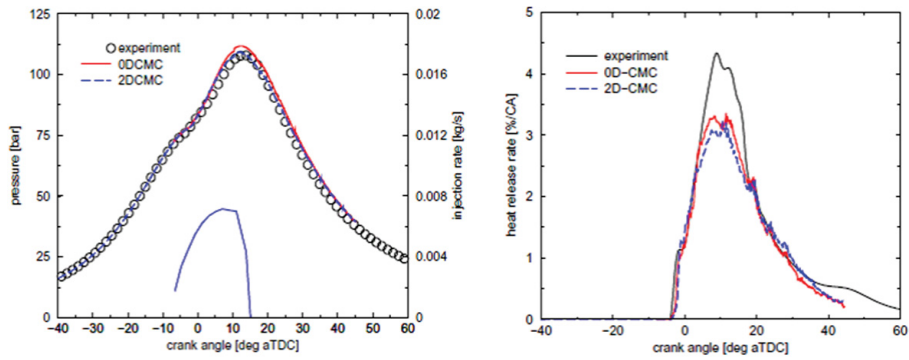


Abbildung 4.24.: Experimentelle Daten und 0D-CMC- bzw. 2D-CMC-Ergebnisse für Druck (links) und Brennverlauf (rechts) [174],

Copyright ©2007 SAE International. Reprinted with permission.

komplexere Verbrennungsprobleme korrekt abzubilden ist die Schließung zweiter Ordnung unabdingbar. Diese hat allerdings einen schwerwiegenden Nachteil: sie erfordert die Lösung von zusätzlichen Transportgleichungen für die konditionierte Varianz und Kovarianz. Dies hat inakzeptabel lange Rechenzeiten zur Folge, wenn detaillierte chemische Mechanismen für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen angewandt werden müssen, also insbesondere im Falle von Rußsimulation. Die CMC-Modelle könnten sich langfristig als der theoretisch am besten motivierte Weg durchsetzen [5], momentan sind sie aber aufgrund der sehr hohen CPU-Kosten noch nicht für den industriellen Einsatz geeignet (s. Tab. 4.6).

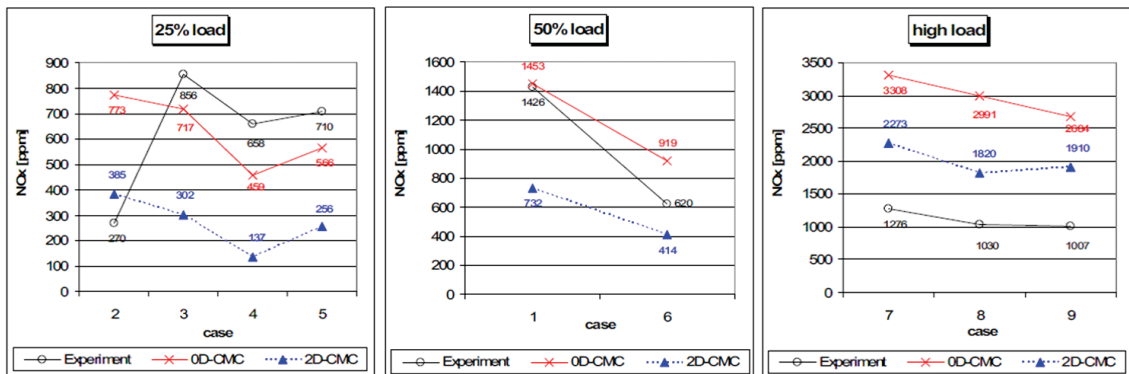


Abbildung 4.25.: Gemessene und gerechnete NOx-Emissionen [174],

Copyright ©2007 SAE International. Reprinted with permission.

Kriterium	Bewertung
CPU-Effizienz	--
Allgemeingültigkeit	++
Detaillierte Rußchemiemodellierung	++
Abbildung lokaler Rußphänomene	++
Chemie-Turbulenz-Interaktion	++

Tabelle 4.6.: Bewertung des CMC-Modells

5. Emissionsmodellierung

Die Vielzahl an Betriebsparametern, die mit dem Ziel der Absenkung der Rohemissionen optimiert werden müssen, und die steigende Komplexität der chemischen und der physikalischen Prozesse stellen die klassische experimentelle Motorenentwicklung vor besonderen Herausforderungen. Dies macht die CFD-Simulation sehr attraktiv, solange sie eine Motorenoptimierung bei akzeptablen CPU-Zeiten ermöglicht. Ruß- und NO_x -Rohemissionsmodelle als Teil eines CFD-Entwicklungspakets sollen auch weitere Voraussetzungen erfüllen, wenn sie im industriellen Umfeld eingesetzt werden sollen.

Erstens, die Modelle sollen allgemein gültig sein, d. h. sie sollen für unterschiedliche Motoren und unterschiedliche Betriebsstrategien anwendbar sein. Einfache empirische Modelle erfüllen diesen Zweck nicht, wie in Kapitel 4 beschrieben. Aus diesem Grund ist eine Modellierung der chemischen und physikalischen Prozesse erforderlich, die zur Bildung bzw. Abbau von Ruß und NO_x führen, und zwar unabhängig von der jeweiligen Anwendung (Gasbrenner, Dieselmotor, Gasturbine, etc.). Wie aus der in Kapitel 4 angebotenen Übersicht unterschiedlicher Rußmodelle hervorgeht sollen insbesondere die chemischen Prozesse ausgehend von der Partikelentstehung über Partikelwachstum bis hin zur Partikeloxidation detailliert modelliert werden. In dieser Arbeit kam deshalb ein detailliertes reaktionskinetisches Rußmodell zum Einsatz, das in Kapitel 5.1 beschrieben ist. Analog dazu wurde das später im selben Kapitel beschriebene detaillierte NO_x -Modell entwickelt. Diese detaillierten Modelle greifen auf die lokalen Konzentrationen von hunderten von Spezies zu. Letztere können aus Rechenzeitgründen nicht transportiert werden, weswegen in dieser Arbeit das sogenannte Steady-State-Flamelet-Modell angewandt wurde. Dieses ermöglicht eine Vorberechnung (engl. Preprocessing) der detaillierten Chemie wie bereits in Kapitel 4.4 beschrieben. Dabei wurde die Verbrennungschemie durch einen detaillierten reaktionskinetischen Mechanismus abgebildet, der in Kapitel 5.1.1 erläutert wird.

Zweitens, die Modelle sollen nicht nur lokale Ruß- und NO_x -Konzentrationen, sondern auch lokale Bildungs- und Konsumationsraten liefern können. Dies ist von besonderer Bedeutung in der frühen Phase der Brennverfahrensentwicklung. Die Schadstoffbildungs- und -konsumationsprozesse hängen von den thermodynamischen Bedingungen und der

Gemischzusammensetzung in der Reaktionszone ab. Da eine infinitesimal feine Auflösung des Brennraums aus Rechenzeitgründen nicht möglich ist, müssen die beiden Modelle in der Lage sein, die lokale statistische Verteilung der entsprechenden Größen innerhalb der Zelle zu berücksichtigen. Des Weiteren hängen die lokalen Bildungs- und Konsumationsraten von der Mischungsgeschwindigkeit der Reaktanten Kraftstoff und Oxidator ab.

Drittens, die beiden Modelle sollen eine Optimierung des Brennverfahrens bzw. der Brennraumgeometrie in einem akzeptablem Zeitrahmen ermöglichen. Dies impliziert die Einführung von möglichst wenigen zusätzlichen Variablen und Transportgleichungen. Die CPU-Effizienz der Modelle wurde durch den Einsatz von dem FLOS-Ansatz (engl. Flamelet Library of Sources) gesteigert. Dabei wurden die Ruß- bzw. NO-Bildungsraten vorausberechnet und tabelliert. Ursache dafür, dass Reaktionsraten anstelle von Massenbrüchen abgelegt werden müssen, ist die Annahme, dass die Schadstoffchemie viel langsamer ist als die turbulenten Zeitskalen im Strömungsfeld. Diese Annahme besagt, dass dreidimensionale Effekte einen wesentlichen Einfluss auf die Konzentrationen der Emissionen haben. Da die daraus resultierende Bibliothek sehr große Speicherplatzanforderungen stellt, wurden die Reaktionsraten der beiden Schadstoffe als mathematischen Funktionen modelliert. Für eine genaue Rußmodellierung ist außerdem die Kenntnis der Partikelgrößenverteilung (PSDF, engl. particle size distribution function) von entscheidender Bedeutung. Aus dieser PSDF wird die effektive Oberfläche der Rußpartikel berechnet. Die detaillierte Lösung der PSDF ist sehr CPU-Zeit intensiv, deshalb wurde im Rahmen dieser Arbeit die Momentenmethode von Frenklach [14], [140], [141] angewandt.

Eine Übersicht über die Modellierungskette in dieser Arbeit wird in Abb. 5.1 gegeben.

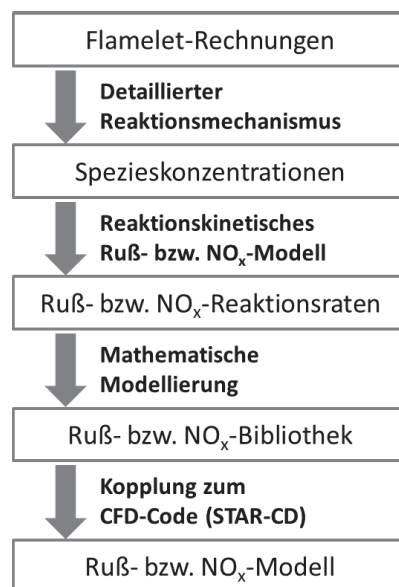


Abbildung 5.1.: Übersicht Modellentwicklungskette

5.1. Reaktionskinetik

In diesem Kapitel wird der Reaktionsmechanismus vorgestellt, der im Rahmen dieser Arbeit für die Modellierung der Gasphase zum Einsatz kam. Anschließend werden die Reaktionen angegeben, die die Ruß- und die NO_x -Chemie beschreiben.

5.1.1. Gasphase

Für die Beschreibung der Chemie in der Gasphase wurde der n -Heptan-Reaktionsmechanismus von Zeuch et al. [144] verwendet. Weiterführende Informationen zu dem Mechanismus finden sich in [144], [101]. Das Ziel, das Zeuch et al. in ihrer Arbeit verfolgten, war ein Verfahren zu entwickeln, mit dem die Komplexität der Reaktionskinetik bei gleichbleibender Ergebnisqualität reduziert wird. Durch das sog. chemische Lumping konnte ein Mechanismus entwickelt werden, der für sehr unterschiedliche Verbrennungsanwendungen validiert wurde: Flammen, Flußreaktor, Jet-Reaktor, Stoßrohr und HCCI-Motor. Die Validierungskriterien, die dabei herangezogen wurden, waren u. a. Zündverzug, Flammengeschwindigkeit und lokale Größen wie Spezieskonzentrationen und Sensitivitätskoeffizienten. Letztere zeigen inwiefern die Vorhersagekraft des reduzierten Mechanismus dem detaillierten Mechanismus entspricht. Abb. 5.2 und Abb. 5.3 zeigen beispielhaft die Ergebnisqualität, die mit den jeweiligen Mechanismen realisiert werden kann.

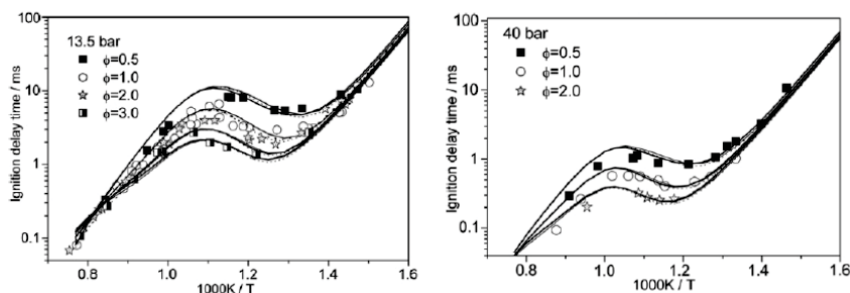


Abbildung 5.2.: Berechnete (schwarze Linie Skeleton-Mechanismus, graue Linie detaillierter Mechanismus, gepunktete Linie Lumped-Mechanismus) und gemessene (Symbole) Zündverzüge für 1.79% n -Heptan-Mischung in O_2/N_2 [144], Zeuch, T., Moreac, G., Ahmed, S.S., and Mauss, F., *A Comprehensive Skeleton Mechanism for the Oxidation of n -Heptane Generated by Chemistry Guided Reduction, Combustion and Flame*, 155, p. 651, 2008, with permission from Elsevier

Für diese Arbeit wurde der Skeleton-Mechanismus mit 121 Spezies und 973 Reaktionen aus [144] gewählt, da dieser eine ausreichend hohe Genauigkeit bei relativ geringer Anzahl von Spezies und Reaktionen bietet. Dieser Mechanismus basiert auf n -Heptan und weist deswegen keine Aromaten auf, die bekanntermaßen die Rußbildungsneigung des Kraftstoffs maßgeblich beeinflussen [145]. Aus diesem Grund wurde bei früheren Arbeiten mit dem Rußmodell von Mauß [146] ein Mechanismus für einen Modellkraftstoff eingesetzt, der aus n -Dekan und α -Methylnaphthalin [126] besteht. Der n -Heptan-Mechanismus erhielt hier den Vorzug, da er insbesondere bei hohen Drücken extensiv validiert wurde und somit

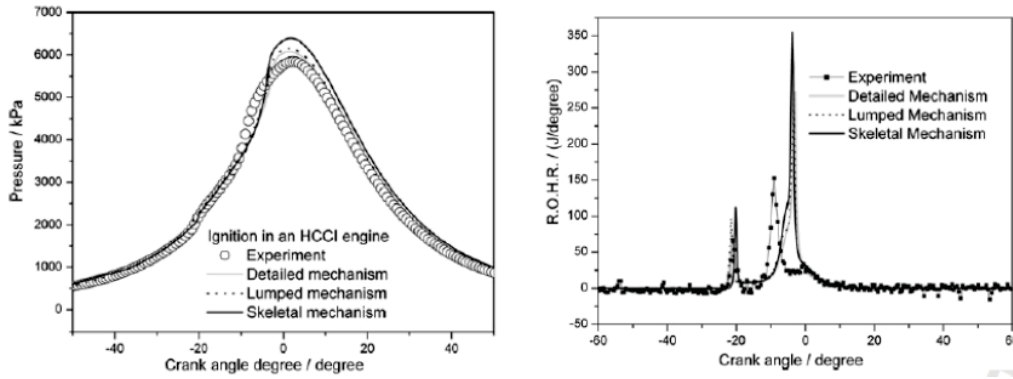


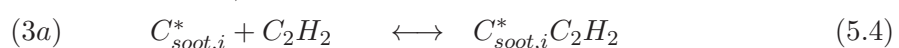
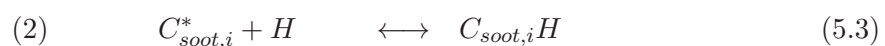
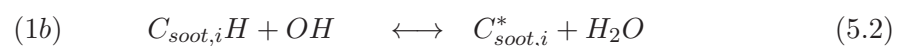
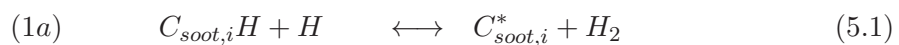
Abbildung 5.3.: Vergleich des Zylinderdrucks und der Wärmefreisetzungsrates bei $\varphi = 0.222$ [144],

Zeuch, T., Moreac, G., Ahmed, S.S., and Mauss, F., A Comprehensive Skeleton Mechanism for the Oxidation of n-Heptane Generated by Chemistry Guided Reduction, Combustion and Flame, 155, p. 651, 2008, with permission from Elsevier

zuverlässiger ist. Die *n*-Heptan-Chemie wurde außerdem direkt mit der PAK-Chemie gekoppelt, die ihrerseits die Reaktionspfade zu Benzol und weitere Reaktionspfade beinhaltet, die die Bildung des ersten kleinen PAKs (Pyren) beschreiben.

5.1.2. Ruß

Das PAK-Molekül wächst - wie bereits im Kapitel 4 beschrieben - in einem sich wiederholenden Zyklus von H-Radikal-Abspaltung und Kohlenstoffanlagerung (HACA, s. Kapitel 4.1) [14]. Nach der Addition von Acetylen findet ein planares Wachstum der PAKs statt, wodurch zusammenhängende PAK-Ringe entstehen. Dieser Prozess wiederholt sich, so dass anschließend große PAKs entstehen, die ihrerseits koagulieren und somit die ersten Rußpartikel bilden. Der Prozess der Koagulation wurde in dieser Arbeit durch die Smoluchowski-Gleichung beschrieben [147]. Die entstandenen Rußpartikel können nun durch heterogene Reaktionen zwischen gasförmigen Spezies und reaktive Stellen auf der Rußoberfläche weiter wachsen. Auch hier besteht der erste Schritt aus Abspaltung eines Wasserstoffradikals aus der Rußoberfläche, dem die Addition von C_2H_2 folgt (HACA). Außerdem können die Rußpartikel durch Kondensation von PAK-Moleküle auf der Rußoberfläche wachsen. Rußoxidation findet auch auf der Rußoberfläche statt. Dies geschieht im Rahmen einer heterogenen Reaktion zwischen Ruß und molekularem Sauerstoff (O_2) oder Hydroxyl-Radikalen (OH). Die elementaren Reaktionen, die diese Rußoberflächenprozesse beschreiben, können wie folgt zusammengefasst werden:





Die resultierenden Rußmassenquellterme ergeben sich somit zu:

$$\omega_{soot,2PAH,pi} = \beta_{PAH,PAH} [C_{soot,PAH}]^2 \quad (5.9)$$

$$\omega_{soot,i,SG} = k_{3b,f} AB ([C_{soot,i-1}] - [C_{soot,i}]) \quad (5.10)$$

$$\omega_{soot,i,Fr} = k_{3b,b} [H] ([C_{soot,i+1}] - [C_{soot,i}]) \quad (5.11)$$

$$\omega_{soot,i,Ox1} = k_{4a,f} A [O_2] ([C_{soot,i+2}] - [C_{soot,i}]) \quad (5.12)$$

$$\omega_{soot,i,Ox2} = k_{5,f} [OH] ([C_{soot,i+2}] - [C_{soot,i}]) \quad (5.13)$$

mit

$$A = \frac{k_{1a,f} [H] + k_{1b,f} [OH] + k_5 [OH]}{k_{1a,b} [H_2] + k_{1b,b} [H_2O] + k_2 [H] + k_{3a,f} [C_2H_2] f_{3a}} \quad (5.14)$$

$$B = \frac{k_{3a,f} [C_2H_2]}{k_{3b,f} + k_{3a,b} + k_{4b} [O_2]} \quad (5.15)$$

$$f_{3,a} = \frac{k_{3b,f}}{k_{3b,f} + k_{3a,b} + k_{4b} [O_2]} \quad (5.16)$$

5.1.3. Stickoxide

Bei der Stickoxidbildung existieren verschiedene Reaktionspfade, die im Kapitel 4.3 beschrieben wurden. Der dominierende Mechanismus bei der innermotorischen Stickoxidentstehung im Dieselmotor ist der Zeldovich-Mechanismus. Aus diesem Grund war nur dieser Mechanismus Gegenstand der NO_x -Modellierung in dieser Arbeit.

Die NO -Bildungsgeschwindigkeit wurde gemäß den Reaktionen (4.42 - 4.44), die den Zeldovich-Mechanismus beschreiben, mit Gl. (4.45) angegeben. Mit der zeitliche Änderung der Stickstoff-Konzentration (s. Gl. (4.46)) ergibt sich die NO -Bildungsrate zu:

$$\frac{d[NO]}{dt} = [N_2][O]K_{1,f} - [NO][O]K_{2,b} - [NO][H]K_{3,b} + \frac{[N_2][O]K_{1,f} + [NO][O]K_{2,b} + [NO][H]K_{3,b}}{[NO]K_{1,b} + [O_2]K_{2,f} + [OH]K_{3,f}} ([O_2]K_{2,f} + [OH]K_{3,f} - [NO]K_{1,b}) \quad (5.17)$$

Das Produkt von drei Konzentrationen kann vernachlässigt werden, womit Gl. (5.17) zu

$$\frac{d[NO]}{dt} = [N_2][O]K_{1,f} - [NO][O]K_{2,b} - [NO][H]K_{3,b} + \frac{[N_2][O]K_{1,f}([O_2]K_{2,f} + [OH]K_{3,f})}{[NO]K_{1,b} + [O_2]K_{2,f} + [OH]K_{3,f}} - \frac{[NO]^2K_{1,b}([O]K_{2,b} + [H]K_{3,b})}{[NO]K_{1,b} + [O_2]K_{2,f} + [OH]K_{3,f}} \quad (5.18)$$

reduziert werden kann. Vereinfacht lässt sich die NO-Bildungsrate als

$$\frac{d[NO]}{dt} = A - [NO]B + \frac{A\frac{C}{D}}{[NO] + \frac{C}{D}} - [NO]^2 \frac{B}{[NO] + \frac{C}{D}} \quad (5.19)$$

darstellen, wobei:

$$A = [N_2][O]K_{1,f} \quad (5.20)$$

$$B = [O]K_{2,b} + [H]K_{3,b} \quad (5.21)$$

$$C = [O_2]K_{2,f} + [OH]K_{3,f} \quad (5.22)$$

$$D = K_{1,b} \quad (5.23)$$

5.2. Flamelet-Bibliothek und Mathematische Anpassung

Unter Verwendung des zuvor beschriebenen *n*-Heptan-Reaktionsmechanismus und des reaktionskinetischen Ruß- und NO_x-Modells wurden Flamelet-Bibliotheken erstellt, die Bildungs- und Konsumtionsraten für Ruß und NO_x beinhalten. Damit diese Bibliotheken für die Simulation der Schadstoffbildung bei modernen Dieselmotoren angewandt werden können, wurden die entsprechenden Bereiche für die Randbedingungen – skalare Dissipationsrate, Oxidatorseitentemperatur, Druck und AGR-Rate – groß gewählt (s. Tab. 5.1).

Kraftstoffzusammensetzung	100% N-C ₇ H ₁₆
Luftzusammensetzung (vol.) [mm]	79% N ₂ , 21% O ₂
AGR-Zusammensetzung (vol.)	12.4% CO ₂ , 14.2% H ₂ O, 73.4% N ₂
Temperatur Kraftstoffseite (geom.)	350 K
Temperatur Oxidatorseite	T = 250 – 1600 K
AGR-Bereich	AGR = 0 – 50%
Druck	P = 1 – 250 bar
Skalare Dissipationsrate	χ = 0.05 – Löschungsgrenze

Tabelle 5.1.: Bereich Flamelet-Rechnungen

Wie bereits beschrieben weist die Gaszusammensetzung auf der Oxidatorseite eines Flamelets Luft und Restgas auf. Da der *n*-Heptan-Reaktionsmechanismus (s. Kapitel 5.1) die Chemie sehr detailliert abbildet, ist die Gaszusammensetzung auf der Oxidatorseite entscheidend für das Konvergenzverhalten der Flamelet-Rechnung. Für diese Arbeit wurde die Restgaszusammensetzung auf der Oxidatorseite als Produkt einer stöchiometrischen *n*-Heptan-Verbrennung modelliert.

$$100\text{vol}\% \text{ Oxidator} = x\text{vol}\% \text{ Frischluft} + (100 - x)\text{vol}\% \text{ Restgas} \quad (5.24)$$

$$100\text{vol}\% \text{ Restgas} \approx \sim 12\text{vol}\% \text{ CO}_2 + \sim 13.7\text{vol}\% \text{ H}_2\text{O} + \sim 74.3\text{vol}\% \text{ N}_2 \quad (5.25)$$

Dementsprechend ergibt sich konstantes Molen- bzw. Massenbruchverhältnis zwischen CO_2 und H_2O .

$$\frac{X_{\text{CO}_2}}{X_{\text{H}_2\text{O}}} \approx 0.875 \quad (5.26)$$

$$\frac{Y_{\text{CO}_2}}{Y_{\text{H}_2\text{O}}} \approx 2.173 \quad (5.27)$$

Bei der Erstellung der Flamelet-Bibliotheken kam das Simulationsprogramm LOGEsoft [38] zum Einsatz. Bedingt durch die Größe der abgedeckten Bereiche für die Randbedingungen (s. Tab. 5.1) benötigt die resultierende Flamelet-Bibliothek ca. 20 GB Speicherplatz. Für einen Einsatz in der Motorenentwicklung ist diese Größe nicht praktikabel. Eine Interpolation der Quellterme aus der Bibliothek in 5 Dimensionen (AGR-Rate, p , T_{ox} , χ und Z) für jede CFD-Zelle ist außerdem sehr CPU-Zeit intensiv. Des Weiteren ist auch die numerische Integration der laminaren Quellterme über Mischungsbruch und skalare Dissipationsrate für turbulente Mittelung teuer hinsichtlich CPU-Zeit. Die Quellterme müssen deswegen in eine einfachere analytische Form überführt werden, die nicht so hohe Speicherplatz- und CPU-Zeit-Anforderungen stellt. An dieser Stelle bietet die β -Funktion eine attraktive Möglichkeit, die Abhängigkeit der Quellterme vom Mischungsbruch zu modellieren. Ihr Vorteil liegt darin, dass das Produkt aus dem chemischen Quellterm und der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion für den Mischungsbruch analytisch integriert werden kann. Ihre Genauigkeit ist allerdings relativ eingeschränkt [185]. Dies gilt insbesondere für die Modellierung der Nukleation- und Oberflächenwachstumsquellterme (s. Abb. 5.4). Aus diesem Grund wurde für das Rußmodell, das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, eine Approximation durch doppelte β -Funktion eingeführt. Auch für diese ist eine analytische Berechnung möglich.

Abb. 5.4 zeigt beispielhaft die Form des Nukleationsquellterms in Abhängigkeit vom Mischungsbruch. Es ist klar zu erkennen, dass die doppelte β -Funktion der einfachen β -Funktion gegenüber deutlich vorteilhafter ist. Diese Vorteile kommen insbesondere im Falle von Verbrennung bei niedrigen globalen Luftverhältnissen zum Tragen. Diese zeichnen sich durch längere Zündverzögerungen, folglich auch durch einen besseren Homogenisierungsgrad vor der Zündung aus. Dementsprechend finden Rußbildung und -oxidation hauptsächlich in einem engen Intervall um Z_{st} . Dies erfordert eine hohe Genauigkeit der Modellierung der Rußquellterme in diesem Bereich, die durch die einfache β -Funktion nicht erreicht werden konnte (s. Abb. 5.4).

Die mathematische Modellierung der Quellterme als doppelte β -Funktion ist ein Prozess,

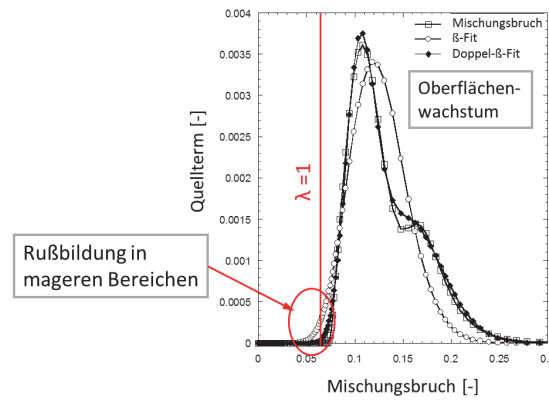


Abbildung 5.4.: Beispiel für Nukleationsquellterm modelliert durch β -Funktion bzw. doppelte β -Funktion

der aus einigen Schritten besteht. Als erstes werden die Quellterme als Funktion von Z so normiert, dass die aufintegrierte Fläche gleich 1 ist. Im zweiten Schritt wird die magerere Seite des Quellterms durch eine einfache β -Funktion approximiert. Im dritten Schritt wird nicht die fette Seite an sich als einfache β -Funktion modelliert, sondern die Differenz zwischen dem tatsächlichen Quellterm (resultierend aus der Flamelet-Rechnung) und der Approximation der mageren Seite durch die erste einfache β -Funktion.

In der letzten Phase der mathematischen Modellierung der Quellterme werden die Koeffizienten der doppelten β -Funktionen als Funktion der restlichen Bibliothek-Parameter – Druck, AGR-Rate, Oxidatorseitentemperatur und skalare Dissipationsrate – modelliert. Auch hier wurde die Vorgehensweise im Vergleich zu früheren Arbeiten mit dem Modell von Mauß [15] weiterentwickelt. Die besten Ergebnisse, die die geringste Abweichung vom tatsächlichen Rußquellterm aufweisen, wurden mit Interpolation der Koeffizienten der doppelten β -Funktionen über skalare Dissipationsrate und AGR-Rate erzielt. Die Abhängigkeit der Koeffizienten von Oxidatorseitentemperatur und Druck wurde durch zwölf unterschiedliche mathematische Funktionen modelliert.

Abbildungen 5.5 und 5.6 zeigen beispielhaft die Verbesserung des absoluten und des relativen Fehlers, die durch den Einsatz dieser neuen Modellierungsstrategie erzielt werden konnten. Das oben beschriebene Prozedere resultiert in eine Benutzer definierte Subroutine für STAR-CD. Die Input-Parameter für die Subroutine sind Mischungsbruch, skalare Dissipationsrate, Druck und Oxidatorseitentemperatur, Output-Parameter – über den Mischungsbruch integrierte Rußbildungs- und -oxidationsraten.

Auch für die mathematische Modellierung der NO_x -Quellterme, die aus den Flamelet-Rechnungen resultieren, wurde das in diesem Kapitel beschriebene Verfahren angewandt. Dabei wurden allerdings nicht die Quellterme an sich, sondern die im Kapitel 5.1.3 beschriebenen Parameter A, B, C und D approximiert. Da die doppelte β -Funktion in diesem Fall keine Genauigkeitsvorteile bietet, wurden diese vier Parameter durch einfache β -Funktionen modelliert. Im Gegensatz zu den Rußfits wurden hier die besten Ergebnisse bzw. die geringsten Abweichungen von den tatsächlichen Werte der Parameter A, B, C und

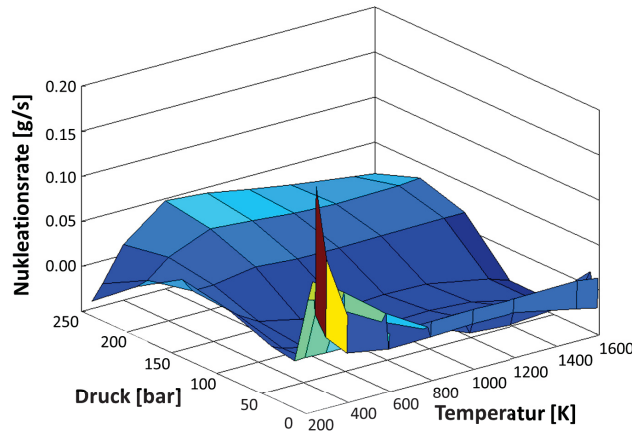


Abbildung 5.5.: Verbesserung der mittleren absoluten Fehlers durch den Einsatz von doppelten β -Funktionen im Vergleich zu Fit mit β -Funktion (Nukleation, AGR = 0% und skalare Dissipationsrate 10s^{-1}) [143],
Nachdruck genehmigt von LOGE AB

D mit Interpolation der Koeffizienten über AGR-Rate erzielt. Die Abhängigkeit der Koeffizienten von Oxidatorseitentemperatur, skalare Dissipationsrate und Druck wurde durch Polynom-Funktionen modelliert.

5.3. Kopplung zum CFD-Code

Nach der Entstehung der ersten Partikel finden die heterogenen chemischen Reaktionen auf der Rußoberfläche statt. Somit ist eine Beschreibung der Partikelgrößenverteilungsfunktion unabdingbar, da sie direkt mit der Rußoberfläche zusammenhängt. Bei Koagulation sphärischer Partikel ist die Annahme einer Transformation der Partikelgrößenverteilungsfunktion in eine sich-selbst-erhaltende Verteilungsfunktion zulässig [178]. Bei dieser Art von Verteilungsfunktionen bleibt das Verhältnis vom Mittelwert zur Standardabweichung konstant. Partikelbildung und Oberflächenwachstum beeinflussen jedoch die Verteilungsfunktion [15]. Der zeitliche Verlauf der Teilchenzahldichte N , sowie des Rußvolumenanteils f_v , wird durch die oben beschriebenen Oberflächenprozesse vollständig beschrieben und kann demnach wie folgt dargestellt werden [15]:

$$\frac{N}{t} = \text{Partikelbildung} - \text{Koagulation} - \text{Oxidation} \quad (5.28)$$

$$\frac{f_v}{t} = \text{Partikelbildung} + \text{Kondensation} + \text{Oberflächenwachstum} - \text{Oxidation} \quad (5.29)$$

Nach Gl. (5.28) wird die Partikeldichte durch Oberflächenwachstum und Kondensation nicht beeinflusst. Die Koagulation der Partikel hat wiederum nach Gl. (5.29) keinen Einfluß auf den Rußvolumenanteil.

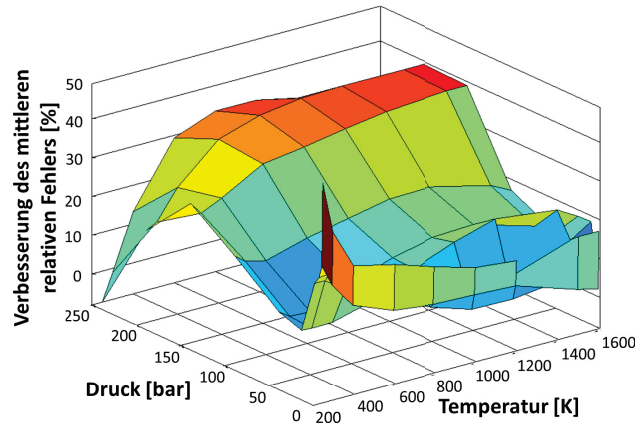


Abbildung 5.6.: Verbesserung der mittleren relativen Fehlers durch den Einsatz von doppelten β -Funktionen im Vergleich zu Fit mit β -Funktion (Nukleation, AGR = 0% und skalare Dissipationsrate 10s^{-1}) [143],
Nachdruck genehmigt von LOGE AB

Zur Beschreibung der Partikelgrößenverteilungsfunktion kamen in der Vergangenheit hauptsächlich zwei Modelle zum Einsatz: die Momentenmethode [123], [179], [180] und die Sektionsmethode [182], [183]. Einfachere Methoden wie Modelle zur Beschreibung der Rußmasse [184], [185], [186] oder der Kombination aus Rußmasse und Partikeldichte [187], [27] können als eine Art Momentenmethoden aufgefasst werden, die von der Annahme Gebrauch machen, dass die Partikelgrößenverteilungsfunktion durch nur zwei Momente beschrieben werden kann. In dieser Arbeit wurde die Momentenmethode angewandt. Ihr Hauptvorteil der Sektionsmethode gegenüber ist, dass bei der Momentenmethode eine kleine Anzahl von Variablen benötigt wird, um die Partikelgrößenverteilungsfunktion akkurat zu beschreiben. Dies ist besonders wichtig im Hinblick auf die CPU-Zeit-Effizienz des Gesamtmodells. Die Momentenmethode wird in diesem Kapitel kurz vorgestellt. Eine detaillierte Beschreibung findet sich in [14].

Die Momentenmethode basiert auf der Tatsache, dass jede mathematische Funktion durch ihre statistischen Momente vollständig beschrieben werden kann. Dies gilt auch für die Partikelgrößenverteilungsfunktion. Ihre statistischen Momente werden wie folgt definiert:

$${}^s M_r = \sum_{i=1}^{\infty} i^r N_i \quad r = 0, 1, \dots, \infty \quad (5.30)$$

In Gl. (5.30) bezeichnet N_i die Dichte der Partikel i mit einer Masse $m_i = i * m_1$, wobei m_1 die kleinste im Ruß auftretende Masseneinheit darstellt [15]. Bekanntermaßen besteht Ruß überwiegend aus aromatischen Strukturen, weshalb hier unter m_1 die Masse eines

Kohlenstoffatoms verstanden werden kann. Nach Gl. (5.30) gibt sM_0

$${}^sM_0 = \sum_{i=1}^{\infty} N_i = N \quad (5.31)$$

die Partikeldichte wieder und sM_1

$${}^sM_r = \sum_{i=1}^{\infty} iN_i = f_v \frac{\rho_s}{m_1} \quad (5.32)$$

den Rußvolumenanteil. Die Dichte des Rußes ρ_s kann dabei mit 1800 kg/m^3 angegeben werden. Das Verhältnis

$$\mu_1 = \frac{{}^sM_1}{{}^sM_0} \quad (5.33)$$

ist der Mittelwert der Verteilungsfunktion und beschreibt die mittlere Masse der Rußpartikel [15]. Des Weiteren ergibt sich nach Gl. (5.30):

$${}^sM_2 = \sum_{i=1}^{\infty} i^2 N_i \quad (5.34)$$

Das Moment M_2 kann zur Berechnung der Varianz der Partikelgrößenverteilungsfunktion verwendet werden:

$$\sigma^2 = \frac{M_2}{M_0} - \left(\frac{M_1}{M_0} \right)^2 \quad (5.35)$$

Bei einer logarithmischen Normalverteilung genügen Mittelwert und Varianz zur vollständigen Beschreibung der Verteilungsfunktion. Allgemein gilt jedoch [15]:

$${}^sM_r = f(\text{Partikelbildung, Koagulation, Oberflächenprozesse}) \quad (5.36)$$

Eine genaue Bestimmung der Verteilungsfunktion erfordert deswegen auch die Berücksichtigung der Schiefe der Verteilungsfunktion. Dazu kann das Moment M_3 verwendet werden, das sich nach (5.30) zu

$${}^sM_3 = \sum_{i=1}^{\infty} i^3 N_i \quad (5.37)$$

ergibt.

Die Momentenmethode besagt, dass die Lösung von unendlich vielen Momenten der Lösung der PSDF äquivalent ist. Frühere Arbeiten von Mauß et al. [179] zeigen allerdings, dass auch mit einer begrenzten Anzahl von Momenten ausreichend hohe Ergebnisgenauigkeit

erzielt werden kann. In dieser Arbeit wurde aus diesem Grund die Anzahl der Momente auf vier reduziert.

Das in diesem Kapitel beschriebene Rußmodell erfordert die Lösung von zusätzlichen Transportgleichungen im STAR-CD CFD-Code. Die Transportgleichungen für die vier Momente der Partikelgrößenverteilungsfunktion werden angegeben wie folgt [78], [99]:

$$\bar{\rho} \frac{\partial \tilde{M}_r^*}{\partial t} + \bar{\rho} \tilde{u}_j \frac{\partial \tilde{M}_r^*}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu}{\text{Pr}_t} \frac{\partial \tilde{M}_r^*}{\partial x_j} \right) + \bar{\omega}_r \quad (5.38)$$

mit

$$M_r^* = \frac{{}^s M_r}{\rho} \quad (5.39)$$

In Gl. (5.38) treten die Quellterme für Nukleation, PAK-Kondensation, Oberflächenwachstum, Oxidation und Koagulation auf, die wie folgt definiert werden [78]:

Nukleation:

$$\omega_{r,pi} = \frac{1}{2} \alpha C (2\langle i \rangle)^r \langle i \rangle^{\frac{1}{6}P} M_0^2 \quad (5.40)$$

wobei ${}^P M_0$ die PAK-Partikeldichte und $\langle i \rangle$ die mittlere Anzahl von C_2 -Gruppen in den PAKs bezeichnet. Nach [15] ist eine mittlere Anzahl von 24 Kohlenstoff-Atomen (12 C_2 -Gruppen) eine sehr gute Näherung.

Kondensation:

$$\omega_{r,con} = C^P M_0 \sum_{k=0}^{r-1} \langle j \rangle^{r-k-1/2} M_{k+2/3} \quad (5.41)$$

Die in Gl. (5.40) und (5.41) auftretende Größe C beschreibt die modifizierte Kollisionshäufigkeit:

$$C = 2.2 \left(\frac{3m_1}{4\pi\rho_s} \right)^{2/3} \left(\frac{8\pi k_B T}{m_c} \right)^{1/2} \quad (5.42)$$

Nach [15] kann die PAK-Größenverteilung mittels einer quasi-stationären Approximation modelliert werden. Danach ist es zulässig die Nukleations- und Kondensationsraten aus der PAK-Entstehungsrate R_{PAH} zu berechnen. Letztere kann wie bereits in Kapitel 5.1 beschrieben während der Flamelet-Bibliothek-Rechnung mitberechnet werden, da die PAK-Entstehung in dem detaillierten n -Heptan-Reaktionsmechanismus integriert ist. Die PAK-Entstehungsrate R_{PAH} wird somit zur Berechnung des Moments ${}^P M_0$ der PAK-Größenverteilung [15].

$$\left(\alpha C \langle i \rangle^{1/6} \right)^P M_0^2 + \left(C M_{2/3} \langle i \rangle^{-1/2} \right)^P M_0 - R_{PAH} = 0 \quad (5.43)$$

Der Term $M_{2/3}$, der in Gl. (5.43) auftritt, entspricht der totalen Oberfläche der Rußpartikel.

Oberflächenwachstum:

$$\omega_{r,sg} = R_{sg} \sum_{k=0}^{r-1} \binom{r}{k} M_{k+2/3} \Delta m^{r-k} \quad (5.44)$$

Oxidation:

$$\omega_{r,ox} = R_{ox} \sum_{k=0}^{r-1} \binom{r}{k} M_{k+2/3} \Delta m^{r-k} \quad (5.45)$$

Dabei gilt $\Delta m = 1$ für Oberflächenwachstum und für $\Delta m = -1$ Oxidation. Die Momente in Gl. (5.43 – 5.45) resultieren aus der Multiplikation der Rußpartikeldichte mit der Oberfläche der Rußpartikel bevor die Summation gemäß der Momentendefinition nach Gl. (5.30) erfolgen kann.

Abschließend kann unter der Annahme, dass die Mischungsbruch-PDF und die PDF für die skalare Dissipationsrate statistisch unabhängig sind, der Reynolds gemittelte Quellterm für die Momente berechnet werden:

$$\bar{\omega}_r = \int_0^\infty \int_0^1 \omega(Z, \chi) P(Z) P(\chi) dz d\chi \quad (5.46)$$

Dabei wird für den Mischungsbruch eine β -PDF und für die skalare Dissipationsrate eine logarithmische Normalverteilung angenommen.

Die im Kapitel 5.1 beschriebenen Rußoberflächenreaktionen sind immer noch nicht vollständig verstanden. Weiterhin führt die Annahme, dass die Momente in Gl. (5.45) durch Zellenmittelwerte ersetzt werden können, zu Ungenauigkeiten. Das erschwert ihre Modellierung. Aus diesem Grund müssen die Rußmassenquellterme, die in Gleichungen (5.41), (5.42), (5.44) und (5.45) beschrieben werden, zuerst kalibriert werden, bevor sie für die Transportgleichungen im CFD-Code weiter verwendet werden. Diese Kalibrierung ist eine herausfordernde Aufgabe. Im Laufe der Verbrennung wird Ruß gebildet, später aber teilweise wieder oxidiert. Zur Validierung eines Rußmodells für den Einsatz in der dieselmotorischen Simulation kann deswegen nur die Rußmasse im Abgas herangezogen werden. Der zeitliche Rußmassenverlauf ist allerdings nicht bekannt. Trotzdem wurde im Rahmen dieser Arbeit nicht die Rußmasse als Endprodukt des Rußmodells kalibriert, sondern die einzelnen Rußreaktionsraten, eben weil sie nicht komplett verstanden sind. Außerdem ist gerade für den Ansatz, der im Rahmen dieser Arbeit verfolgt wurde (relativ simple Chemie des Verbrennungsmodells kombiniert mit detaillierter Rußchemie), von großer Bedeutung, dass die einzelnen Prozesse kalibriert werden. Damit konnten auch etwaige Unterschiede in den kalorischen Daten berücksichtigt werden, die zu unterschiedlichen Verbrennungstemperaturen führen, die sich ihrerseits in unterschiedlichem Ausmaß auf die verschiedenen Rußreaktionen auswirken.

Bei der Kalibrierung des Rußmodells kam ein zwei-dimensionales Verbrennungsnetz (s. Abb. 5.7) verstärkt zum Einsatz. Rechnungen mit diesem Netz bieten einen deutlichen CPU-Zeit-Vorteil Sektornetzen gegenüber. Abb. 5.7 zeigt den Abriss (rote Linie) eines 2D-Netzes. Dort ist zu erkennen, dass das 2D-Netz einen Ausschnitt aus dem 3D-Netz darstellt, der durch den Einspritzstrahlkegel verläuft. Wenn die thermodynamischen Randbedingungen dem 3D-Netz gleichgestellt werden, kann somit die Komplexität eines dieselmotorischen Verbrennungsvorgangs CPU-Zeit effizient auf einer sehr einfachen Geometrie abgebildet werden.

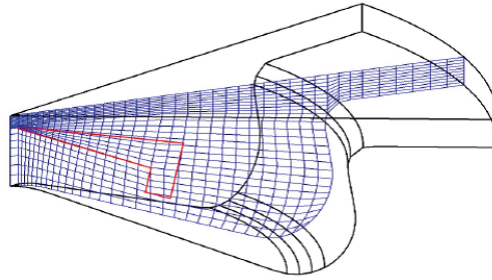


Abbildung 5.7.: Beispielhafte Darstellung eines 2D-Verbrennungsnetz [100]

Solange sich der Einspritzstrahl frei ausbreiten kann und nicht auf die Wand trifft kann mit einem 2D-Netz sogar das Verhalten des Rußmodells analysiert werden. Nachdem der Einspritzstrahl auf die Wand auftrifft wird die Gemischbildung nicht gut genug wiedergegeben wie in einem 3D-Netz. Aus diesem Grund kann mit Hilfe des 2D-Netzes nur die Rußbildungsphase kalibriert werden. Das ist trotzdem ein sehr guter Anfang, da das Maximum in dem Rußmassenverlauf hauptsächlich durch das Einspritzende bestimmt wird (eine tiefer gehende Diskussion zu diesem Thema wird im Kapitel 6 angeboten). Somit kann ausgehend vom Maximum in dem Rußmassenverlauf die Rußoxidationsphase mit vergleichsweise wenig Rechenaufwand kalibriert werden. Das Rußmodell wurde im Rahmen dieser Arbeit nur einmal kalibriert. Alle Ergebnisse, die im Kapitel 6 dargestellt werden, wurden mit demselben Parametersatz erzielt.

Die NO_x -Quellterme, die an den CFD-Code übergeben werden, werden in zwei verschiedene Subroutinen ermittelt. In der Ersten werden die β -Parameter für A, B, C und D abhängig von AGR-Rate, Druck, Oxidatorseitentemperatur und skalarer Dissipationsrate berechnet. Die AGR-Rate und die Oxidatorseitentemperatur wurden dabei mit den Verfahren bestimmt, die später im Kapitel 5.5 erläutert werden. In der zweiten werden die vier Parameter mit der Mischungsbruch-PDF integriert, um die gemittelten Werte \tilde{A} , \tilde{B} , \tilde{C} und \tilde{D} zu erhalten.

Unter Berücksichtigung von Konvektion, Diffusion, Bildung und Konsumation von NO ergibt sich die Transportgleichung für den NO-Massenbruch zu:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_{NO}) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_{NO}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} D + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_{NO}}{\partial x_j} + \tilde{\omega}_{NO} \quad (5.47)$$

Der Quellterm ω_{NO} kann allgemein folgendermaßen formuliert werden:

$$\omega_{NO} = M_{NO} \frac{d[NO]}{dt} \quad (5.48)$$

Dabei bezeichnet M_{NO} die molare Masse von NO . $\frac{d[NO]}{dt}$ kann wiederum mittels Gl. (5.19) und der Reynolds gemittelten Werten für $\tilde{A}, \tilde{B}, \tilde{C}, \tilde{D}$ bestimmt werden. Für diese gilt:

$$\tilde{K} = \int_0^1 K(Z)P(Z)dZ \quad (5.49)$$

mit $K \in \{A, B, C, D\}$. Für turbulente Flammen ergibt sich schließlich der NO -Quellterm zu:

$$\tilde{S}_{NO} = \int_0^1 S_{NO}P(Z)dZ = \tilde{A} - [NO]\tilde{B} + \frac{\tilde{A}\tilde{C}}{[NO] + \frac{\tilde{C}}{D}} - [NO]^2 \frac{\tilde{B}}{[NO] + \frac{\tilde{C}}{D}} \quad (5.50)$$

5.4. Acetylen-Feedback

Das FLOS-Modell hat zahlreiche Vorteile, die bereits in diesem Kapitel beschrieben wurden. Einer seiner Nachteile ist allerdings, dass stationäre Effekte nur bedingt dargestellt werden können. Insbesondere existieren Spezies, die in der Realität sehr schnell weiter reagieren und somit schnell aufgebraucht werden. In der stationären Flamelet-Lösung finden sie allerdings nicht bei jedem Mischungsbruch einen Reaktionspartner. Acetylen ist eine dieser Spezies. Oberflächenwachstum findet grundsätzlich nur in Anwesenheit von Acetylen statt (s. Kapitel 3). Folglich darf auch kein Oberflächenwachstum mehr stattfinden, wenn der Kraftstoff und alle Zwischenprodukte der Verbrennung verbraucht wurden. In einem Verbrennungsmotor oxidieren Kraftstoff und Verbrennungszwischenprodukte sehr schnell. Bei niedrigen Verbrennungstemperaturen, wie z. B. bei Hoch-AGR-Verbrennung, ist das Oberflächenwachstum eine der Hauptquellen des Acetylenverbrauchs. Bei stationären Flamelet-Rechnungen kann diese Tatsache nicht in Betracht gezogen werden, da das Oberflächenwachstum von der lokalen Rußoberfläche abhängt, die während der Flamelet-Rechnung nicht bekannt ist.

In dem Fall, dass Oberflächenwachstum tatsächlich eine der Hauptquellen des Acetylenverbrauchs ist, wird die Acetylenkonzentration während der Flamelet-Rechnung signifikant überschätzt. Aus diesem Grund ist es notwendig, die Oberflächenwachstumsraten im Laufe der CFD-Rechnung unter Berücksichtigung der lokalen Acetylenkonzentration zu korrigieren. Allerdings ist Acetylen, welches in dieser Arbeit zur Bestimmung des Brennverlaufs eingesetzt wurde, keine der 7 Spezies, die das 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodell berücksichtigt. Angesichts der verfügbaren Spezies kann die lokale Acetylen-Konzentration nur anhand der Kraftstoff-, CO - und H_2 -Konzentrationen geschätzt werden. Um den Einfluss des Oberflächenwachstums auf die Acetylenkonzentration

zu abzuschätzen muss deswegen folgende Limitierung des Quellterms für Oberflächenwachstum eingeführt werden:

$$l_{sg} = \frac{Y_{fuel} + Y_{CO} \frac{w_C}{w_{CO}} + Y_{H_2}}{Z} \quad (5.51)$$

Dieser Ausdruck vergleicht die lokale Konzentration von Kohlenstoffatomen, die noch nicht zu CO_2 oxidiert sind, mit der lokalen Gesamtkohlenstoffkonzentration. Damit wird l_{sg} gleich 1, wenn noch kein CO_2 entstanden ist und geht gegen 0, sobald die Kohlenstoffatome komplett oxidiert wurden. Der korrigierte Quellterm für Oberflächenwachstum lautet damit:

$$\omega_{r,sg} = l_{sg} R_{sg} \sum_{k=0}^{r-1} \binom{r}{k} M_{k+2/3} \Delta m^{r-k} \quad (5.52)$$

Alle Ergebnisse, die im Kapitel 6 dargestellt werden, wurden unter Verwendung des Acetylen-Feedback-Ansatzes generiert.

5.5. Temperatur-Profil-Ansatz (TP-Ansatz)

Die Input-Parameter für die Ruß- und NO_x -Quellterm-Bibliotheken sind Druck, Oxidatorseitentemperatur, AGR-Rate, Mischungsbruch und Mischungsbruchvarianz sowie skalare Dissipationsrate. Diese bilden in diesem Sinne die Schnittstelle zwischen den beiden Modellen und dem CFD-Code. In diesem Unterkapitel wird erläutert, wie die Konsistenz zwischen den Modellen und dem CFD-Code sichergestellt wird, so dass die lokalen Quellterme aus der jeweiligen Bibliothek korrekt berechnet werden können. Die Herausforderung an dieser Stelle besteht darin, dass Bibliothek-AGR-Rate und Oxidatorseitentemperatur im CFD-Code nicht direkt vorliegen. Diese müssen für den ursprünglichen Zustand – vor der Verbrennung im Flamelet – rückberechnet werden sollen, da sie von der Flamelet-Bibliothek als Inputparameter benötigt werden. In anderen Worten muss ausgehend von den in der CFD-Zelle herrschenden thermodynamischen Bedingungen der Mischungs- bzw. Verbrennungsvorgang zwischen Oxidator und Kraftstoff rückgängig gemacht werden.

Druck, Mischungsbruch und Mischungsbruchvarianz werden dagegen direkt vom CFD-Code berechnet. Die restlichen Bibliothekparameter müssen explizit bestimmt werden. Die skalare Dissipationsrate lässt sich mittels Gl. (3.30) einfach bestimmen. Die Restgasverteilung im Brennraum wird als homogen angenommen (s. Kapitel 6), weshalb auch die AGR-Rate vor Verbrennungsbeginn gleich in jeder CFD-Zelle ist. Zur Bestimmung dieser AGR-Rate wurde in früheren Arbeiten [179] von dem konstanten Massenbruchverhältnis zwischen CO_2 und H_2O Gebrauch gemacht, das in der Bibliothek auf der Oxidatorseite vorliegt (s. Kapitel 5.2). Somit konnte die Bibliothek-AGR-Rate einmal für alle Zellen berechnet werden, indem der CO_2 -Massenbruch, mit dem der Brennraum initialisiert wird, an das Rußmodell übergeben wird:

$$Y_{CO_2} \rightarrow X_{CO_2} \rightarrow X_{H_2O} \rightarrow X_{AGR} = X_{CO_2} + X_{H_2O} \quad (5.53)$$

Für diese Arbeit ist diese Vorgehensweise allerdings nicht zulässig, da *n*-Heptan und der Modelldieselmotorkraftstoff, der vom Verbrennungsmodell verwendet wird, nicht dasselbe C/H-Verhältnis aufweisen. Dementsprechend sind auch die jeweiligen Molen- bzw. Massenverhältnisse zwischen H_2O und CO_2 nicht gleich. Da Rußbildungs- und -oxidation maßgeblich von der gesamten Restgasmasse beeinflusst wird, wurde hier eine neue Formulierung des Restgasanteils vorgeschlagen:

$$EGR_{lib} = Y_{CO_2} + Y_{H_2O} + \frac{0.767}{0.233} \left(Y_{CO_2} \frac{2w_O}{w_{CO_2}} + Y_{H_2O} \frac{w_O}{w_{H_2O}} \right) Y_{CO} + Y_{H_2} + \frac{0.767}{0.233} Y_{CO} \frac{O}{CO} \quad (5.54)$$

Der dritte Term auf der rechten Seite in Gl. (5.54) beschreibt den N_2 -Massenbruch, der zu dem Sauerstoff korrespondiert, der bereits zu CO_2 und H_2O reagiert ist. Der letzte Term korrespondiert dagegen zum Sauerstoff, der zu CO reagiert ist. Diese Formulierung stellt damit sicher, dass alle Restgaskomponenten berücksichtigt werden. Damit ist sie der AGR-Konvention der Flamelet-Bibliothek am nächsten.

Die Berechnung der Oxidatorseitentemperatur ist dagegen eine etwas anspruchsvollere Aufgabe. Auf Basis der chemischen Zusammensetzung und der thermodynamischen Bedingungen im Gleichgewicht müssen die Anfangsbedingungen in der Zelle rekonstruiert werden. Das Hauptziel hier ist, das Flamelet aus der Flamelet-Bibliothek auszuwählen, das genau der mittleren Temperatur und dem mittleren Mischungsbruch der Zelle entspricht. Dies ist entscheidend, da diese Größen dominanten Einfluß auf die Ruß- und NO_x -Reaktionen haben. Sie sind deswegen absolut ausschlaggebend für die korrekte Berechnung der Rußquellterme, da diese eine Funktion von Temperatur und Spezieskonzentrationen sind (s. Gl. 5.9 – 5.13) und die Letzteren explizit vom Mischungsbruch im Flamelet-Raum abhängen. In früheren Arbeiten mit dem Rußmodell von Mauß [15] wurde die Rekonstruktion der Anfangsbedingungen mittels einer Enthalpieextrapolation im Mischungsbruchraum durchgeführt. Die Enthalpieextrapolation bestand aus einigen Schritten, die im Folgenden kurz beschrieben werden.

Die Enthalpie im Mischungsbruchraum in einem Flamelet wird angegeben durch:

$$h_{fl}(Z) = h_{ox,fl} + (h_{fuel,fl} - h_{ox,fl})Z \quad (5.55)$$

mit $h_{ox,fl} = h(Z = 0)$ und $h_{fuel,fl} = h(Z = 1)$.

Da die chemische Zusammensetzung und die mittlere Temperatur in der Zelle bekannt sind, kann daraus die totale Enthalpie in der Zelle berechnet werden:

$$h_{cell} = \sum_{i=1}^7 \tilde{y}_i h_i \quad (5.56)$$

mit h_i die Enthalpie der i^{te} Spezies. Somit kann bei einer gegebenen Kraftstoffenthalpie die Enthalpie auf der Oxidatorseite bestimmt werden:

$$h_{ox,fl} = \frac{h_{cell}(Z) - h_{fuel}Z}{1 - Z} \quad (5.57)$$

Da die chemische Zusammensetzung auf der Oxidatorseite bekannt ist (Luft und Restgas) kann im nächsten Schritt auch die Oxidatorseitentemperatur berechnet werden. Das ganze Prozedere zur Bestimmung der Oxidatorseitentemperatur ist in Abb. 5.8 schematisch dargestellt.

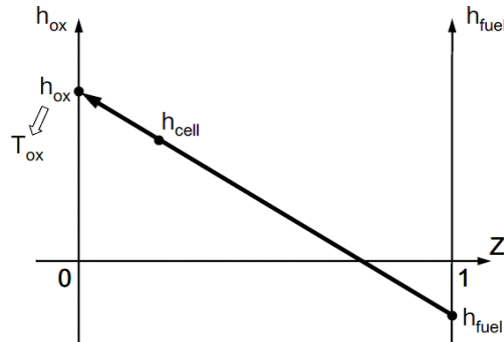


Abbildung 5.8.: Enthalpieextrapolation im Mischungsbruchraum

Die Ruß- und NO_x -Bibliothek decken nur einen begrenzten T_{ox} -Bereich (s. Tab. 5.1). Solange die Enthalpieextrapolation im Mischungsbruch eine Oxidatorseitentemperatur ergibt, die in diesem Bereich liegt, können die Ruß- und NO_x -Quellterme berechnet werden. Wenn die berechnete Oxidatorseitentemperatur niedriger ist als die niedrigste tabellierte Oxidatorseitentemperatur werden die Ruß- und NO_x -Quellterme auf 0 gesetzt. Dies bedeutet, dass die Ruß- bzw. NO_x -Prozesse einfrieren. Damit bestimmt die Oxidatorseitentemperatur die Zeit, in der Ruß- und NO_x -Reaktionen stattfinden.

Die Enthalpieextrapolation im Mischungsbruchraum (s. Abb. 5.8) liefert genaue Oxidatorseitentemperaturen, solange eine wichtige Voraussetzung erfüllt ist: die totale Enthalpie in der CFD-Zelle (s. Gl. 5.56) ist genau gleich der totalen Enthalpie bei dem mittleren Zellenmischungsbruch im Flamelet. Das Verbrennungsmodell, das im Rahmen dieser Arbeit zum Einsatz kam, berücksichtigt nur 7 Spezies, während die Ruß- und NO_x -Chemie durch einen detaillierten Reaktionsmechanismus mit 121 Spezies beschrieben wurden [144]. Außerdem unterscheiden sich die kalorischen Eigenschaften des n -Heptans von diesen des Modellkraftstoffs ($\text{C}_{12}\text{H}_{26}$), das für das 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodell verwendet wird. Aus diesem Grund ist die mittlere Zellentemperatur nicht gleich der Flamelettemperatur bei dem mittleren Mischungsbruch. Dies macht eine korrekte Berechnung der Rußquellterme nach Gl. (5.9 – 5.13) unmöglich. Diese Diskrepanzen werden insbesondere in der Expansionsphase sichtbar. Abb. 5.9 zeigt die totale Enthalpie aller CFD-Zellen aufgetragen über den mittleren Mischungsbruch bei 720° KW (3°KW nach Spritzbeginn) und bei 750°KW (33°KW nach Spritzbeginn). Die einzelnen Punkte repräsentieren die CFD-Zellen und sind mit der jeweiligen mittleren Zellentemperatur eingefärbt. Mit ganz

wenigen Ausnahmen liegen die Punkte im Falle von 720°KW auf der Verbindungslinie zwischen h_{fuel} und h_{ox} (für eine bestimmte Oxidatorseitentemperatur). Auf der rechten Seite von Abb. 5.9 ist das nicht mehr der Fall. In vielen Zellen liefert hier die Enthalpieextrapolation eine so niedrige Oxidatorseitentemperatur, dass die Rußreaktionen einfrieren, obwohl die mittlere Zellentemperatur dafür noch hoch genug ist.

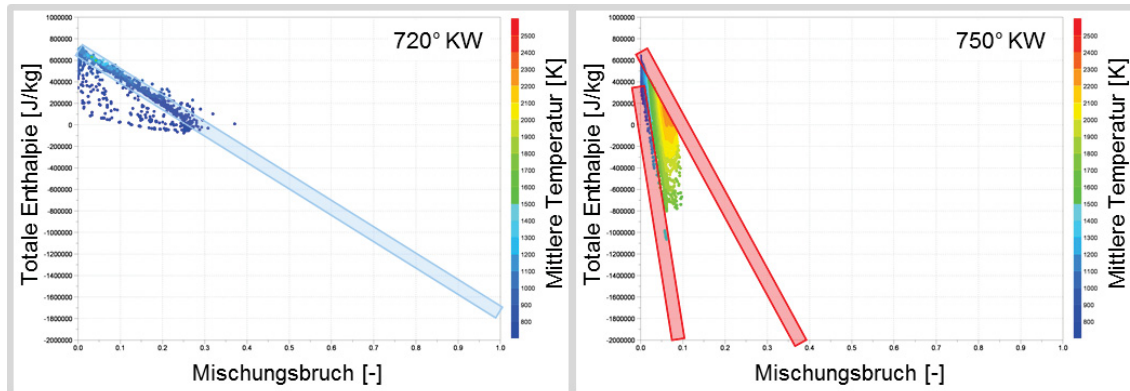


Abbildung 5.9.: Totale Enthalpie und mittlere Temperatur der CFD-Zellen (Spritzbeginn 717°KW)

Einer der Schwerpunkte dieser Arbeit war die Entwicklung einer neuen Berechnungsmethode für die Oxidatorseitentemperatur, die die Konformität hinsichtlich mittleren Mischungsbruchs und mittlerer Temperatur zwischen CFD-Code und Flameletbibliothek gewährleistet. Das Hauptziel des neuen Ansatzes ist deswegen, das Flamelet zu finden, das die entsprechende Kombination aus Mischungsbruch und Temperatur für die in der CFD-Zelle gegebenen Druck, AGR-Rate und skalare Dissipationsrate beinhaltet. Auf dieser Art und Weise kann auch die richtige Oxidatorseitentemperatur bestimmt werden, die letztendlich die korrekte Berechnung der chemischen Quellterme sicherstellen wird. Der Entwicklungsprozess des neuen Ansatzes bestand aus einigen Schritten, die im Folgenden beschrieben werden sollen. Zuerst wurde eine detaillierte Analyse der Temperaturen im Mischungsbruchraum für verschiedene Flamelets durchgeführt. Die Temperaturprofile, die aus den Flameletrechnungen resultieren, hängen von AGR-Rate, Druck, skalarer Dissipationsrate und Oxidatorseitentemperatur ab (s. Tab. 5.1). Diese Abhängigkeiten wurden weiter analysiert mit dem Ziel, eine mögliche Parametrisierung der Profile als mathematische Funktionen von AGR-Rate, Druck, skalarer Dissipationsrate und Oxidatorseitentemperatur vorzunehmen. Der neue Ansatz wurde deswegen "Temperatur-Profil-Ansatz" oder kurz TP-Ansatz genannt (s. Abb. 5.10).

Die Analyse der Temperaturprofile aus der Flameletbibliothek ergab folgendes:

- der AGR-Einfluss auf das Temperaturprofil kann nicht mit vertretbarem Aufwand parametrisiert werden, weswegen ein Referenzprofil für jede AGR-Rate aus der Flameletbibliothek notwendig ist (s. Tab. 5.1);
- in dem Stöchiometrie nahen Bereich wurde eine Druckabhängigkeit der Temperaturprofile erkannt, die durch trigonometrische Funktionen modelliert werden kann;

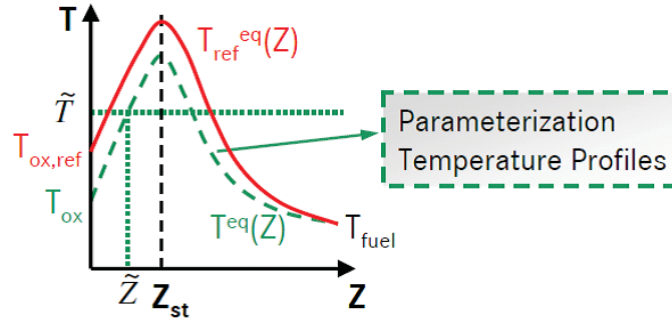


Abbildung 5.10.: Grundidee des "Temperatur-Profil-Ansatzes"

- die Abhängigkeit der Temperaturprofile von der Oxidatorseitentemperatur kann durch simple lineare Funktionen modelliert werden;
- in dem für dieses CFD-Paket relevanten Bereich hat die skalare Dissipationsrate einen vernachlässigbaren Einfluß auf die Temperaturprofile.

Die Parametrisierungsstudie wurde damit abgeschlossen, dass mathematische Korrelationen definiert wurden, die die Ableitung von beliebigen Temperaturprofilen aus einem Referenzprofil beschreiben (s. Gl. 5.58 – 5.60). Als Referenzprofil wurde das Temperaturprofil gewählt, das sich bei einer Oxidatorseitentemperatur von $1000K$, einem Druck von $50bar$ und einer skalaren Dissipationsrate von $10s^{-1}$ ergibt.

$$\Delta T(Z, p) = A_1 \sin\left(\frac{\pi(Z - Z_{low})}{Z_{high} - Z_{low}}\right) \frac{p - A_2}{A_3} \quad (5.58)$$

$$\Delta T_{200}(Z, p) = B_1 - B_2 \frac{Z}{Z_{st,EGR}}, \text{ wenn } Z < Z_{st,EGR} \quad (5.59)$$

$$\Delta T_{200}(Z, p) = B_3 - B_3 \frac{Z - Z_{st,EGR}}{B_5 Z_{st,EGR}}, \text{ wenn } Z > Z_{st,EGR} \quad (5.60)$$

mit $Z_{high} = a_1 Z_{st,EGR}$ und $Z_{low} = a_2 Z_{st,EGR}$ und $Z_{st,EGR}$ der stöchiometrische Mischungsbruch bei gegebener AGR-Rate. $\Delta T_{200}(Z)$ bezeichnet die Differenz der mittleren Temperatur bei gegebenem Mischungsbruch, wenn die Differenz der Oxidatorseitentemperatur $200K$ beträgt. Die beste Approximation der Temperaturprofile wurde mit dem Parametersatz erreicht, der in Tabelle 5.2 zusammengefasst ist.

a_1	a_2	A_1	A_2	A_3	B_1	B_2	B_3	B_4	B_5
0.6	1.4	40	50	25 (p < 50 bar) 75 (p > 50 bar)	200	80	120	70	3.0

Tabelle 5.2.: Konstanten zur Beschreibung der Temperaturprofile

Für die korrekte Berechnung der Ruß- und NO_x -Quellterme ist es von entscheidender Bedeutung, dass die gemittelte Zellentemperatur gleich der Temperatur in dem Flamelet-Temperatur-Profil bei dem Mischungsbruch, der dem mittleren Zellenmischungsbruch gleicht.

Aus diesem Grund ist es notwendig, das Temperaturprofil, das aus dem Referenzprofil abgeleitet wurde, mit der Mischungsbruch-PDF zu integrieren:

$$\tilde{T}_{temp.prof.} = \int T_{temp.prof.}(Z)P(Z)dZ \quad (5.61)$$

Die resultierende gemittelte Temperatur muss im nächsten Schritt mit der gemittelten Zellentemperatur verglichen werden. Abhängig von der Differenz kann dann die Oxidatorseitentemperatur nach Gl. (5.59 – 5.60) bestimmt werden, die das gewünschte Ergebnis der gesamten Berechnungskette darstellt.

Der TP-Ansatz stellt sicher, dass das Flamelet, das zu dem Paar $\{\tilde{Z}_{CFD}, \tilde{T}_{CFD}\}$ korrespondiert, für die Berechnung der Rußquellterme herangezogen wird. Durch den direkten Vergleich zwischen gemittelter Zellentemperatur und der gemittelten Temperatur, die aus Gl. (5.61) resultiert, werden auch Wärmeübergangseffekte auf der Oxidatorseitentemperatur mitberücksichtigt. Auch unter Verwendung des TP-Ansatzes ist es natürlich möglich, dass die berechnete Oxidatorseitentemperatur niedriger als die niedrigste in der Bibliothek tabellierte Temperatur ist. Deshalb ist es notwendig, ein Kriterium für das Einfrieren der Ruß- und NO_x -Reaktionen einzuführen. Dieses Kriterium muss insbesondere die mittlere Zellentemperatur korrekt berücksichtigen (s. Abb. 5.10). Eine weitere Analyse der Flameletlösungen ergab, dass Flamelets, die eine stöchiometrische Temperatur von 1900 K oder weniger erreichen, vernachlässigbar kleine Quellterme im gesamten Mischungsbruchraum aufweisen. Unter der Annahme einer minimalen stöchiometrischen Temperatur von 1900K für signifikant große Quellterme kann nach Gl. (5.61) eine minimale Oxidatorseitentemperatur für gegebene AGR-Rate berechnet werden. Die Ruß- und NO_x -Quellterme bei dieser minimalen Oxidatorseitentemperatur wurden auf 0 gesetzt. Für die Quellterme für Oxidatorseitentemperaturen zwischen der minimalen und der niedrigsten tabellierten Oxidatorseitentemperatur wurde lineare Interpolation angewandt.

6. Validierung der Modelle

Für die Validierung des Ruß- und NO_x-Modells, die im Kapitel 5 vorgestellt wurden, wurden verbrennungsmotorische Messungen herangezogen, die an einem Einzylinder - Forschungsaggregat durchgeführt wurden. Der zugrunde liegende Vollmotor ist der OM651 von Mercedes-Benz. Die wichtigsten Merkmale der Motorspezifikation sind in Tab. (6.1) zusammengefasst:

Motorspezifikation	
Bohrung [mm]	83
Hub [mm]	99
Kompressionsverhältnis (geom.)	16.2
Anzahl Ventile	4
Anzahl Düsenlöcher	7

Tabelle 6.1.: Motorspezifikation OM651

6.1. Messdaten

Bei der Auswahl der Messdaten für die Validierung des Modells wurde im Rahmen dieser Arbeit ein erheblicher Aufwand getrieben. Schließlich ist die Messqualität entscheidend für die Genauigkeit der Kalibrierung des Modells, die wiederum ausschlaggebend für die Vorhersagefähigkeit des Modells ist. Aus diesem Grund wurden die zur Verfügung stehenden Messungen nach folgenden Kriterien bewertet:

- Korrelation zwischen gemessener Luftmasse, gemessener Kraftstoffmasse und aus dem Abgas berechnetem λ
- Stabilität der Verbrennung bzw. Streuung der einzelnen Verbrennungszyklen
- Energiebilanz

Die Luft- bzw. Kraftstoffmasse sind zwei der wichtigsten Eingangsgrößen für die Verbrennungsrechnung. Während die Kraftstoffmassenmessung sehr genau ist, kann die Luftmas-

senmessung auch unter idealen Prüfstandsbedingungen durchaus Ungenauigkeiten aufweisen. Die Berechnung des Luftverhältnisses aus den Anteilen der verschiedenen Abgaskomponenten (CO, HC, CO₂ und O₂) ist dagegen ziemlich genau. Die Gleichung, mit der die Genauigkeit der Luftmassenmessung plausibilisiert werden kann, kann wie folgt angegeben werden:

$$m_B * L_{st} * \lambda_{Abgas} = m_L \quad (6.1)$$

Für die Validierung des Modells wurden nur Messungen herangezogen, bei denen die Luftmasse mit einer Toleranz von $\pm 2\%$ dem Produkt auf der linken Seite der Gl. 6.1 entsprach.

Bei der Brennverfahrenentwicklung geht man oft an die Grenzen der Verbrennungsstabilität. Zur Reduktion von NO_x-Rohemissionen kann beispielsweise der Spritzbeginn so spät sein, dass sich Zündverzögerungen, Verbrennungsschwerpunktlage usw. von Zyklus zu Zyklus deutlich unterscheiden. Das CFD-Paket, das im Rahmen dieser Arbeit zum Einsatz kommt, kann allerdings Instabilitäten der Verbrennung nicht berücksichtigen. Aus diesem Grund wurden nur Messungen verwendet, bei denen die Zyklus-zu-Zyklus-Schwankungen gering waren. Die maximale Standardabweichung des indizierten Mitteldrucks betrug dabei 0.2 bar.

Die Qualität der Messung des Zylinderinnendrucks - der sogenannten Indizierung - ist ausschlaggebend für die Bewertung der CFD-Ergebnisse. Anhand der Indizierung kann der Brennverlauf für den jeweiligen Betriebspunkt berechnet werden. Der Brennverlauf liefert wichtige Kenngrößen wie die Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte (H10, H50, H90), die bei einer soliden Validierungsgrundlage in Experiment und Simulation möglichst gleich sein sollen. Aus diesem Grund muss das Indizierbild mittels Brennverlaufsanalyse plausibilisiert werden. Die Energiebilanz bei einem Betriebspunkt, der zur Validierung herangezogen wird, soll zwischen 98% und 102% liegen. Werte außerhalb dieser Toleranz deuten auf eine Inkonsistenz der Mess- bzw. Indizierdaten.

Eines der Hauptziele, die in dieser Arbeit verfolgt wurden, ist allgemein gültige Emissionsmodelle zu entwickeln. Das bedeutet, dass die Modelle für unterschiedliche Motoren und unterschiedliche Brennverfahren gleich gute Ergebnisse liefern sollen. Aus diesem Grund wurden speziell für die Validierung Messdaten zur Verfügung gestellt, die die motorischen Phänomene aufweisen, die mit einem Rußmodell simuliert werden sollen.

Erstens sollen die Modelle in der Lage sein, korrekt auf eine Erhöhung der AGR-Rate reagieren. Wie bereits im Kapitel 2 erläutert, steigen die Rußemissionen mit steigender AGR-Rate. Umgekehrt verhalten sich die NO_x-Emissionen (s. Abb. 6.1). Bei den AGR-Variationen, die in dieser Arbeit untersucht wurden (s. Tab 6.2), wurde auf eine Voreinspritzung verzichtet, um die physikalischen von den chemischen Effekte möglichst zu separieren. Des Weiteren wurden diese Variationen bei konstantem Spritzbeginn durchgeführt, so dass das Auftreffverhalten des Einspritzstrahls und respektive die Luft-Kraftstoffmischung identisch für alle AGR-Raten sind. Die jeweiligen Ladedrücke waren im Gegensatz zu den Luftverhältnissen λ konstant, womit stabile thermodynamische Randbedingungen für die AGR-Variationen geschaffen wurden.

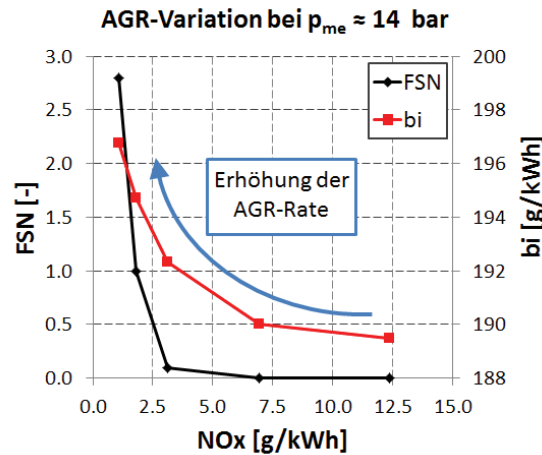


Abbildung 6.1.: Einfluss der AGR-Rate auf Ruß (FSN), NO_x und Verbrauch (b_i) für Validierungspunkte 5 - 9 (s. Tab. 6.2)

Zweitens sollen die Modelle das motorische Verhalten bei einer Spritzbeginnvariation korrekt abbilden. Wenn der Spritzbeginn nach spät verstellt wird, sinken die NO_x -Emissionen, da die Verbrennungstemperaturen aufgrund der späteren Verbrennungslage sinken. Die Rußemissionen zeigen dabei meistens ein interessantes, wenn auch schwierig zu simulierendes Verhalten. Anfangs steigen sie mit einer Verstellung des Spritzbeginns nach spät, da die Zeit für die Rußoxidation geringer wird. Ab einer bestimmten Verbrennungslage sinken die Verbrennungstemperaturen aber so deutlich, dass die Rußbildung unterdrückt wird. Folglich sinkt die Rußmasse im Abgas wieder. Dieses Verhalten ist in Abb. 6.2 dargestellt. Die Spritzbeginnvariation, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurde, wurde ohne Voreinspritzung und bei konstanter AGR-Rate durchgeführt, damit auch hier die motorischen Phänomene getrennt betrachtet werden können.

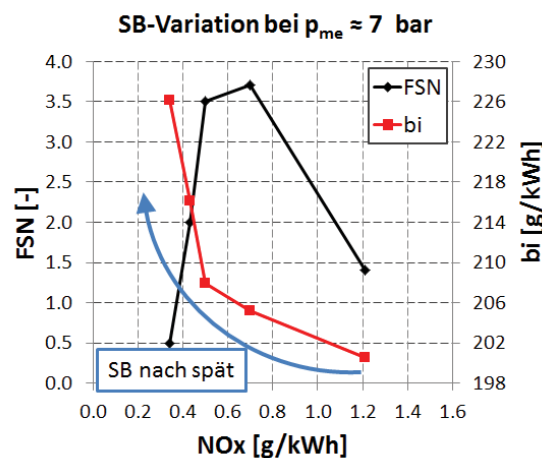


Abbildung 6.2.: Einfluss des Spritzbeginns auf Ruß (FSN), NO_x und Verbrauch (b_i) für Validierungspunkte 10 - 14 (s. Tab. 6.2)

Aus Geräuschgründen wird bei modernen Dieselmotoren mindestens eine Voreinspritzung eingesetzt. Sie senkt zwar die Zylinderdruckgradienten, wirkt sich aber gleichzeitig negativ auf die Rußemissionen aus. Mit einer günstig gewählten Dauer der hydraulischen Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung kann dieser Rußnachteil teilweise kompensiert werden. Dies ist in Abb. 6.3 gezeigt.

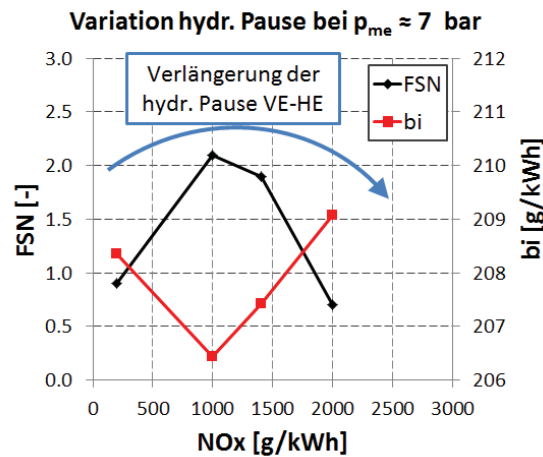


Abbildung 6.3.: Einfluss der Dauer der hydraulischen Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung auf Ruß (FSN) und Verbrauch (b_i) für Validierungspunkte 15 - 18 (s. Tab. 6.2)

Das Rußmodell und das NO_x -Modell sollen in der Lage sein, die verbrennungsmotorischen Phänomene, die in den Abbildungen 6.1, 6.2 und 6.3 dargestellt wurden, korrekt abzubilden. Vor diesem Hintergrund wurde eine Validierungsmatrix von insgesamt 18 Betriebspunkten aufgestellt, die in Tab. (6.2) zu sehen sind. Die Betriebsparameter sind dabei nicht unbedingt realistisch. Beispielsweise wurde die Spritzbeginnvariation bei einem globalen Luftverhältnis von 1.27 durchgeführt, das zu niedrig für den Realbetrieb ist. Die Betriebsparameter wurden so gewählt, damit die verbrennungsmotorischen Phänomene, die in diesem Kapitel beschrieben wurden, möglichst ausgeprägt in der Messung dargestellt werden können.

6.2. Kriterien zur Bewertung der Verbrennungssimulation

Die in dieser Arbeit entwickelten Rohemissionsmodelle sind Post-Flame-Modelle. Sie sind demzufolge auf korrekte Abbildung von Einspritzung, Mischung und Verbrennung angewiesen. Im Folgenden werden einige Voraussetzungen detailliert erläutert, die für eine zuverlässige Rohemissionssimulation erfüllt werden müssen.

6.2.1. CFD-Setup

Erstens muss das CFD-Setup die Motorgegebenheiten möglichst genau wiedergeben. Dazu gehört beispielsweise die korrekte Berechnung des sogenannten thermodynamischen Verdichtungsverhältnisses. Das geometrische Verdichtungsverhältnis ergibt sich aus den

	Validierungspunkt	Drehzahl [1/min]	Motorlast p_{me} [bar]	Spritzbeginn [*KW n. OT]	AGR [%]	λ [-]	FSN
AGR-Variation	1	2000	7,26	0,0	0,6	1,97	0,0
	2	2000	7,19	0,0	9,8	1,77	0,0
	3	2000	7,07	0,0	19,2	1,55	0,1
	4	2000	6,50	0,0	32,8	1,27	1,3
	5	2000	14,58	-3,0	0,6	1,89	0,0
	6	2000	14,52	-3,0	9,9	1,70	0,0
	7	2000	14,31	-3,0	18,4	1,51	0,1
	8	2000	14,13	-3,0	22,7	1,42	1,0
	9	2000	13,82	-3,0	26,6	1,33	2,8
SB-Variation	10	2000	7,29	-11,5	32,0	1,27	1,4
	11	2000	7,16	-7,5	32,0	1,27	3,7
	12	2000	7,00	-4,0	32,0	1,26	3,5
	13	2000	6,78	0,0	32,0	1,27	2,0
	14	2000	6,43	2,0	32,0	1,27	0,5
Variation hydr. Pause	15	2000	6,94	-22,3 ~ 2000 μ s hydr. Pause	28,0	1,37	0,7
	16	2000	6,99	-16,0 ~ 1400 μ s hydr. Pause	28,1	1,38	1,9
	17	2000	7,00	-12,0 ~ 1000 μ s hydr. Pause	28,1	1,38	2,1
	18	2000	6,98	-0,3 ~ 200 μ s hydr. Pause	27,8	1,37	0,9

Tabelle 6.2.: Betriebspunkte zur Validierung der Rohemissionsmodelle

nominellen Motorabmessungen. Durch statische und dynamische Deformationen im befeuerten Betrieb ändern sich allerdings diese Abmessungen deutlich. Außerdem weist die Zylinderkopf- und Kolbengeometrie oftmals sogenannte Todvolumina (z. B. Ventiltaschen), die aus Vernetzungsgründen nicht immer detailliert abgebildet werden können. Eine Ausnahme davon sind die Vollzylindernetze, die später im Kapitel 6.6.3 näher beschrieben werden. Aus diesen Gründen muss das CFD-Netz nicht das geometrische, sondern das thermodynamische Verdichtungsverhältnis aufweisen. Dieses wird mittels Brennverlaufsanalyse ermittelt. Das korrekte thermodynamische Verdichtungsverhältnis ergibt einen Brennverlauf, der vor Beginn der Einspritzung nahezu gleich 0 ist. Der Einfluss des Verdichtungsverhältnisses als Eingangsgröße für die Brennverlaufsanalyse ist in Abb. 6.4 beispielhaft dargestellt. Dabei wird die statische Pleuelstauchung mit $dz/dp = 0.8 \mu\text{m}/\text{bar}$ angegeben, die ausschließlich vom Druck im Zylinder abhängt. Diese statische Pleueldeformation kann auch im CFD-Netz berücksichtigt werden.

Das thermodynamische Verdichtungsverhältnis ist niedriger als das geometrische. Folglich muss das CFD-Netz im OT ein höheres Volumen aufweisen als das Volumen, das sich im OT ohne Bauteildeformationen ergeben würde. Diese Vergrößerung muss sinnvoll modelliert werden, so dass die strömungsmechanischen Vorgänge im Zylinder weiterhin korrekt abgebildet werden können. Dazu existieren zwei Optionen: eine Vergrößerung der Quetschspalthöhe oder eine Vergrößerung des Feuerstegs. Eine Vergrößerung der Quetschspalthöhe ist nur bei strenger Einhaltung der tatsächlichen geometrischen Gegebenheiten zulässig. Das ist beispielsweise der Fall, wenn die Motorgeometrie Ventiltaschen oder ähnliche Todvolumina aufweist. Das Ausmaß der Vergrößerung wird durch die tatsächliche Größe dieser Todvolumina vorgegeben. Wenn die Quetschspalthöhe zu groß gewählt wird, wird die für die Luftausnutzung sehr wichtige Quetschspaltströmung (s. Kapitel 2) nicht exakt abge-

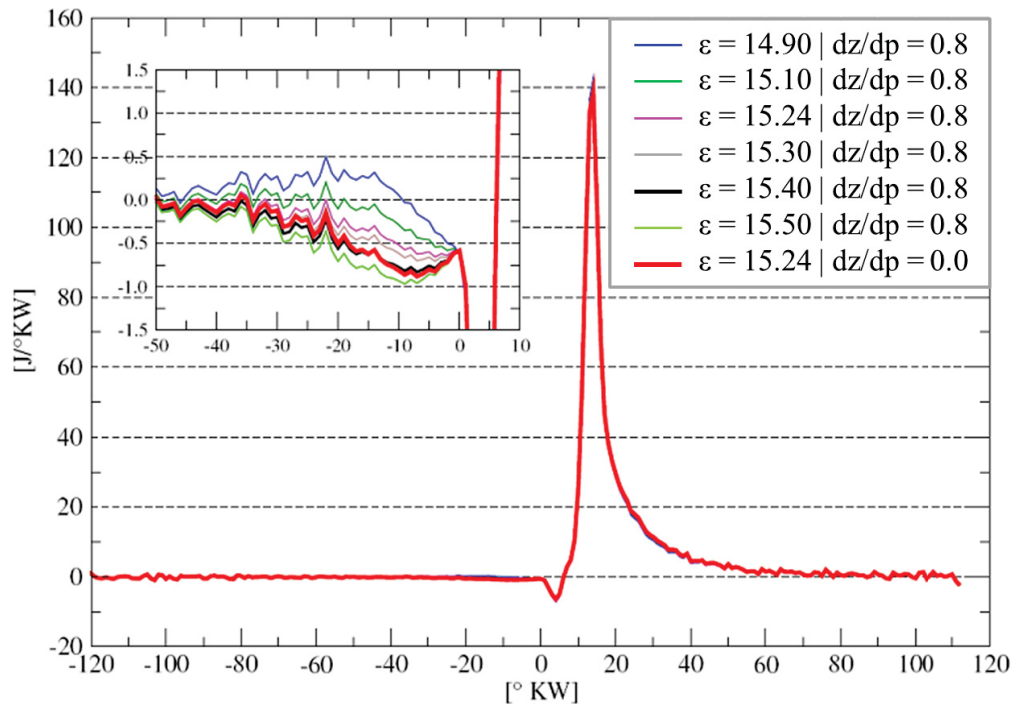


Abbildung 6.4.: Einfluss des thermodynamischen Verdichtungsverhältnisses auf den Brennverlauf

bildet. Das liegt daran, dass in diesem Fall der Saugeffekt bei der Kolbenabwärtsbewegung vermindert wird. Dies beeinträchtigt die Mischungsintensität und die Kraftstoffumsetzung im Quetschpalt. Eine Vergrößerung des Feuerstegs scheint aus diesen Gründen eine sehr attraktive Möglichkeit zur Vergrößerung des Verdichtungsverhältnisses zu sein. Allerdings können hier schnell numerische Instabilitäten oder Ungenauigkeiten auftreten. Diese sind in Abb. 6.5 beispielhaft dargestellt.

Der Druckausgleich zwischen Kolbenmulde und Feuersteg kann aufgrund des kleinen Querschnitts des Ringspalts nur langsam erfolgen. Daraus können numerische Instabilitäten resultieren. Auch bei einer stabilen Rechnung stellt dieser Druckausgleich numerische Herausforderungen. Die Strömungsgeschwindigkeiten in den Feuerstegzellen steigen so deutlich an, dass sich ein unphysikalischer Wirbel im Quetschpalt bilden kann (s. Abb. 6.5). Er bildet eine Art Stauzone im Quetschpalt, die die Kraftstoff-Luft-Mischung verhindert und somit zu einer schlechten Kraftstoffumsetzung und Erhöhung der Rußemissionen führt (s. Abb. 6.6).

Neben der dem thermodynamischen Verdichtungsverhältnis entsprechenden Gestaltung des CFD-Netzes sind die Wandtemperaturen von entscheidender Bedeutung für die korrekte Berechnung von Kompressionsenddruck und -temperatur. Letztere sind sehr wichtige Voraussetzungen für die nächsten Schritte in der motorischen Simulation: Einspritzung und Verbrennung.

Der thermodynamische Zustand des Arbeitsgases vor Beginn der Einspritzung hängt außerdem von den Anfangsbedingungen ab, die vor Beginn der Kompression vorliegen. Dazu

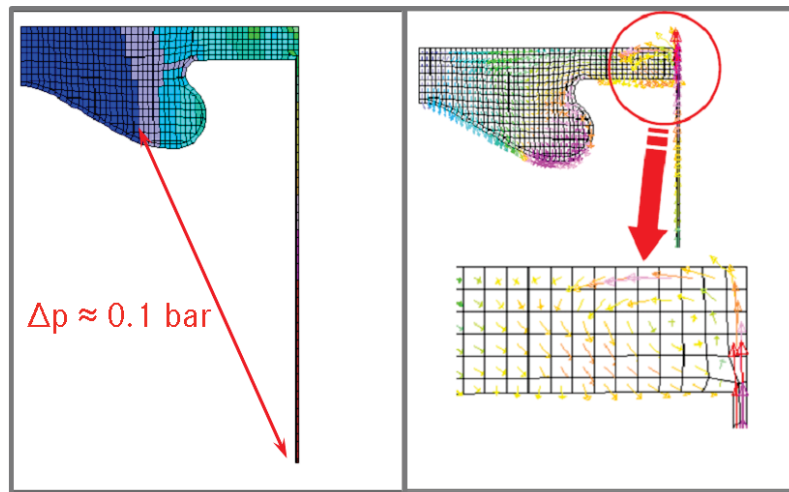


Abbildung 6.5.: Unphysikalische Phänomene bei einem zu großen Feuersteg

zählen die chemische Zusammensetzung des Arbeitsgases, seine Temperatur und Druck sowie die Strömungsverhältnisse im Zylinder. Während die Anfangsbedingungen anhand von Messdaten - Druck, Temperatur und Spezieskonzentration im Saugrohr - berechnet werden können, kann die Drallzahl als Strömungskennwert im Blaslabor gemessen werden. Mit der entsprechenden Sorgfalt kann die Kompression sehr genau simuliert werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Kompressionsenddruck auf 50 mbar genau wiedergegeben. Eine Ladungswechselsimulation kann an dieser Stelle noch zuverlässigere Anfangsbedingungen für die Hochdruckrechnung liefern. Insbesondere können damit Mischungsinhomogenitäten berücksichtigt werden, die bei einer gemittelten Vorgabe für den gesamten Brennraum nicht vorhanden sind. Ladungswechselrechnungen sind allerdings recht aufwändig, da dafür entweder Niederdruckindizierung oder 1D-Rechnungen für die Randbedingungen notwendig sind.

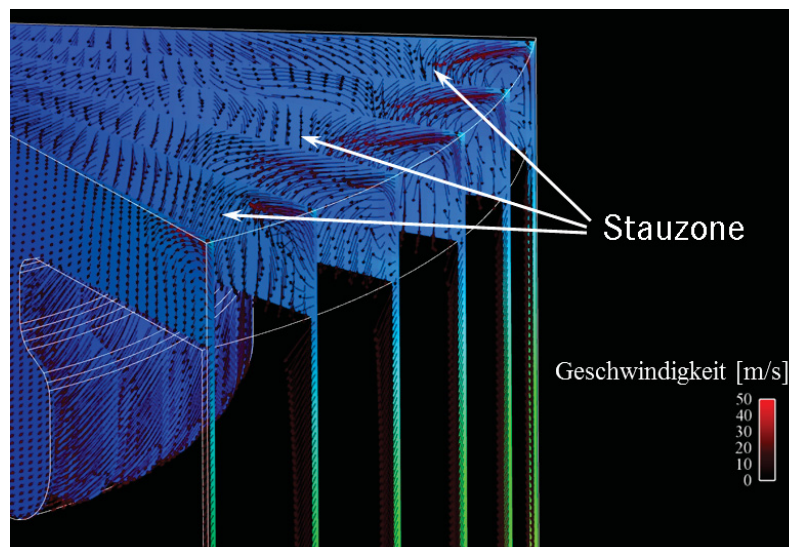


Abbildung 6.6.: Stauzone infolge einer unphysikalischen Wirbelbildung im Quetschspalt

Eine realitätsnahe Abbildung der Einspritzung beginnt mit der richtigen Position der Einspritzdüse bzw. der Düsenlöcher relativ zu Kolbenmulde. Sie beeinflusst maßgeblich das Auftreffen des Einspritzstrahls auf die Muldenkante, das für die folgende Gemischbildung ausschlaggebend ist. Auch der sogenannte Spritzkegelwinkel spielt eine entscheidende Rolle für das Auftreffverhalten des Einspritzstrahls (s. Abb. 6.7). Der Spritzkegelwinkel kann anhand der Düsengeometrie bestimmt werden. Noch genauer ist jedoch die Bestimmung auf Basis von Ergebnissen von Düseninnenströmungssimulation oder optischen Einspritzmessungen.

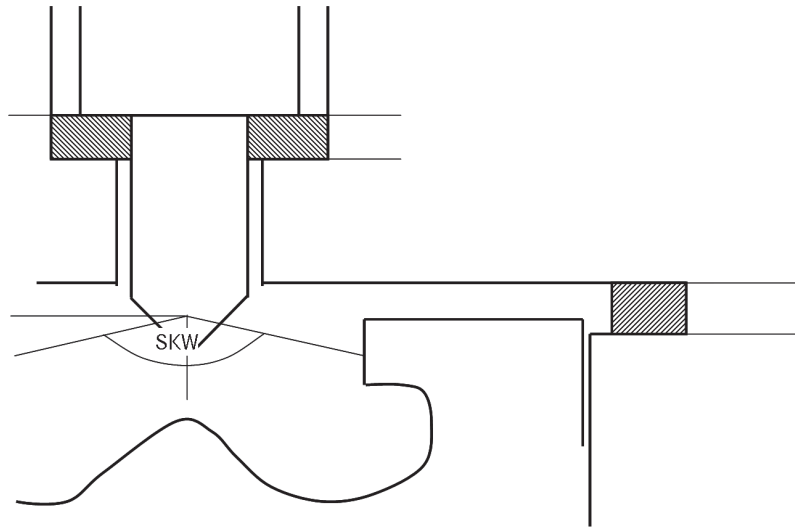


Abbildung 6.7.: Schematische Darstellung des Spritzkegelwinkels (SKW)

Die Austrittsfläche der Düsenlöcher muss entsprechend dem Kontraktionsbeiwert C_a und dem Durchflussbeiwert C_d bestimmt werden (für Details s. [49]). Die Bestimmung des Spritzbeginns kann auf Basis des gut messbaren Ansteuerbeginns und der Verzögerung zwischen Ansteuerung und Einspritzung erfolgen. Der so bestimmte Spritzbeginn kann wieder mittels Brennverlaufsanalyse plausibilisiert werden. Nach Beginn der Einspritzung kann ein negativer Brennverlauf beobachtet werden, der auf die Verdampfungsenthalpie des Kraftstoffs zurückzuführen ist. Für die Bestimmung des Einspritzverlaufs dagegen kann nur auf hydraulische Messungen zurückgegriffen werden.

6.2.2. Qualität der Verbrennungssimulation

Die Rohemissionsmodelle, die im Rahmen dieser Arbeit entstanden sind, wurden in einem CFD-Simulationspaket integriert, das den gesamten Bereich der verbrennungsmotorischen Simulation abdeckt: ausgehend von der Kompression, die eine kalte Strömung darstellt, über die Einspritzung, bei der Zwei-Phasen-Strömung betrachtet werden soll, und die Mischung in der Gasphase bis hin zur Zündung, Verbrennung und Rohemissionsbildung. Die Simulation jedes dieser Prozesse erfordert höchste Sorgfalt, damit die Randbedingungen für die restlichen simultan ablaufenden Prozesse in der entsprechenden Qualität gewährleistet werden können. Deswegen darf das Ergebnis jedes dieser Teilmodelle nicht getrennt vom gesamten Simulationspaket bewertet werden. Dies gilt insbesondere für die Rohemissi-

onsmodelle, deren Ergebnisgüte von der Güte der Mischung und der lokalen Temperaturen maßgeblich abhängt. Eine der wesentlichen Herausforderungen dieser Arbeit war die Aufstellung von Kriterien, die bei der Bewertung der Qualität der Verbrennungssimulation herangezogen werden sollen, denn nur eine korrekte Abbildung der Verbrennung gilt als solide Grundlage für die Rohemissionsmodellierung.

Wie bereits erwähnt sind lokale Luftverhältnisse und lokale Temperaturen entscheidend für die korrekte Abbildung der Rohemissionen. Der Verbrennungsvorgang kann, wie im Kapitel 2.1 beschrieben, in reaktionskinetisch kontrollierte Vormischverbrennung ($Da > 1$), mischungskontrollierte Diffusionsverbrennung ($Da \gg 1$) und eine Ausbrandphase ($Da > 1$) eingeteilt werden. Für die Rußbildung, die ab einer Temperatur von ca. 1400 K stattfindet, gilt deswegen die mischungskontrollierte Diffusionsverbrennung sehr exakt zu modellieren. Für die Verbrennungssimulation in dieser Phase gilt nach wie vor die bekannte Prämisse "mixed-is-burned" (engl. gemischt ist verbrannt). Wenn also die Gemischbildung exakt abgebildet wird, wird auch die Verbrennung exakt abgebildet. Unter der Prämisse, dass die Einspritzung korrekt abgebildet wurde, bestimmen Zündverzug und Brennbeginn entscheidend die Flamenabhebelänge und somit die Rußreaktionsraten. Da Rußoxidation bis spät in der Expansionsphase stattfindet, soll die Wärmefreisetzung im gesamten Verbrennungszyklus korrekt abgebildet werden. Ausgehend davon kann für die Bewertung von Mischung und Verbrennung die Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte herangezogen werden. Diese geben den Zeitpunkt wieder, zu dem 5%, 10%, 50% und 90% der mit dem Kraftstoff eingebrachten Energie freigesetzt wurde. Die Lage dieser Punkte soll in der Messung und in der Simulation möglichst gleich sein. In diesem Fall ist es sichergestellt, dass Zündverzug, Verbrennungsschwerpunktlage und Verbrennungsende korrekt abgebildet wurden. Damit sind die notwendigen Randbedingungen für Ruß- und NO_x -Bildung und -Reduktion vorhanden.

In Tab. (6.3) sind Werte für die charakteristischen Verbrennungspunkte zusammengefasst, die sich als geeignete Kriterien für die Bewertung der Qualität der Verbrennungssimulation erwiesen haben. Abweichungen von diesen Toleranzen sind Indiz für Ungenauigkeiten bei der Simulation der Wärmefreisetzung, welche zu ungenauen lokalen Temperaturen und letztendlich zu einer ungenauen Berechnung der Ruß- und NO_x -Reaktionsraten führen. Vielmals resultieren solche Ungenauigkeiten in der Verbrennungssimulation aus Mischungsdefiziten in der CFD-Simulation, die ihrerseits die Qualität der Rohemissionssimulation nochmals beeinträchtigen.

H5	H10	H50	H90	Summenbrennverlauf [J]
$\pm 0.5^\circ \text{KW}$	$\pm 0.5^\circ \text{KW}$	$\pm 1.0^\circ \text{KW}$	$\pm 5.0^\circ \text{KW}$	$\pm 3.0\%$

Tabelle 6.3.: Kriterien für Bewertung der Qualität der Verbrennungssimulation

Sicherzustellen, dass die Verbrennungsschwerpunkte in einem so engen Toleranzband liegen, ist eine ziemlich große Herausforderung. Dazu muss das CFD-Setup, wie im Kapitel 6.2.1 beschrieben, sehr genau aufgestellt werden. Sehr genau sollen auch das Einspritz- und das Verbrennungsmodell funktionieren. Dies erfordert höchste Sorgfalt und großen

Zeitaufwand und ist somit ein hoher Preis, der für hochqualitative Rohemissionssimulation bezahlt werden muss. Gleichwohl ist dieser Aufwand gerechtfertigt und verständlich, wenn man bedenkt, wie sensitiv Ruß auf kleinste Änderungen von Kolbengeometrie, Düsenüberstand oder Einspritzzeitpunkt auch im realen Motor reagiert.

6.3. Globale Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die globalen Ergebnisse vorgestellt, die für die 18 Betriebspunkte aus Tab. (6.2) erzielt werden konnten. Dazu gehören der Druck-, Mitteltemperatur- und Brennverlauf, die Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte sowie Ruß- und NO_x -Massenverlauf. Die Ruß- und NO_x -Rohemissionen wurden mit den entsprechenden Messwerten aus dem Abgas verglichen. Die NO_x -Konzentration im Abgas lässt sich recht genau (Toleranz weniger als 5%) bestimmen. Die NO_x -Masse im Abgas kann anschließend unter Berücksichtigung der molaren Massen von Stickstoff und Sauerstoff berechnet werden. Die Bestimmung der Rußmasse ist dagegen recht kompliziert. Dazu existieren grundsätzlich zwei Möglichkeiten. Erstens kann Teil des Abgases entnommen und definiert verdünnt werden. Diese Mischung aus Frischluft und Abgas wird unter konditionierten Randbedingungen durch ein Filterblättchen durchgezogen. Dabei bleiben feste Abgasanteile am Filterblättchen haften. Ihre Masse kann danach einfach durch Wiegen ermittelt werden. Die zweite Methode zur Bestimmung der Rußmasse besteht darin, FSN zu messen und über eine bestimmte Korrelation die Rußmasse zu berechnen. Diese Methode wurde im Kapitel 2 detailliert beschrieben und kam in dieser Arbeit zum Einsatz.

6.3.1. Rußsimulationsergebnisse bei AGR-Variation

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei AGR-Variationen untersucht. Die Motorlast war dabei 7 bar bzw. 14 bar (s. Tab. 6.2). Aus Sicht der Brennverfahrenentwicklung sind AGR-Variationen besonders interessant. Eine Erhöhung der AGR-Rate bzw. Absenkung der Sauerstoffkonzentration trägt zur Reduktion der NO_x -Rohemission bei, führt aber meistens gleichzeitig zu einer Erhöhung der Rußemission. Ein Rußmodell, das bei der Brennverfahrenentwicklung zum Einsatz kommen soll, soll deswegen in der Lage sein, die Sensitivität der Rußemission auf Änderungen der AGR-Rate korrekt abzubilden.

Wie im Kapitel 6.2 erläutert ist die Qualität der Verbrennungssimulation, insbesondere im Hinblick auf Wärmefreisetzung und mittlere Temperaturen, entscheidend für die Qualität der Rohemissionssimulation. In Abb. 6.8 sind die Druck- und Mitteltemperaturverläufe sowie die Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte für die AGR-Variation bei einem Mitteldruck von ca. 7 bar dargestellt. Die Mitteltemperaturen und die Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte in der Messung wurden dabei mittels Brennverlaufsanalyse bestimmt.

Der Druckverlauf ist ein sehr weit verbreitetes Kriterium zur Bewertung der Verbrennungssimulation. In Abb.6.8 ist klar zu sehen, dass der Druckverlauf für jeden der Betriebspunkte sehr gut wiedergegeben wurde. Im Hinblick auf die Rohemissionsmodellierung ist der Druckverlauf allerdings nicht wirklich aussagekräftig. Die entsprechenden Reaktionsraten

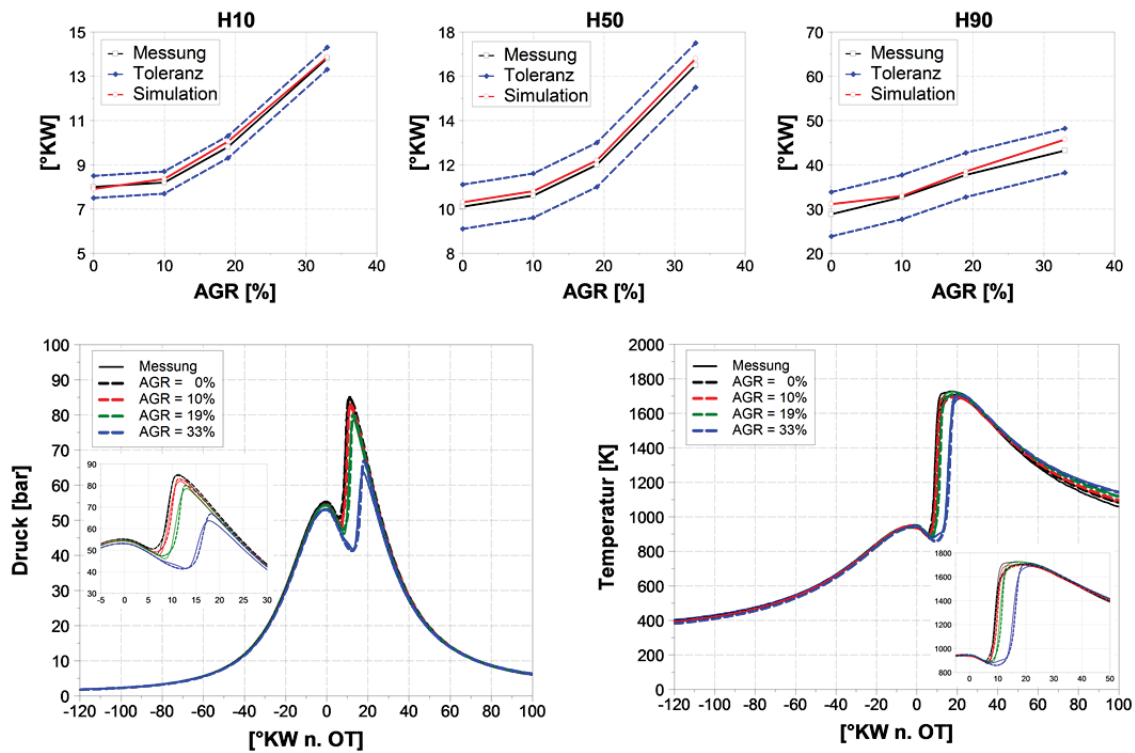


Abbildung 6.8.: Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte, Druck und Mitteltemperatur für AGR-Variation bei einem Mitteldruck von ca. 7 bar

zeigen sich wenig sensitiv auf Änderungen des Drucks. Im Gegensatz dazu hat die Temperatur einen deutlichen Einfluss. Aus diesem Grund sollen für die globale Bewertung der Verbrennungssimulation die Mitteltemperaturen und nicht die Drücke verglichen werden. In Abb. 6.8 wurde deswegen die massengemittelte Temperatur aus der CFD-Simulation mit der experimentellen Mitteltemperatur verglichen. Letztere wurde mittels Brennverlaufsanalyse berechnet.

Die Brennverlaufsanalyse liefert auch die Kriterien zur Bewertung der Verbrennungssimulation: die Lagen der charakteristischen Verbrennungspunkte. Für die AGR-Variation bei einem Mitteldruck von ca. 7 bar wurden diese in der Simulation sehr gut wiedergegeben. Insbesondere liegen alle Simulationspunkte in dem im Kapitel 6.2 definierten Toleranzband. Die Ergebnisse, die in Abb. 6.8 gezeigt sind, stellen eine sehr stabile Basis für die Rohemissionsmodellierung. Die zu dieser Verbrennungssimulation korrespondierenden Rußmassenverläufe sind links in Abb. 6.9 dargestellt. In diesem Diagramm stellen die durchgezogenen Linien den zeitlichen Rußmassenverlauf über °KW dar, während die Punkte bei 100°KW die aus FSN berechneten Rußmassen kennzeichnen. Letztere sind mit einem Toleranzband von $\pm 20\%$ versehen, das mit Streuung der FSN-Messung und Ungenauigkeiten der Umrechnung zwischen FSN und Rußmasse begründet wird. Die Simulation endet bei 100°KW, da in dieser Phase der Expansion die Gastemperaturen so niedrig sind, dass alle Rußreaktionen einfrieren. Dies ist am waagerechten Rußmassenverlauf ab ca. 60°KW deutlich zu erkennen. Aus diesem Grund darf die Rußmasse bei 100°KW mit der Rußmasse im Abgas verglichen werden. Diese Rußmassen aus Messung und Simulation

sind rechts in Abb. 6.9 in Abhängigkeit von λ dargestellt.

Die Rußmassenverläufe und -endwerte in Abb. 6.9 zeigen sehr plausibles Verhalten. Erhöhung der AGR-Rate führt sowohl in der Messung als auch in der Simulation zu höheren Rußemissionen im Abgas. In Abb. 6.9 ist eine Reihe von interessanten Effekten zu beobachten. Trotz beträchtlicher Rußbildung bei niedrigen AGR-Raten (0% und 10%) ist die simulierte Rußmasse bei 100°KW gleich 0. Dies ist auf die sehr hohen globalen Luftverhältnisse bei diesen AGR-Raten (s. Tab. 6.2) zurückzuführen. Das Rußmodell gibt dieses Verhalten korrekt wieder. Bemerkenswert sind die unterschiedlichen Rußmassengradienten in der Bildungsphase. Das liegt nicht etwa an unterschiedlichen Mischungsverhältnissen aufgrund von unterschiedlichen Strahl-Wand-Interaktionen, da der Spritzbeginn für diese AGR-Variation konstant war (s. Tab. 6.2). Auch die Mitteltemperaturen sind in dieser Phase trotz unterschiedlicher AGR-Raten ziemlich ähnlich. Die unterschiedlichen Rußmassengradienten können deswegen nur mit unterschiedlichen Zündverzügen und den daraus resultierenden unterschiedlichen Flammenabhebelängen erklärt werden. Bei niedrigen AGR-Raten sind die düsennahen Bereiche heißer im Vergleich zu den höheren AGR-Raten. Der Rußmassengradient im Fall von 33% AGR ist im Vergleich zu den niedrigeren AGR-Raten wesentlich kleiner. Das liegt daran, dass hier der Zündverzug erheblich länger und die Verbrennungstemperatur deutlich niedriger ist, welche letztendlich zu langer Mischungszeit und schwacher Rußbildung führt. Im Falle von 33% AGR weist der Rußmassenverlauf außerdem keine ausgeprägte Rußoxidationsphase. Die Ursache dafür ist das sehr niedrige Luftverhältnis λ , das zu einem stark eingeschränktem Sauerstoffangebot in der Expansionsphase führt.

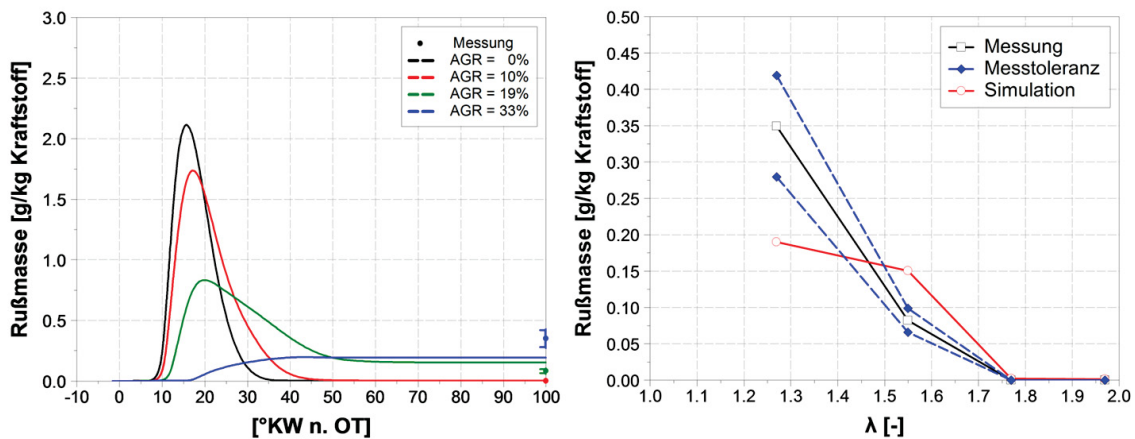


Abbildung 6.9.: Rußmassenverlauf und Rußmasse im Abgas für AGR-Variation bei $p_{me} \approx 7$ bar

Das Rußmodell kann das motorische Verhalten bei einer AGR-Variation sehr gut abbilden. Die berechneten Rußmassen korrelieren gut mit der Messung. Eine kleine Ausnahme davon ist das Simulationsergebnis bei 33% AGR. Hierbei wird die Rußmasse vom Modell deutlich unterschätzt. Das liegt daran, dass das Verbrennungsmodell, das im Rahmen dieser Arbeit eingesetzt wurde, nicht in der Lage ist, die Wärmefreisetzung aus cool-flame-Verbrennung abzubilden. Die Energiemenge, die dabei freigesetzt wird, ist nicht sehr groß. Immerhin

kann das Verbrennungsmodell trotz dieses Nachteils die H10-Lage sehr gut wiedergeben (s. Abb. 6.8). Diese Menge führt aber zu höheren Temperaturen in der Rußbildungsphase, die in der Simulation nicht abgebildet werden können. Aus diesem Grund sind die berechneten Rußbildungsraten und dementsprechend die berechnete Rußmasse niedriger als in der Messung.

Solche Effekte konnten bei der zweiten AGR-Variation in dieser Arbeit nicht beobachtet werden. Die Motorlast betrug hierbei ca. 14 bar Mitteldruck. Die relativ hohe Last führt dazu, dass die Zündverzüge und die H50-Lage für die verschiedenen AGR-Raten sehr ähnlich sind (s. Abb. 6.10). Während das Verbrennungsmodell dieses Verhalten sehr gut wiedergibt, liegt die H90-Lage in der Simulation am Rande des im Kapitel 6.1 definierten Toleranzbandes. Nichtsdestotrotz sind die Mitteltemperaturen in der Simulation gut abgebildet, so dass die Verbrennungssimulation für diese AGR-Variation eine solide Basis für das Rußmodell bildet.

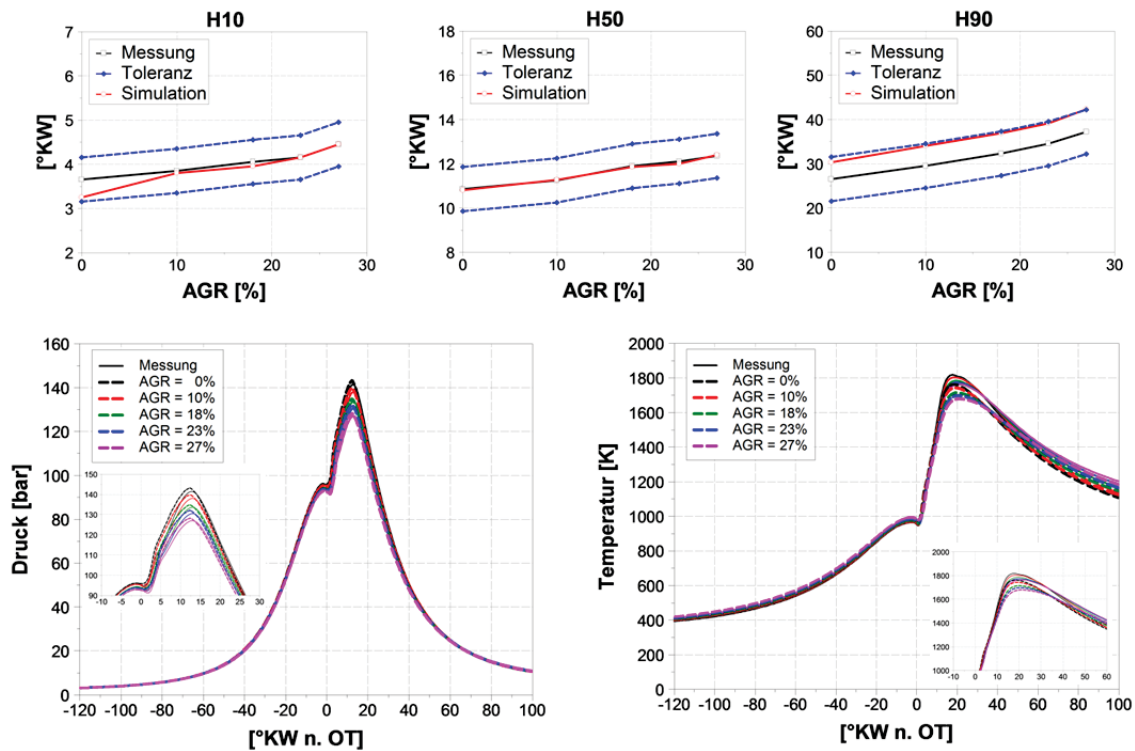


Abbildung 6.10.: Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte, Druck und Mitteltemperatur für AGR-Variation bei $p_{me} \approx 14$ bar

Wegen der sehr ähnlichen Verbrennungsverläufe sind die thermodynamischen Randbedingungen für das Rußmodell für die verschiedenen AGR-Raten sehr ähnlich. Das ist gleichzeitig die Ursache für die sehr ähnlichen Rußmassengradienten in der Bildungsphase (s. Abb. 6.11). Die geringfügigen Unterschiede sind lediglich auf unterschiedliche lokale Luftverhältnisse zurückzuführen. Die hohe Qualität der Verbrennungssimulation ist Beweis dafür, dass die Luft-Kraftstoff-Mischung und damit die lokalen Luftverhältnisse sehr gut abgebildet sind. Dementsprechend zeigen auch die Rußsimulationsergebnisse eine fast perfekte Übereinstimmung mit der Messung. Die Qualität der Ergebnisse hängt unter anderem da-

mit zusammen, dass diese AGR-Variation für die Kalibrierung der Oberflächenchemie im Rußmodell herangezogen wurde. Nichtsdestotrotz müssen für eine derartig gut abgebildete Rußoxidationsphase, die für alle AGR-Raten sehr stark ausgeprägt ist, sämtliche Rußmodellinputs korrekt bestimmt werden. Insbesondere gilt das für die Oxidatorseitentemperatur, deren Berechnung in der Expansionsphase eine große Herausforderung darstellt (s. Kapitel 5). Die Güte der Rußsimulation bei dieser AGR-Variation ist ein deutlicher Beweis für die Gültigkeit des TP-Ansatzes, der im Kapitel 5 vorgestellt wurde. Das Einfrieren der Rußoxidation geschieht offenbar exakt zum richtigen Zeitpunkt. Das bedeutet wiederum, dass die lokalen Zellenmitteltemperaturen korrekt in Flamelet-Oxidatorseitentemperaturen konvertiert wurden. Dadurch beseitigt der TP-Ansatz einen der wesentlichen Nachteile der Steady-State-Flamelet-Modelle, womit ihr Einsatz für verbrennungsmotorische Rohemissionsimulation gerechtfertigt wird.

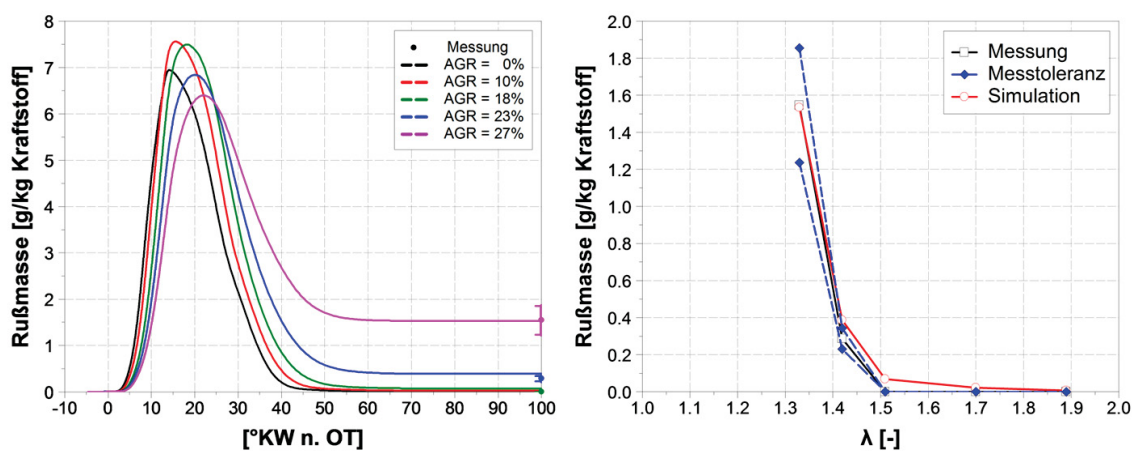


Abbildung 6.11.: Rußmassenverlauf und Rußmasse im Abgas für AGR-Variation bei $p_{me} \approx 14$ bar

6.3.2. NO_x -Simulationsergebnisse bei AGR-Variation

Im Kapitel 5 wurde das reaktionskinetische NO_x -Modell beschrieben, das im Rahmen dieser Arbeit entstanden ist. Das Modell wurde im Vergleich zum Rußmodell einfacher aufgebaut. Dabei wurde davon Gebrauch gemacht, dass die notwendigen reaktionskinetischen Daten für die Berechnung der NO_x -Bildungsraten nach der Erstellung der Flamelet-Bibliothek für das Rußmodell zur Verfügung standen. Unter der Annahme, dass die NO_x -Chemie für die dieselmotorische Verbrennung ausreichend verstanden ist, wurde das Modell mit keinen Kalibrierungsparametern versehen. Das Simulationsergebnis, das mit dem NO_x -Modell für die AGR-Variation bei ca. 7 bar Mitteldruck erreicht werden konnte, ist in Abb. 6.12 dargestellt.

Auf der linken Seite der Abb. 6.12 sind die NO_x -Massenverläufe dargelegt. Das Modell zeigt plausibles Verhalten: mit ansteigender AGR-Rate wird immer weniger NO_x gebildet. Die intensive NO_x -Bildung beginnt ungefähr nach Erreichen des Verbrennungsschwerpunktes und dauert bis zum H90-Punkt (s. Abb. 6.8). Die hier dargestellten Simulationsergebnisse wurden in Abb. 6.12 mit Messergebnissen verglichen. Die NO_x -Masse im Abgas kann

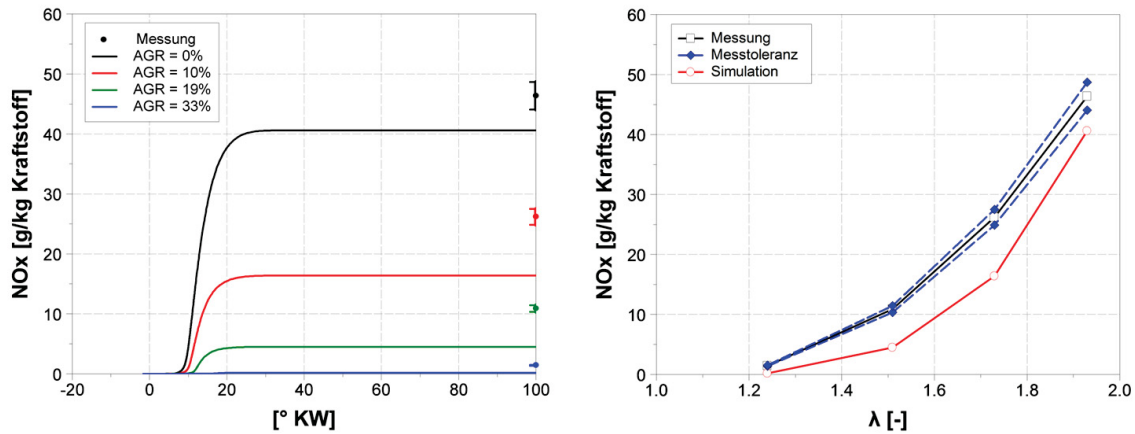


Abbildung 6.12.: NO_x -Massenverlauf und NO_x -Masse im Abgas für AGR-Variation bei $p_{me} \approx 7$ bar

relativ genau bestimmt werden. Sie ergibt sich aus der NO_x -Konzentration und der Abgasmasse, deren Messung sehr enge Toleranzen aufweist. Insgesamt kann die Messtoleranz der NO_x -Masse im Abgas mit ca. 5% angegeben werden. Diese Messtoleranz ist in Abb. 6.12 als Fehlerbalken dargestellt. Die NO_x -Modellergebnisse liegen in den Betriebspunkten dieser AGR-Variation stets unterhalb der unteren Grenze der Messtoleranz. Teilweise kann dieses Verhalten auf Ungenauigkeiten in der Simulation von Mischung und Verbrennung zurückgeführt werden. In der Phase der intensivsten NO_x -Bildung – zwischen 5° KW und 20° KW – sind die Massenmitteltemperaturen in der Simulation niedriger als in der Messung. Angesichts der starken Temperaturabhängigkeit der NO_x -Bildungsreaktionen (s. Kapitel 5) sind die Unterschiede zwischen gemessenen und gerechneten NO_x -Massen im Abgas deswegen nachvollziehbar. Auch wenn die absoluten NO_x -Massen, die mit dem NO_x -Modell berechnet werden, teilweise deutlich von der Messung abweichen, werden die Trends sehr genau abgebildet (s. Abb. 6.12 rechts). Dies ist ein durchaus positives Ergebnis, da das NO_x -Modell wie bereits erwähnt nicht kalibriert werden muss.

Die Fähigkeit des NO_x -Modells das motorische Verhalten bei einer AGR-Variation wiederzugeben wurde auch bei höherer Last von ca. 14 bar Mitteldruck geprüft. Die Ergebnisse, die hier erzielt werden konnten, sind in Abb. 6.13 dargestellt. Die berechneten Werte stimmen bei dieser AGR-Variation besser mit der Messung überein. Diesmal liegen aber die Simulationsergebnisse höher als die Messergebnisse. Dies kann mit den höheren Verbrennungstemperaturen, die bei einem Mitteldruck von ca. 14 bar herrschen, erklärt werden. Bei solch hohen Temperaturen gewinnen die NO_x -Rückreaktionen an Bedeutung. In dem NO_x -Modell, das im Rahmen dieser Arbeit entstanden ist, werden diese Rückreaktionen unterschätzt (s. Kapitel 5.4). Dementsprechend werden die NO_x -Emissionen in der Simulation überschätzt. Dies ist eine Modellungenauigkeit, die sich allerdings nur bei hochlastigen Betriebspunkten bemerkbar macht.

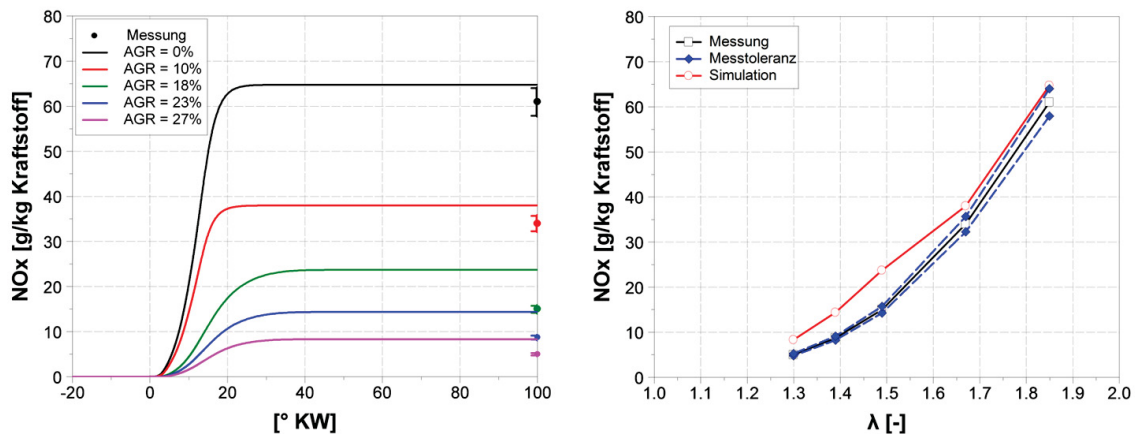


Abbildung 6.13.: NO_x -Massenverlauf und NO_x -Masse im Abgas für AGR-Variation bei $p_{me} \approx 14$ bar

6.3.3. Rußsimulationsergebnisse bei Spritzbeginnvariation

Wie bereits erwähnt ist die Abgasrückführung eine der innermotorischen Maßnahmen, die am häufigsten zur Senkung der Verbrennungstemperaturen und respektive der NO_x -Emissionen angewandt werden. Die AGR-Raten können aber nur bis zu einem bestimmten Punkt erhöht werden, da ab diesem Punkt die Rußemissionen überproportional ansteigen (s. Kapitel 6.3.1). In solchen Fällen ist Verschiebung des Spritzbeginns nach spät eine attraktive Möglichkeit zur weiteren NO_x -Reduktion. Die Verbrennung findet dadurch später statt, weswegen die Verbrennungstemperaturen sinken. Niedrige Verbrennungstemperaturen unterdrücken auch die Rußbildung. In der Summe kann sich aber eine Spätverstellung des Spritzbeginns negativ auf die Rußmasse im Abgas auswirken, da die Zeit für die Luft-Kraftstoff-Durchmischung und folglich für Rußoxidation nicht mehr ausreichend ist. Eine der großen Herausforderungen, die an Rußmodelle gestellt werden, ist die korrekte Abbildung des Trade-offs zwischen diesen beiden Motorphänomenen. Gleichzeitig ist das aber einer der größten Benefits eines gut funktionierenden Rußmodells. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit eine Spritzbeginnvariation untersucht, die genau dieses Motorphänomen darstellt (s. Abb. 6.2).

Die Betriebsparameter für diese Spritzbeginnvariation sind in Tab. 6.2 zusammengestellt. Auffällig ist das sehr niedrige Luftverhältnis von $\lambda = 1.27$, bei dem die Spritzbeginnvariation durchgeführt wurde. Diese Absenkung war notwendig, um das gewünschte Rußverhalten so ausgeprägt wie möglich zu realisieren. Solch niedrige Luftverhältnisse sind eine Herausforderung hinsichtlich Mischungs- und Verbrennungsmodellierung. Dies ist die Ursache für die Qualität der Verbrennungssimulation, die im Vergleich zu derselben bei den AGR-Variationen etwas schlechter ist. Insbesondere macht sich das in der Lage der H90-Punkten bemerkbar (s. Abb. 6.14). Sie konnte in diesem Fall nicht optimal abgebildet werden. Diese Abweichungen sind Indiz für Mischungsungenauigkeiten in Expansionsphase, aufgrund derer die thermodynamischen Randbedingungen für die Rußoxidation nicht genau denselben in der Messung entsprechen. Diese Mischungsdefizite sind nicht deutlich in den Druckverläufen zu erkennen. Dies spricht nochmals dafür, dass die Druckverläufe kein verlässliches

Kriterium für die Bewertung der Verbrennungssimulation sind. In den Mitteltemperaturverläufen dagegen sind tatsächlich Unterschiede zu der Messung zu sehen, insbesondere in der Expansionsphase. Trotz dieser Ungenauigkeiten stellt die Verbrennungssimulation der Spritzbeginnvariation eine gute Basis für die Rohemissionsmodelle.

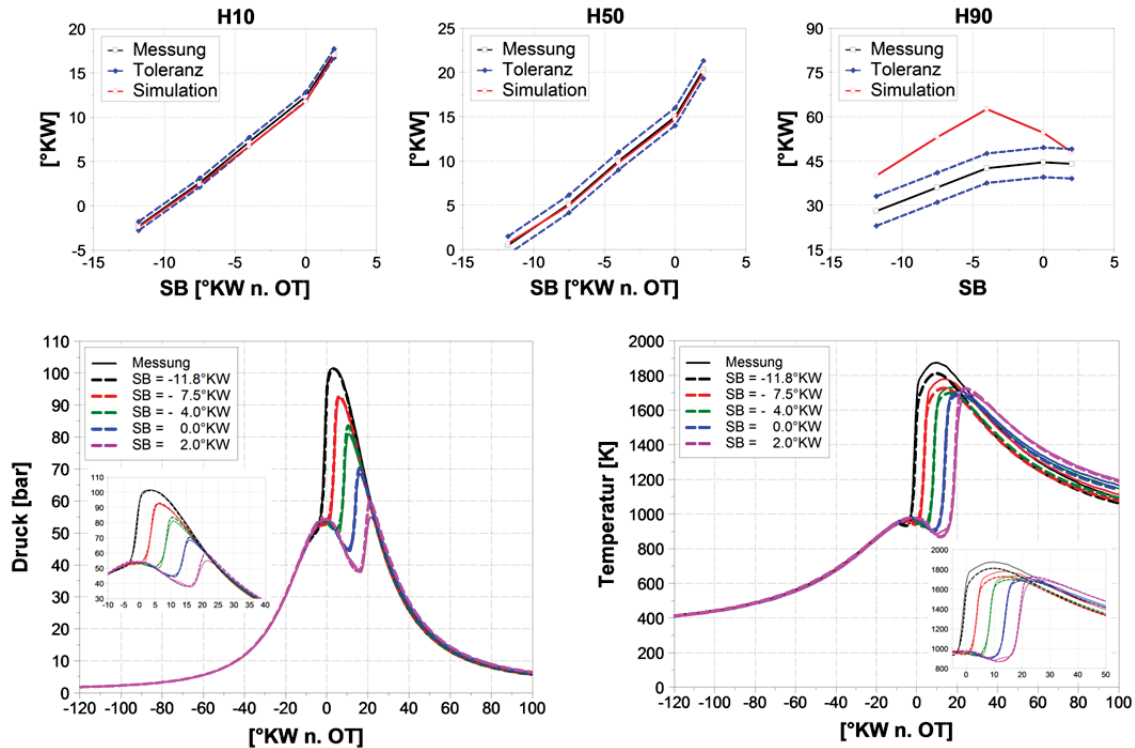


Abbildung 6.14.: Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte, Druck und Mitteltemperatur für Spritzbeginnvariation bei $p_{me} \approx 7$ bar

Die Rußsimulationsergebnisse zu der Spritzbeginnvariation sind Abb. 6.15 dargestellt. Auf der rechten Seite der Abbildung ist zu erkennen, dass das Rußmodell den Trade-off zwischen niedrigen Verbrennungstemperaturen und kurzer Mischungs- bzw. Brenndauer sehr gut abbildet. Bemerkenswert ist die Tatsache, dass nicht nur die Trends, sondern auch die Absolutwerte für Rußmasse im Abgas sehr gut wiedergegeben werden konnten. Auffällig bei den Rußmassenverläufen, die auf der linken Seite der Abb. 6.15 dargestellt sind, ist die schwach ausgeprägte Oxidationsphase. Einerseits kann dies ein weiteres Indiz für Mischungsdefizite in der Expansionsphase sein. Andererseits muss der Rußmassenverlauf nicht unbedingt ausgeprägte Bildungs- und Oxidationsphase aufweisen. Die Vorstellung, dass bei der Verbrennung sehr viel Ruß gebildet und später aber fast vollständig oxidiert wird, datiert aus früheren Zeiten der dieselmotorischen Brennverfahrensentwicklung (EU2 oder EU3). Der Rußmassenverlauf kann experimentell nur sehr schwer bestimmt werden. Deswegen haben sich in der Brennverfahrensentwicklung andere Techniken zur Plausibilisierung des zeitlichen Ablaufs von Rußbildung und Rußoxidation. Dazu zählt vor allem die sogenannte KL-Messung, bei der die Rußstrahlung an einem Transparentaggregat optisch untersucht wird. Das Transparentaggregat ist dabei eine Kopie des tatsächlichen Motors mit einem transparent ausgeführten Kolben. Um die Frage zu beantworten, ob

diese schwach ausgeprägten Rußmassenverläufe realistisch sind oder nicht, wurde im Rahmen dieser Arbeit dieselbe Spritzbeginnvariation an einem solchen Transparentaggregat durchgeführt. Anschließend wurden die lokalen Rußstrahlungsbilder und deren optische Auswertung mit den Ergebnissen der CFD-Rußsimulation verglichen. Diese Ergebnisse werden im Kapitel 6.4 detailliert vorgestellt.

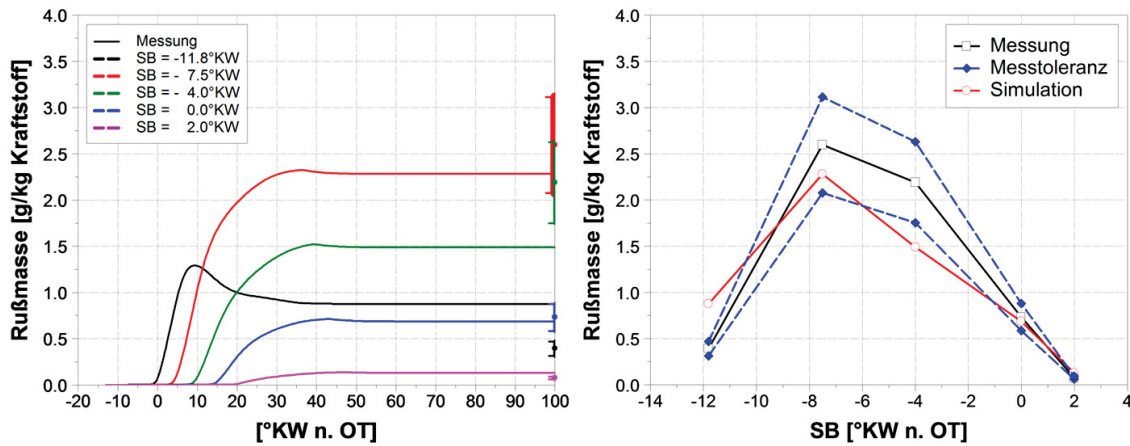


Abbildung 6.15.: Rußmassenverlauf und Rußmasse im Abgas für Spritzbeginnvariation bei $p_{me} \approx 7$ bar

6.3.4. NO_x -Simulationsergebnisse bei Spritzbeginnvariation

Das in dieser Arbeit entwickelte NO_x -Modell wurde für die SB-Variation bei ca. 7 bar angewandt. Die Ergebnisse in diesem Fall sind nicht so zufriedenstellend wie dieselben für die AGR-Variationen, die im Kapitel 6.3.2 vorgestellt wurden. Das Modell überschätzt deutlich die gemessenen NO_x -Massen. Die Trends werden für Versuche mit späterem Spritzbeginn (-4°KW , 0°KW und 2°KW) gut wiedergegeben.

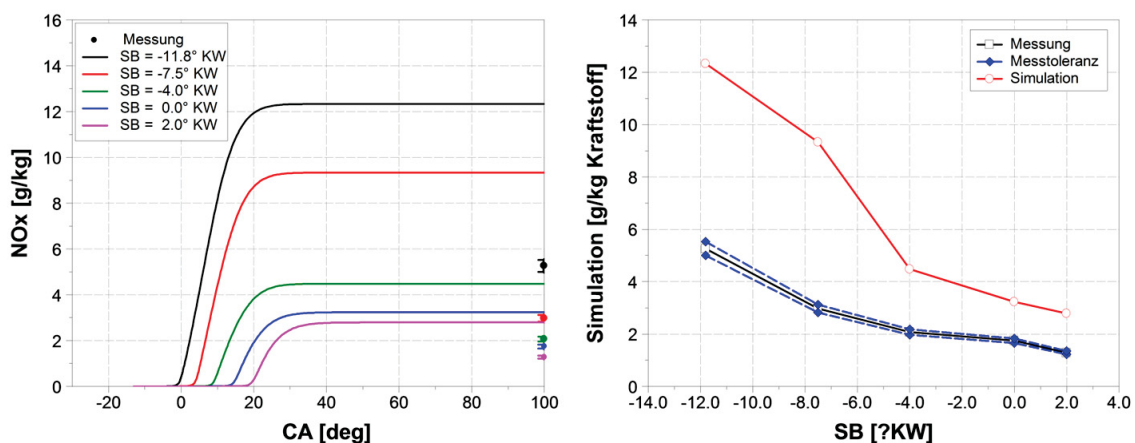


Abbildung 6.16.: NO_x -Massenverlauf und NO_x -Masse im Abgas für Spritzbeginnvariation bei $p_{me} \approx 7$ bar

Allein die Güte der Verbrennungssimulation kann diesmal nicht die Ursache für die Differenzen zwischen Messung und Simulation sein. Die Lage des H90-Punktes in der Simulation

ist viel später als in der Messung. Dementsprechend werden die Massenmitteltemperaturen zwischen H50 und H90 in der Simulation unterschätzt. Da dies die Phase mit der intensivsten NO_x -Bildung ist, kann davon ausgegangen werden, dass das NO_x -Modell die gemessenen NO_x -Massen im Abgas unterschätzt. Das Modell zeigt allerdings das gegenteilige Verhalten: die NO_x -Massen im Abgas werden überschätzt (s. Abb. 6.16). Aus diesem Grund kann die Ursache für die nicht zufriedenstellende Modellperformance in der Flameletbibliothek gesucht werden. Die Spritzbeginnvariation wurde bei sehr niedrigen Luftverhältnissen bzw. bei sehr hohen AGR-Raten durchgeführt. Dies lässt Ungenauigkeiten in den NO_x -Reaktionsraten bei hohen AGR-Raten vermuten.

6.3.5. Rußsimulationsergebnisse bei Variation der hydraulischen Pause zwischen Voreinspritzung und Haupteinspritzung

Aus Komfortgründen wird bei modernen Dieselmotoren mindestens eine Voreinspritzung appliziert, die die Druckgradienten etwas abmildern soll. Eine Voreinspritzung hat allerdings Nachteile im Hinblick auf Emissionen und Verbrauch. Die Verbrennung der Voreinspritzung führt beispielsweise zu kürzeren Zündverzügen, die wiederum kürzere Mischungszeit für die Haupteinspritzung und respektive schlechtere Gemischhomogenisierung bedeuten. Die Arbeitsgastemperatur steigt infolge der Voreinspritzung, womit die Ruß- und NO_x -Bildung begünstigt werden. Außerdem sinkt das Sauerstoffangebot in Düsennähe, womit die Rußbildung nochmals gefördert wird. Um diesen Rußnachteil zu entschärfen wird angestrebt, die hydraulische Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung so weit wie möglich zu verlängern, so dass die einzelnen Strahlen der Haupteinspritzung nicht in verbranntes Gemisch eingespritzt werden. Durch die Drallströmung im Zylinder werden nämlich heiße und fette Bereiche verweht, die aus den einzelnen Strahlen der Voreinspritzung resultieren. Je genauer die mageren Gemischregionen mit der Haupteinspritzung getroffen werden, desto kleiner ist der Rußnachteil, der durch die Voreinspritzung entsteht. Leider steigen aber dadurch die Zylinderdruckgradienten, womit sich das Geräuschverhalten wieder verschlechtert. An dieser Stelle muss der beste Kompromiss zwischen Geräuschreduktion und Rußanstieg gefunden werden. Experimentell ist diese Aufgabe zwar nicht schwierig, aber mit hohen Kosten verbunden. Für die CFD-Simulation stellt sie eine große Herausforderung dar. Ein gut funktionierendes CFD-Paket, das diese Herausforderung meistert, kann damit einen erheblichen Beitrag zu der Brennverfahrensentwicklung liefern. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit auch eine Variation der hydraulischen Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung betrachtet. Die Ergebnisse dieser Untersuchung werden in diesem Kapitel vorgestellt.

Der Spritzbeginn für die Haupteinspritzung war bei der Variation der hydraulischen Pause konstant, damit Auftreff- bzw. Mischungsverhalten der Haupteinspritzung möglichst gleich bleiben. Die hydraulische Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung wurde zwischen 200 μs und 2000 μs variiert (s. Tab. 6.2). Bei der Drehzahl von 2000 min^{-1} entspricht dies einem Abstand zwischen 2.4°KW und 24°KW. Die Verbrennungssimulation ist in diesem Fall sehr anspruchsvoll. Das liegt insbesondere daran, dass die Kraftstoffmasse, die mit der Voreinspritzung eingebracht wird, in der Messung nicht ganz genau bestimmt werden kann.

Sie wird zwar der Motorsteuerung als Soll-Wert übergeben, woraus eine entsprechende Ansteuerdauer berechnet wird. Aufgrund der Mehrfacheinspritzung entstehen allerdings Druckwellen in der Railleitung, die die Genauigkeit dieser Umrechnung beeinträchtigen. Diese Ungenauigkeiten sind für die Drehmomentregelung im realen Motor unerheblich, sehr wohl aber für die Verbrennung, die aus der Voreinspritzung resultiert. Dies ist anhand der H10-Lage in der Simulation klar zu erkennen (s. Abb. 6.17): sie liegt am Rande oder sogar außerhalb der definierten Toleranz von 0.5°KW .

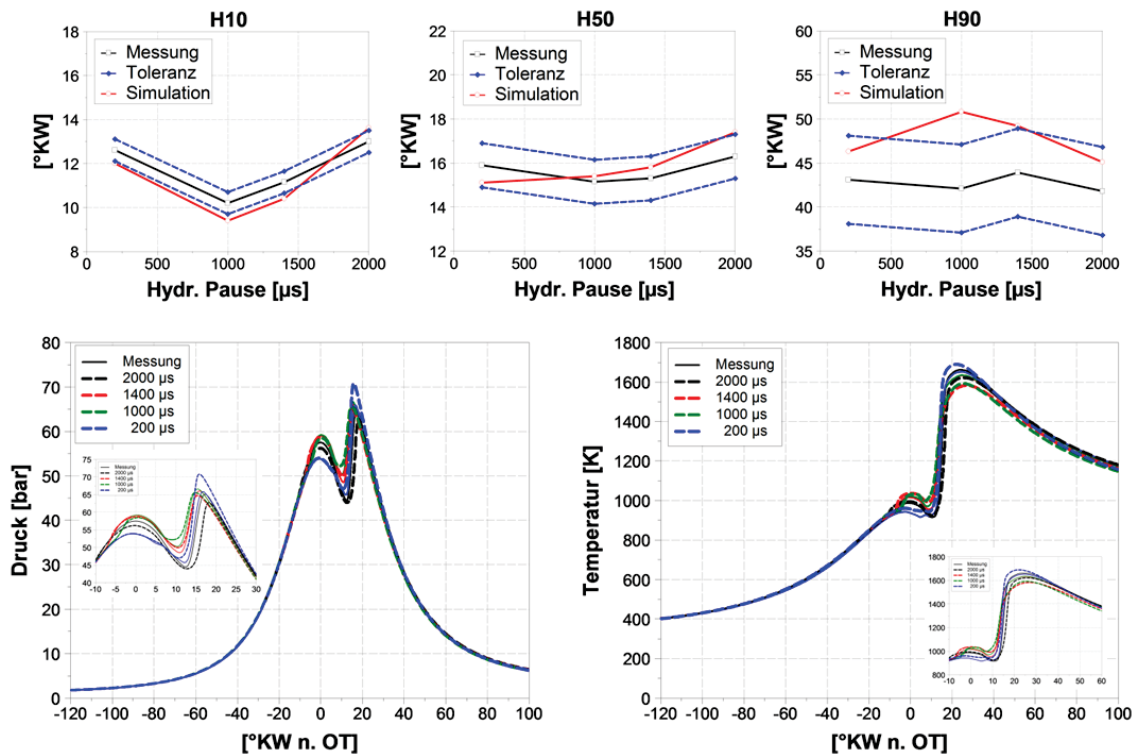


Abbildung 6.17.: Lage der charakteristischen Verbrennungspunkte, Druck und Mitteltemperatur für Variation der hydraulischen Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung bei $p_{me} \approx 7$ bar

Auch wenn die Qualität der Verbrennungssimulation nicht ganz den Stand der bisher gezeigten Variationen erreicht, ist sie eine relativ gute Basis für die Anwendung der Rohemissionsmodelle. Auffällig dabei ist die Mitteltemperatur, die in der Simulation niedriger ist als in der Messung (s. Abb. 6.17). Das gilt in diesem Fall für alle Phasen der Verbrennung. Dementsprechend ist die Rußbildung genau so davon beeinträchtigt wie die Rußoxidation. Die Rußergebnisse, die bei der Variation der hydraulischen Pause erreicht werden konnten, sind in Abb.6.18 dargestellt. Die Abweichungen der Absolutwerte sind diesmal etwas höher als bei den bisher gezeigten Ergebnissen. Dies ist zum größten Teil auf die anspruchsvolle Verbrennungssimulation zurückzuführen. Die Trends werden dagegen sehr gut wiedergegeben.

Diese Rußergebnisse zeigen wiederholt, dass das Rußmodell als Teil des ganzen CFD-Simulationspaket, das im Rahmen dieser Arbeit zum Einsatz kam, sehr gut funktioniert. Die berechneten absoluten Rußmassen korrelieren zu den gemessenen Rußmassen. Die bis-

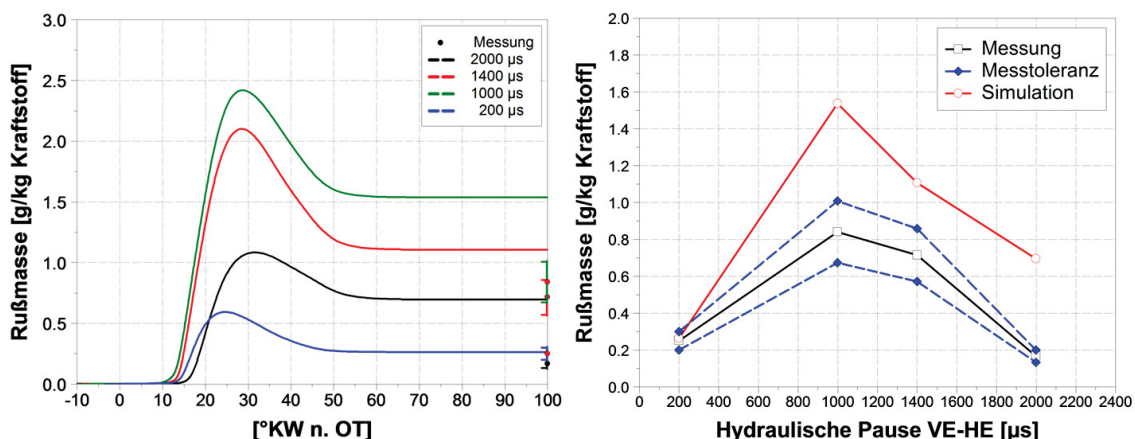


Abbildung 6.18.: Rußmassenverlauf und Rußmasse im Abgas für Variation der hydraulischen Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung bei $p_{me} \approx 7$ bar

her gezeigten Betriebspunkte wurden gezielt für die Validierung des Modells definiert. In dieser Form kommen sie in der Applikation eines modernen Dieselmotors nicht vor. Die Variation der hydraulischen Pause gibt dagegen die Chance, für die reale Brennverfahrensentwicklung relevante Einspritzstrategien in der Simulation zu betrachten. Wie am Anfang dieses Kapitels erläutert gilt es bei der Applikation einer Voreinspritzung, einen Kompromiss zwischen Verbrennungsgeräusch und Rußemission zu finden. Während die Rußmasse als Simulationsergebnis vorliegt, muss das Verbrennungsgeräusch bei einem Verbrennungsablauf wie in der Simulation (s. Abb. 6.17) gesondert bestimmt werden. Die Methodik, die dabei angewandt wurde, wird im Anhang A kurz beschrieben.

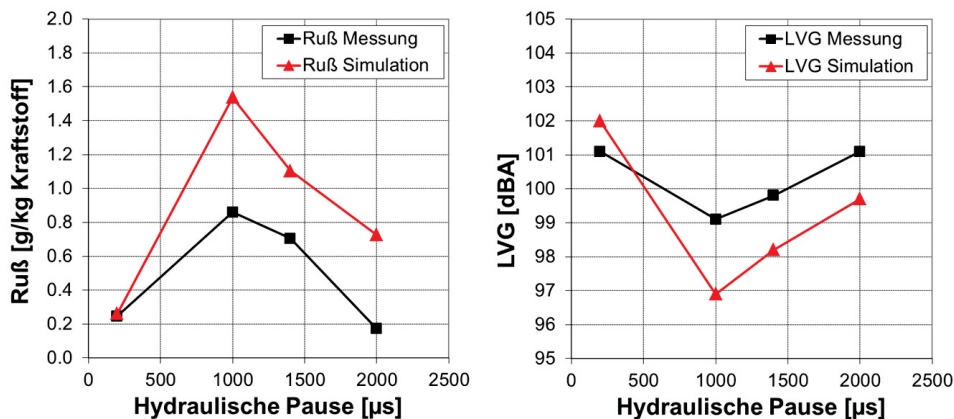


Abbildung 6.19.: Verbrennungsgeräusch und Rußmasse im Abgas in Abhängigkeit von der hydraulischen Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung für Messung und Simulation

Unter Einbeziehung der bereits zur Verfügung stehenden Rußmassen im Abgas aus Messung und Simulation ergibt sich Abbildung 6.19, die die Möglichkeiten des CFD-Simulationspakets eindrucksvoll illustriert. In Abb. 6.19 ist zu erkennen, dass das berechnete Verbrennungsgeräusch aus der Simulation sehr gut zu dem berechneten Verbrennungsgeräusch

aus der Messung korreliert. Der Summenpegel weicht dabei um maximal 2 dBA ab. Insbesondere werden aber die Trends im Verbrennungsgeräusch sehr gut abgebildet. In Kombination mit den Rußmassen im Abgas ergibt sich ein eindeutiges Bild. Sowohl in der Messung als auch in der Simulation ist das Geräuschverhalten bei einer hydraulischen Pause von 1000 μs optimal. Allerdings sind hier die Rußemissionen am höchsten. Der beste Kompromiss zwischen Verbrennungsgeräusch und Rußmasse im Abgas ergibt sich für Messung und Simulation offenbar bei einer hydraulischen Pause von 1400 μs . Dieses Ergebnis zeigt sehr deutlich, dass die CFD-Simulation - wenn sorgfältig durchgeführt - die Brennverfahrensentwicklung sehr intensiv unterstützen kann.

6.4. Lokale Ergebnisse

Im Kapitel 6.3 wurden die globalen Ergebnisse vorgestellt, die mit den Rohemissionsmodellen, die im Rahmen dieser Arbeit entstanden sind, erzielt werden konnten. Der große Vorteil der CFD-Simulation besteht aber darin, dass sie Einblick in die Mischungs-, Verbrennungs- und Rohemissionsprozesse auf lokaler Ebene ermöglichen kann. Für die Brennverfahrensentwicklung ist es nicht nur wichtig zu wissen, ob mit einem bestimmten Brennverfahren mehr oder weniger Ruß entsteht, sondern auch warum. Es gilt zu verstehen, auf welche lokale Mischungs- oder Temperatureffekten diese Rohemissionsergebnisse zurückzuführen sind. Diese Erkenntnisse können experimentell nur schwer gewonnen werden. Mit Hilfe der CFD-Simulation kann ein Brennverfahren gezielt und kostengünstiger weiterentwickelt werden. Aus diesem Grund werden in diesem Kapitel lokale Ergebnisse vorgestellt, die mit dem Rußmodell erzielt werden konnten. Sie sollen zum einen zur Validierung bzw. Plausibilisierung des Modells dienen. Zum anderen sollen sie die Möglichkeiten aufzeigen, die die CFD-Rohemissionsmodellierung hinsichtlich Brennverfahrensentwicklung bietet.

6.4.1. Plausibilisierung der lokalen Ergebnisse

Die lokalen Ergebnisse eines CFD-Rohemissionsmodells zu plausibilisieren ist keine einfache Aufgabe. Insbesondere fehlt eine Referenz, mit der die lokalen Ergebnisse verglichen werden können. Aus diesem Grund wird in diesem Kapitel eine sehr einfache Plausibilisierung angeboten, die auf der klassischen Betrachtungsweise basiert. Diese kann relativ kurz beschrieben werden: Ruß wird in fetten heißen Bereichen gebildet, während die Oxidation in mageren heißen Bereichen stattfindet. Die AGR-Variation, die im Kapitel 6.3.1 vorgestellt wurde, eignet sich sehr gut für diese einfache Plausibilisierung des Rußmodells. Dabei können die beiden unterschiedliche Effekte beobachtet werden, die die Rußbildung im Wesentlichen beeinflussen: Luft-Kraftstoff-Mischung und Verbrennungstemperatur. Das globale Luftverhältnis ist je nach AGR-Rate anders, woraus unterschiedliche lokale Luftverhältnisse und unterschiedliche Verbrennungstemperaturen resultieren. Für die Plausibilisierung des Rußmodells wurde der Punkt bei $p_{me} = 14$ bar herangezogen, der die höchste AGR-Rate und die höchste Rußmasse im Abgas aufweist (s. Abb. 6.11).

Um die Plausibilität der Rußmodellergebnisse hinsichtlich lokalen Luftverhältnisses zu demonstrieren, wurde eine Schnittebene durch die Strahlmitte visualisiert (s. Abb. 6.20). Diese wurde auf der linken Seite mit dem lokalen Mischungsbruch und auf der rechten Seite

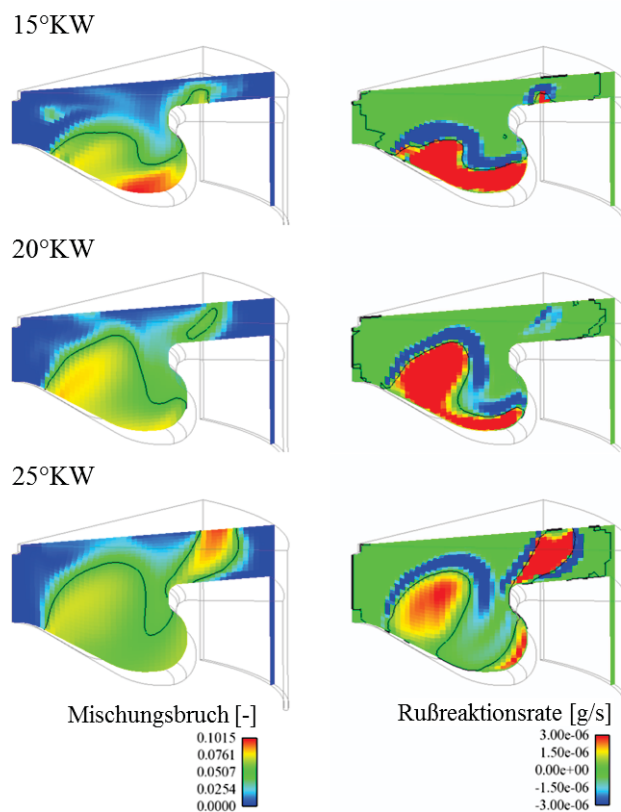


Abbildung 6.20.: Lokales Luftverhältnis und lokale Rußreaktionsraten für Validierungspunkt 9 in unterschiedlichen Phasen der Verbrennung

mit der gesamten Rußreaktionsrate eingefärbt. Letztere entspricht der Summe aller Rußreaktionsraten: Nukleation, Oberflächenwachstum, Fragmentierung und Oxidation. Des Weiteren verläuft auf beiden Seiten der Abbildung 6.20 jeweils eine schwarze Linie durch die Schnittebene. Diese stellt auf der linken Seite den stöchiometrischen Mischungsbruch dar. Die Linie auf der rechten Seite verbindet Zellen, in denen die lokale Gesamtrußreaktionsrate gleich 0 ist, also Rußbildung und Rußoxidation im Gleichgewicht sind.

Abb. 6.20 liefert letztlich den Nachweis, dass sich das Rußmodell hinsichtlich lokalen Luftverhältnisses plausibel verhält. Es ist klar zu erkennen, dass die Rußbildung nur in fetten Gemischbereichen stattfindet. Dies ist sehr deutlich bei 25°KW zu sehen, wo die Ansammlungen von fetten Zellen sehr genau den Ansammlungen von Zellen entsprechen, in denen Rußbildung stattfindet. Die Rußoxidation zeigt auch ganz plausibles Verhalten. Sie findet nur am Rand der Rußwolke statt und zwar nur in mageren Bereichen.

Rußbildung und Rußoxidation hängen bekannterweise nicht nur vom lokalen Luftverhältnis ab. Sie sind außerdem stark temperaturabhängige Prozesse. Aus diesem Grund ist es wichtig, dass das Rußmodell diese Abhängigkeit korrekt wiedergibt. Um dies zu belegen, wird hier nochmals der Validierungspunkt 9 herangezogen.

In Abb. 6.21 sind für unterschiedliche Zeitpunkte die Zellen dargestellt, die nennenswerten Rußmassenbruch (größer 10^{-6}) aufweisen. Auf der linken Seite sind diese Zellen mit der gemittelten Zelltemperatur eingefärbt und auf der rechten Seite – mit der Summe aller

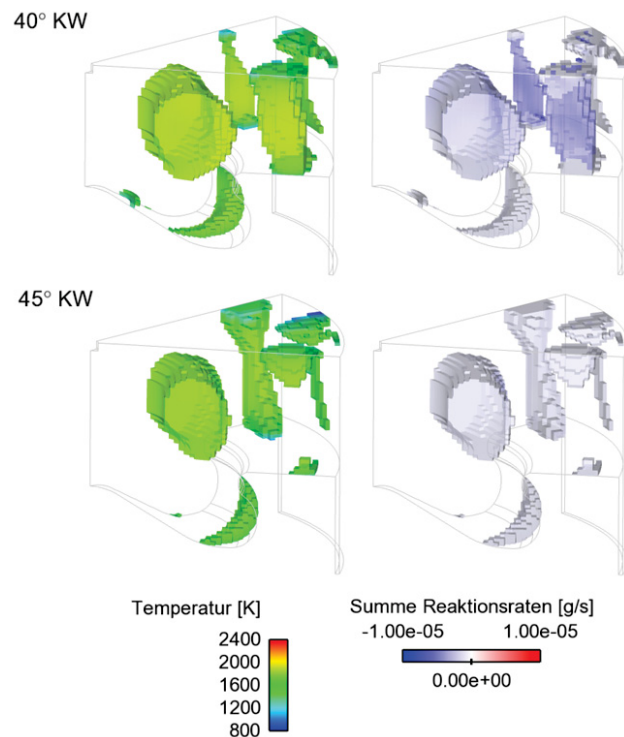


Abbildung 6.21.: Lokale Temperaturen und lokale Rußreaktionsraten für Validierungspunkt 9 in unterschiedlichen Phasen der Verbrennung

Rußreaktionsraten. Auf Abb. 6.21 ist zu erkennen, dass bei 40°KW noch Rußreaktionen stattfinden. Zu diesem Zeitpunkt ist das Gemisch weitestgehend abgemagert, weswegen hier die Rußoxidation überwiegt. Dies ist an der blauen Farbe am Rande der Rußwolke zu sehen. Die lokalen Temperaturen an diesen Stellen betragen ca. 1800 K. Bei Temperaturen in dieser Höhe ist Rußoxidation durchaus zu erwarten. Bei 45°KW sind die Mitteltemperaturen der Zellen, die nennenswert Ruß enthalten, bereits unter 1600 K gefallen. In diesen Temperaturregionen wird die Rußoxidation weitestgehend unterbunden. Das Modell bildet dieses Einfrieren der Rußoxidation sehr gut ab: alle Zellen bei 45°KW weisen eine akkumulierte Rußreaktionsrate, die quasi 0 ist. Damit kann die Plausibilität des Modells auch hinsichtlich lokaler Temperaturen als erwiesen betrachtet werden.

6.4.2. Vergleich mit Transparentmotoraufnahmen

Im Kapitel 6.3 wurde gezeigt, dass das Rußmodell, das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, verbrennungsmotorische Phänomene korrekt abbildet, die von Interesse der Brennverfahrenentwicklung sind. Insbesondere korrelieren die berechneten Rußmassen im Abgas sehr gut mit den gemessenen Rußmassen. Im Kapitel 6.4.1 wurde aufgezeigt, dass das Rußmodell plausibles Verhalten aufweist, wenn die lokalen Luftverhältnisse und die lokalen Temperaturen betrachtet werden. In diesem Kapitel soll der letzte Schritt seiner Validierung erläutert werden: der Vergleich mit Rußleuchtaufnahmen von einem Transparentaggregat. Die Analyse dieser Rußleuchtaufnahmen ist ein sehr wichtiges diagnostisches Werkzeug der Brennverfahrensentwicklung. Das Aggregat, das dabei zum Einsatz

kommt, entspricht vollständig dem tatsächlichen Motor mit Ausnahme eines durchsichtigen Kolbens, durch den die optische Aufnahme des Rußleuchtens möglich ist. Der Vergleich zwischen den Transparentaggregataufnahmen und dem Rußsimulationsergebnis erfordert die Modellierung des Rußleuchtens in der Simulation, die in diesem Kapitel erläutert wird.

Bei der Dieselerverbrennung entstehen Rußpartikel, die ab einer bestimmten Temperatur Licht im sichtbaren Bereich abstrahlen [106]. Dieses Rußleuchten besitzt eine hohe Intensität, die eine integrale Aufzeichnung von Lichtemission und die Aufnahme von Bildern des Rußleuchtens ermöglicht. Aus diesen Bildern lassen sich Strömungsphänomene und verschiedene Effekte auf die Gemischbildung, Luftausnutzung und den Rußausbrand ableiten, sowie eine Verteilung der Rußtemperatur und der spezifischen Rußkonzentration rechnerisch ermitteln [106].

Die Rußstrahlungsemission bei der dieselmotorischen Verbrennung kann auf Phänomene der thermischen Gasstrahlung, der Chemilumineszenz und der Festkörperstrahlung zurückgeführt werden. Das Spektrum der Rußstrahlung entspricht dem Spektrum eines realen Temperaturstrahlers. Die einzelnen Atome eines Rußteilchens beeinflussen sich so stark, dass sie ein kontinuierliches Spektrum mit unterschiedlichsten Wellenlängen erzeugen. Das Absorptions- und Emissionsverhalten von Ruß ist dabei wellenlängenabhängig [115]. Dies resultiert aus der Beugung des Lichts an den kolloiden Teilchen des feindispersen Systems, das im Falle der dieselmotorischen Verbrennung vorliegt. Die Wellenabhängigkeit wird im Wesentlichen vom Verteilungsgrad der Rußteilchen in der Flamme bestimmt [116]. Die Rußkonzentration ändert sich im Laufe des Verbrennungszyklus, weswegen sich auch das Emissionsverhalten ändert. Dank der hohen Intensität des Rußleuchtens ist eine transiente Aufzeichnung von Lichtemission in ausgewählten Spektralbereichen und die Aufnahme von Bildsequenzen mit einer Hochgeschwindigkeitskamera möglich. Dies kann beispielsweise mit dem Aufbau erfolgen, der in Abb. 6.22 dargestellt ist.

Für die Validierung des Rußmodells, das im Rahmen dieser Arbeit entstanden ist, kam ein ähnlicher Aufbau zum Einsatz wie in Abb. 6.22 dargestellt. Damit konnten Bildsequenzen aufgenommen werden, die das Rußleuchten und damit das Verbrennungsverlauf visualisieren. Der Schwerpunkt lag dabei auf der Spritzbeginnvariation, die im Kapitel 6.3.3 vorgestellt wurde. Für eine tiefer gehende Untersuchung der dabei auftretenden Rußphänomene wurden die Betriebsparameter wie globales Luftverhältnis λ , Spritzbeginn usw. genau so eingestellt, wie auch am 1-Zylinder-Aggregat. Drei beispielhafte Aufnahmen des Rußleuchtens, die dabei entstanden sind, sind in Abb. 6.23 zu sehen.

Für eine Validierung des Rußmodells anhand dieser Rußleuchtaufnahmen muss das Simulationsergebnis weiter verarbeitet werden. Dazu wird der Ansatz von Shaw et al. aus [117] herangezogen. Nach [117] gilt für grauen Strahler:

$$M_v = \varepsilon_s \sigma T_s^4 \quad \text{mit} \quad \sigma = 5,670373 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4} \quad (6.2)$$

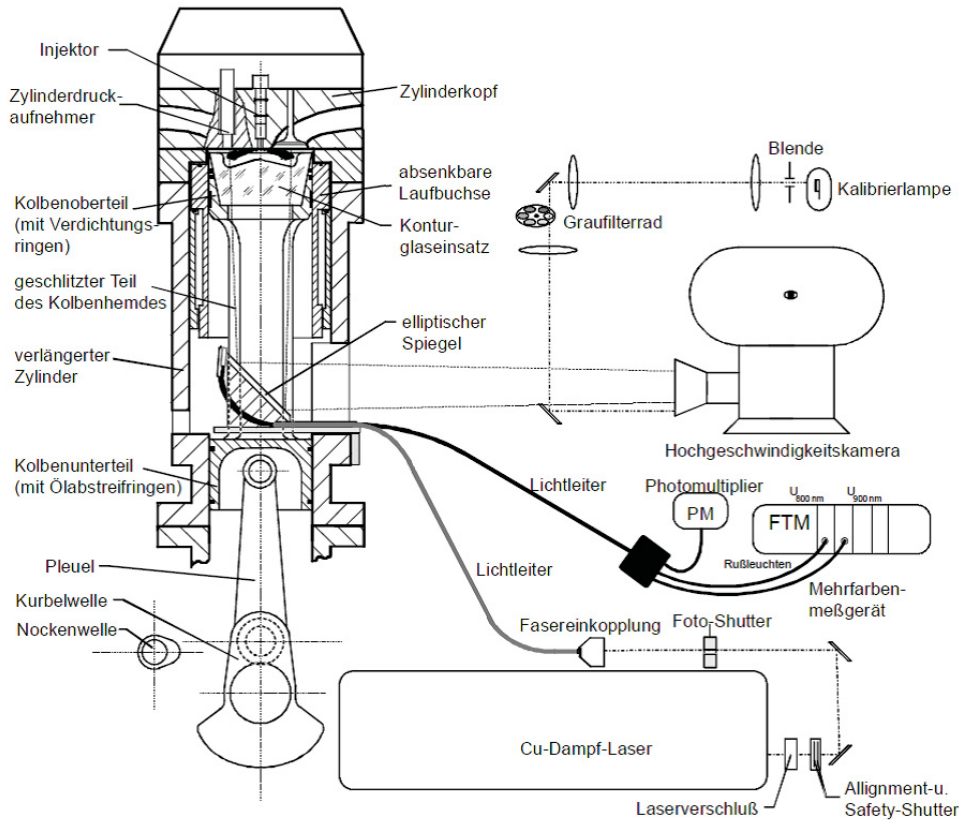


Abbildung 6.22.: Diesel-Transparentaggregat mit optischem Aufbau [106],
Nachdruck genehmigt von Dr. Bertsch

Des Weiteren kann der Emissionsgrad ε_s wie folgt berechnet

$$\varepsilon_s = 1 - \left(1 + \frac{k}{C_2} f_v r_s T_s \right)^{-4} \quad (6.3)$$

und daraufhin zu

$$\varepsilon_s \approx 4 \frac{k}{C_2} f_v r_s T_s \quad (6.4)$$

vereinfacht werden.

Dabei kann für den Partikelradius einen Mittelwert von 100 nm angenommen werden. Nach [118] kann außerdem das Verhältnis k/C_2 mit $350 \text{ m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ gut approximiert werden. Die restlichen Größen für die Berechnung des Emissionsgrades ε_s – der Rußvolumenbruch f_v und die Gastemperatur T_s – liegen als Ergebnis der CFD-Simulation vor. Die spezifische Lichtausstrahlung des Rußes ist weiterhin mit

$$Q_{rad,s} = f_v M_v \quad (6.5)$$

angegeben. Mit der in Gleichungen 6.1 bis 6.5 vorgestellten Berechnungsmethodik kann

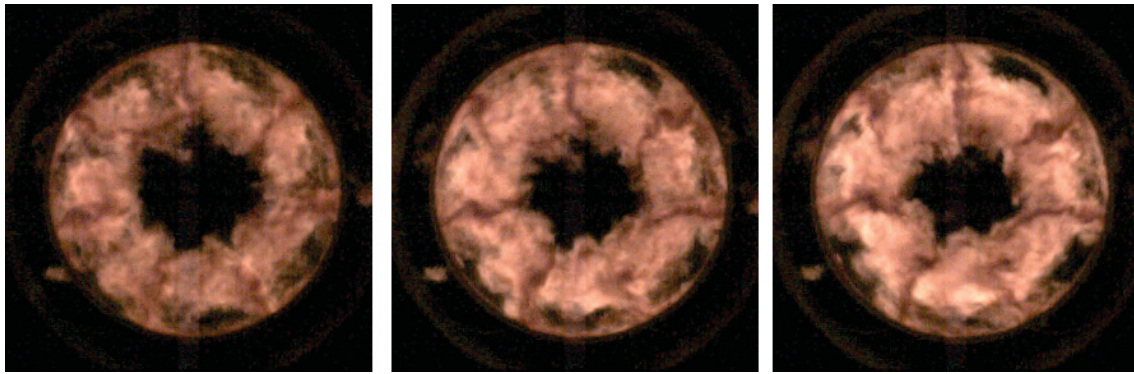


Abbildung 6.23.: Rußleuchtaufnahmen bei 5°KW, 6°KW und 7°KW für $SB = -7.5^\circ KW$

die Lichtausstrahlung in der Simulation berechnet werden. In einem letzten Schritt müssen diese Rechenergebnisse visualisiert werden. Das Ziel dieser Visualisierung ist letztendlich die Simulationsergebnisse mit den Rußleuchtaufnahmen am Transparentaggregat optisch vergleichen zu können. Letztere wurden – wie bereits erläutert – mit einer Hochgeschwindigkeitskamera aufgenommen, die vor jeder Messreihe mittels einer Halogenlampe in einer Ulbrichtkugel kalibriert wird. Solch eine Kalibrierung ist für das Post-Processing der Simulationsergebnisse nicht möglich. Aus diesem Grund muss die Farbskala hier so gestaltet werden, dass die resultierenden Simulationenbilder mit den Rußleuchtaufnahmen am Transparentaggregat verglichen werden können. Außerdem muss das Fluidvolumen in verschiedene Zellgruppen unterteilt werden, um die Temperaturabhängigkeit der Rußstrahlung zu berücksichtigen. Erstens werden nur Zellen visualisiert, deren Rußvolumenbruch mindestens 10^{-6} beträgt. Zellen mit niedrigeren Konzentrationen werden nicht berücksichtigt, da die Intensität der Rußstrahlung in diesen Zellen vernachlässigt werden kann. Weiter werden diese Zellen in zwei Gruppen unterteilt: solche, deren Massenmitteltemperatur unter einer definierten Temperaturschwelle für Rußstrahlung liegt und solche, deren Massenmitteltemperatur höher als dieser Schwellenwert ist. Aufgrund der zu niedrigen Temperatur emittieren die Rußpartikel in den Zellen aus der ersten Gruppe keine Strahlung. Im Post-Processing werden diese Rußpartikel als schwarz und nicht strahlend modelliert. Deren Transparenz hängt wiederum vom Rußvolumenbruch ab. Die Lichtausstrahlung der Rußpartikel in Zellen, deren Mitteltemperatur oberhalb der Rußstrahlungstemperaturschwelle liegt, kann mit Gl. 6.5 berechnet werden. Je nach Rußvolumenbruch und Zelltemperatur kann die Lichtausstrahlung so hoch werden, dass die Zellen als optisch dicht modelliert werden.

Mit der hier erläuterten Auswertemethodik wurden für die zwei markantesten Punkte aus der Spritzbeginnvariation (s. Tab. 6.2) – $SB = -7.5^\circ KW$ und $SB = 2.0^\circ KW$ – Simulationsrußstrahlungsbilder erstellt. In Abb. 6.24 ist ein Vergleich zwischen den Aufnahmen im Transparentaggregat zu den Rußleuchtenbildern aus der Simulation dargestellt.

Die Rußleuchtaufnahmen in Abb. 6.24 veranschaulichen die erste Verbrennungsphase im Falle von $SB = -7.5^\circ KW$. Bei 3°KW werden die ersten Rußpartikel in der Messung sichtbar. Diesen Zeitpunkt wird vom Modell sehr gut abgebildet. Bei 4°KW sind größere Ruß-

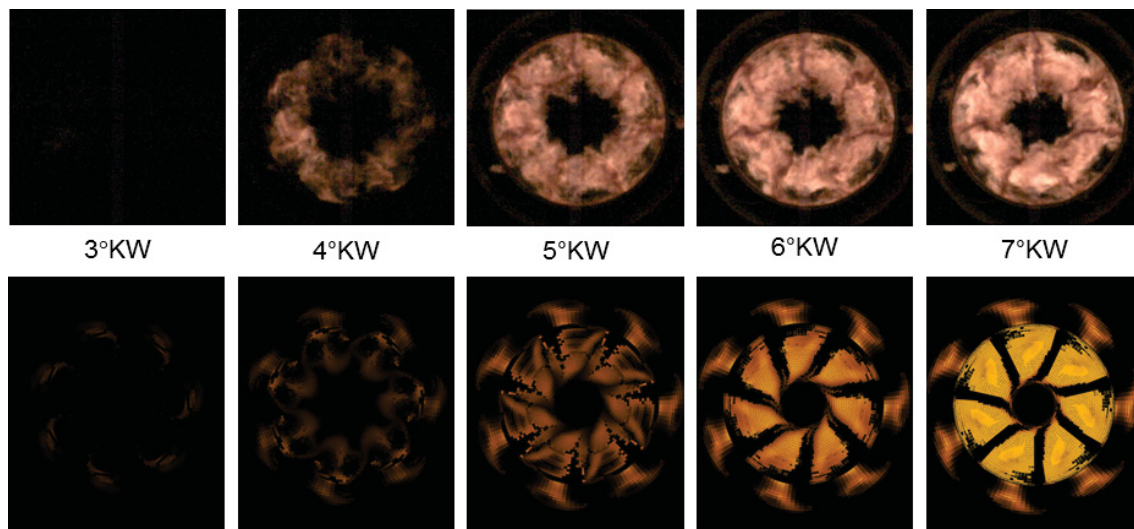


Abbildung 6.24.: Rußleuchtaufnahmen im Transparentaggregat (oben) und Rußleuchten in der Simulation (unten) bei 3°KW bis 7°KW für $SB = -7.5^\circ\text{KW}$

bereiche sichtbar. Die Lage, Struktur, Ausprägung und Strahlungsintensität der Rußwolke in der Simulation zu diesem Zeitpunkt entspricht ziemlich genau denselben der Rußwolke im Transparentaggregat. Die kleinen schwach leuchtenden Rußherde im Quetschspalt sind nur im Simulationsbild zu sehen. Die Kamera kann allerdings diese Bereiche im Transparentaggregat schlecht erfassen. Die Lichtbrechung und insbesondere das starke Rußleuchten in der Kolbenmulde machen Rußleuchten an dieser Stelle praktisch unsichtbar. Das gilt auch für die darauf folgenden Aufnahmen bei 5°KW, 6°KW und 7°KW. Bei 7°KW sind die Verbrennungszonen, die aus den einzelnen Einspritzstrahlen resultieren, sehr deutlich zu sehen. Diese Zonen sind durch kleine stegartige Rußwolken getrennt, die offensichtlich kalt sind und deswegen nicht strahlen. Weiterhin kann in der Mitte jeder Wolke eine sehr stark strahlende Rußzone betrachtet werden, die offenbar sehr heiß ist. Auch diese Verbrennungs- und Rußphänomene werden sehr gut vom Modell wiedergegeben. Abb. 6.24 stellt insgesamt ein sehr bemerkenswertes Ergebnis dar, das die Funktionalität des gesamten CFD-Pakets unter Beweis stellt. Die Simulationswerkzeuge sind in der Lage, den Zündverzug, die Zündung, Mischung und Verbrennung so abzubilden, dass das Rußmodell die lokale Rußkonzentration korrekt wiedergibt.

In Abb. 6.25 sind 5 weitere Transparentaggregataufnahmen und die dazu gehörige Simulationsbilder, die die Fähigkeit des CFD-Pakets illustrieren, Verbrennung und Rußemissionen korrekt abzubilden. In dieser Abbildung sind die entsprechenden Bilder zu 9°KW, 14°KW, 19°KW, 24°KW und 34°KW (35°KW in der Simulation) dargestellt. Bei 9°KW und 14°KW können Lage, Struktur, Ausprägung und Strahlungsintensität der Rußwolke in der Simulation sehr gut wiedergegeben werden. Speziell die stark strahlenden Bereiche weisen im Transparentaggregat und in der Simulation sehr ähnliche Form und Position in der Mulde. Im weiteren Verlauf der Verbrennung nehmen die Unregelmäßigkeiten der Form der Rußwolke im Transparentaggregat deutlich zu. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Strömungsverhältnisse im Zylinder vor der Einspritzung und insbesondere das

Spraybild nicht vollkommen rotationssymmetrisch sind. Im CFD-Setup kann dagegen nur von Rotationssymmetrie ausgegangen werden. Eine Berücksichtigung dieser Unregelmäßigkeiten kann insbesondere im Sektornetz nicht stattfinden. Dementsprechend sind die Rußleuchtenbilder in der Simulation sehr symmetrisch und unterscheiden sich damit von den Aufnahmen am Transparentaggregat. Insgesamt können aber die Intensität der Rußstrahlung und insbesondere das Ende des Rußleuchtens gut wiedergegeben werden.

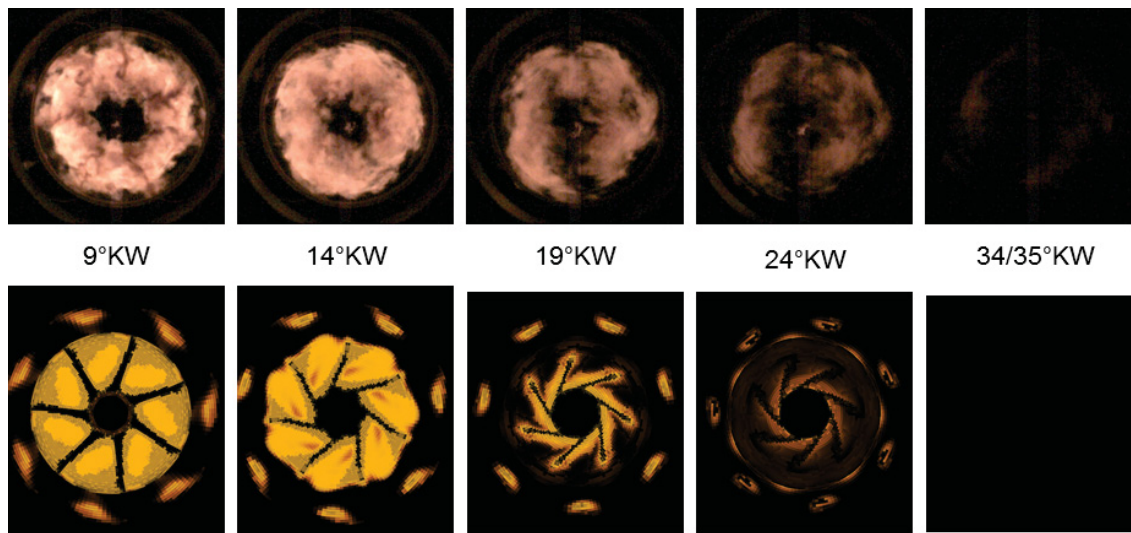


Abbildung 6.25.: Rußleuchtaufnahmen im Transparentaggregat (oben) und Rußleuchten in der Simulation (unten) bei 9°KW, 14°KW, 19°KW, 24°KW und 34/35°KW für $SB = -7.5^\circ KW$

Die Farbgebung für die Erstellung der Simulationsrußstrahlungsbilder wird vom Anwender definiert. Sie ist somit subjektiv und kann die Qualität des Post-Processings erheblich beeinflussen. Aus diesem Grund wurden mit den gleichen Farbeinstellungen Simulationsrußstrahlungsbilder für den Betriebspunkt $SB=2.0^\circ KW$ erstellt. Diese sollen als weitere Validierung der Fähigkeit des Modells dienen, korrekt die lokalen Rußkonzentrationen abzubilden. Aufgrund der sehr späten Verbrennungslage sind die Verbrennungstemperaturen in diesem Betriebspunkt sehr niedrig. Dementsprechend wird auch sehr wenig Ruß gebildet (s. Kapitel 6.3.3). Die Rußstrahlung soll deshalb sehr schwach sein, da sie von der Rußkonzentration und der Verbrennungstemperatur direkt abhängt. Die Rußstrahlungsbilder vom Transparentaggregat bestätigen das erwartete Verhalten. Die Rußwolken sind deutlich kleiner und deutlich dunkler im Vergleich zu denselben im Betriebspunkt $SB=-7.5^\circ KW$. Die kalten Rußstreifen, die die Verbrennungszonen trennen, die aus den jeweiligen Einspritzstrahlen resultieren sind erheblich größer. Da der Zündverzug mit ca. $15^\circ KW$ sehr lang ist, sind die bereits beschriebenen Unregelmäßigkeiten der Form der Rußwolke sehr stark ausgeprägt. Mit Ausnahme dieser Unregelmäßigkeiten gibt das Rußmodell auch diese Rußphänomene sehr gut wieder. Der Zeitpunkt, ab dem der Ruß anfängt, sichtbar zu strahlen, korreliert sehr gut mit demselben im Transparentaggregat. Die Form und die Intensität der Rußstrahlung von den wenigen Zonen mit etwas stärkerer Rußstrahlung – am deutlichsten bei $21^\circ KW$ und $22^\circ KW$ zu sehen – werden gut wiedergegeben.

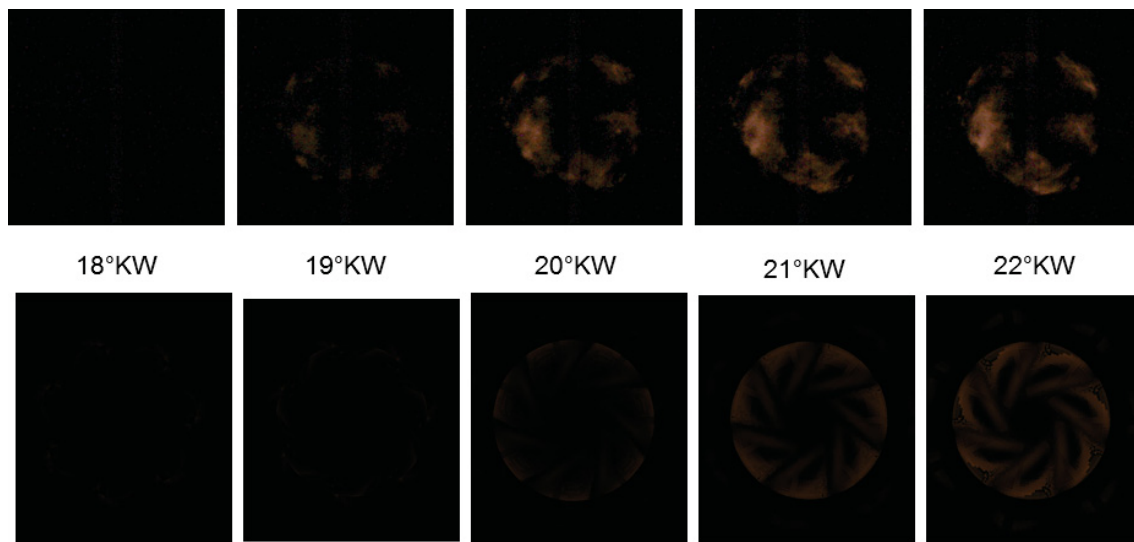


Abbildung 6.26.: Rußleuchtaufnahmen im Transparentaggregat (oben) und Rußleuchten in der Simulation (unten) bei 19°KW bis 22°KW für $SB = 2.0^\circ\text{KW}$

Auch für $SB=2.0^\circ\text{KW}$ werden 5 weitere Aufnahmen von späteren Zeitpunkten gezeigt, die die Endphase des Rußstrahlens darstellen (s. Abb. (6.27)). Hier zeichnet sich das gleiche Bild wie für $SB=-7.5^\circ\text{KW}$. In den späteren Phasen der Verbrennung wird die Form der strahlenden Rußwolken in der Simulation immer regelmäßiger im Vergleich zu den Aufnahmen am Transparentmotor. Der Zeitpunkt, zu dem keine Rußstrahlung mehr sichtbar ist, korreliert aber auch hier sehr gut mit demselben im Transparentaggregat.

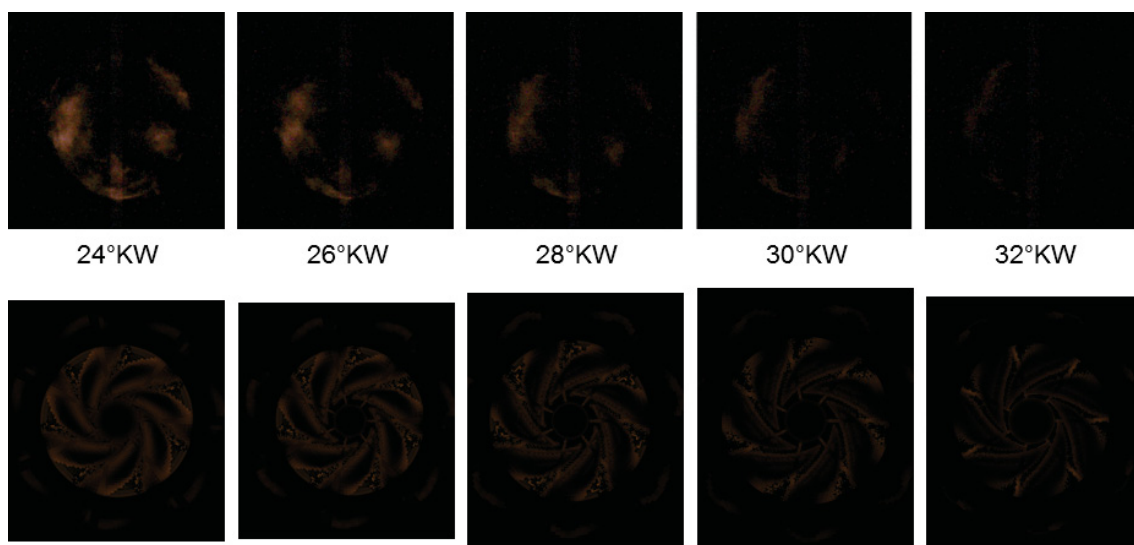


Abbildung 6.27.: Rußleuchtaufnahmen im Transparentaggregat (oben) und Rußleuchten in der Simulation (unten) bei 24°KW bis 32°KW für $SB = 2.0^\circ\text{KW}$

Die Ergebnisse für $SB=2.0^\circ\text{KW}$ zeigen nochmals, dass das Rußmodell, das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, nicht nur in der Lage ist, die globale Rußmasse im Abgas wiederzugeben, sondern auch die lokalen Rußkonzentrationen korrekt abzubilden. Vor

diesem Hintergrund stellt sich die Frage, warum die Rußmassenverläufe für die Spritzbeginnvariation (s. Kapitel 6.3.3) keine ausgeprägte Rußbildungs- und Rußoxidationsphase aufweisen. Dies ist nämlich die Erwartungshaltung angesichts der Ausprägung der sogenannten KL-Verläufe. Letztere sind das Endprodukt der Transparentmotoruntersuchungen und besitzen ähnliche Bedeutung in der optischen Verbrennungsdiagnostik wie die Rußmodellierung in der CFD-Simulation.

6.4.3. Vergleich mit KL-Verläufen

Die Rußstrahlungsbilder am Transparentmotor, die im Kapitel 6.3.2 vorgestellt wurden, sind ein sehr wichtiges diagnostisches Werkzeug in der Brennverfahrensentwicklung. Diese Bilder alleine lassen sich allerdings nur schwer miteinander vergleichen, da die Farbtintensität der einzelnen Punkte ähnlich ausgeprägt und für das menschliche Auge schwierig zu unterscheiden ist. Um diese Bilder quantitativ miteinander vergleichen zu können, ist eine Vorschrift notwendig, die diesen zweidimensionalen Bildern einen integralen Wert zuordnet, der die Strahlungsintensität repräsentieren soll. Dies ist die zugrunde liegende Idee bei der Bestimmung der sogenannten KL-Verläufe. Die Vorgehensweise, die dabei angewandt wird, wird im Anhang B kurz beschrieben.

Im Kapitel 6.4.2 wurde gezeigt, dass die Rußleuchtenbilder in der Simulation sehr gut zu denselben am Transparentaggregat korrelieren. Dies war allerdings ein qualitativer Vergleich. Um die Rußleuchtenbilder miteinander vergleichen zu können, ist wie bereits erwähnt eine Vorschrift notwendig, die dem Bild einen integralen Wert zuordnet, der die Intensität des Rußleuchtens beschreiben soll. Mit einem wie oben beschrieben kalibrierten Aufbau können anhand der gemessenen Diodenspannung die relative Rußkonzentration nach Gl. 7.7 (s. Anhang B) und somit die KL-Verläufe berechnet werden. Nun stellt sich die Frage, wie aus den Simulationsbildern einen KL-Verlauf berechnet werden kann. Eine Strahlungsdichtekalibrierung ist im Falle der CFD-Simulation keineswegs möglich. Also ist der direkte Vergleich zu den KL-Verläufen, die am Transparentmotor ermittelt wurden nicht möglich. Eine Berechnung der relativen Rußkonzentration für die Simulation nach Gl. 7.7 (s. Anhang B) ist denkbar. Für die Wellenlänge kann die gleiche Wellenlänge herangezogen werden, mit der am Transparentmotor gemessen wurde (900 nm). Die Temperatur ist aus dem Ergebnis der CFD-Rechnung ebenfalls bekannt. Für die Berechnung der spektralen Strahlungsdichte müssen allerdings weitere Annahmen bzgl. des Emissionsverhältnisses getroffen werden:

$$\varepsilon(\lambda) = 1 - \exp\left(-\frac{q * cr * s}{\lambda^n}\right) \quad (6.6)$$

Dabei ist:

$\frac{q}{\lambda^n}$: molarer Extinktionskoeffizient	$[\text{m}^2 * \text{mol}^{-1}]$
n	: Konstante = 1.39	[1]
cr	: Rußkonzentration	$[\text{mol} * \text{m}^{-3}]$
s	: Schichtdicke der rußenden Flamme	[m]
$\varepsilon(\lambda)$: Emissionsverhältnis	
λ	: Wellenlänge	[m]

Im Einzelnen sind der molare Extinktionskoeffizient und die Schichtdicke der rußenden Flamme nicht bekannt. Auch wenn an dieser Stelle realistische Annahmen getroffen werden können, muss das Ergebnis dieser Rechnung – die Strahlungsdichte – weiter verarbeitet werden. Insbesondere könnte damit die Strahlungsdichte für jede CFD-Zelle berechnet werden. Die Simulationsrußstrahlungsbilder, die im Kapitel 6.4.2 vorgestellt wurden, wurden erstellt, indem das CFD-Sektornetz rotationssymmetrisch versiebenfacht und aus der gleichen Perspektive wie am Transparentmotor („von unten“) betrachtet wurde. Die gleiche Vorgehensweise sollte auch hier angewandt werden. Damit werden aber nur die Wandzellen des Kolbens und des Feuerstegs „sichtbar“. Die Lichtstrahlungsdichte dieser Zellen zu berechnen und nur damit einen KL-Wert zu diesem Rußstrahlungsbild zu berechnen ist falsch. Denn im Transparentmotor tragen nicht nur die Bereiche in unmittelbarer Kolbenwandnähe zu der gemessenen Lichtstrahlungsdichte bei. Rußwolken, die sich in der Mulde befinden tragen aufgrund der höheren Temperatur noch mehr dazu bei. Konsequenterweise muss die Lichtstrahlungsdichte in allen Zellen bei der Berechnung der gesamten Lichtstrahlungsdichte berücksichtigt werden. Doch mit welcher Gewichtung soll die Lichtstrahlungsdichte von Zellen, die aus der gleichen Perspektive wie am Transparentmotor („von unten“) nicht sichtbar sind, in die Berechnung der gesamten Lichtstrahlungsdichte einfließen? Schließlich sind solche Zellen verdeckt von Zellen, die vielleicht nicht so intensiv strahlen oder Licht absorbieren. Eine Definition der optischen Transparenz hinsichtlich Lichtstrahlungsdichte ist äußerst schwierig und nur mit sehr vielen Annahmen verbunden, die im Rahmen dieser Arbeit nicht ausreichend geprüft werden können. Dementsprechend ist eine Berechnung von KL-Verlauf in der Simulation im Sinne von Gl. 7.7 (s. Anhang B) mit sehr vielen Ungenauigkeiten behaftet und dadurch nicht zweckmäßig. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit ein anderer Ansatz verfolgt, der den quantitativen Vergleich zwischen den Rußstrahlungsbildern im Transparentaggregat und denselben in der Simulation ermöglichen soll. Der Ansatz folgt sehr direkt der zugrunde liegenden Idee bei der Berechnung von KL-Verläufen: jedem Rußstrahlungsbild einen integralen Wert zuordnen, der die Intensität des Rußleuchtens beschreibt. Im Einzelnen wurden die Rußstrahlungsbilder im Transparentaggregat und die Rußstrahlungsbilder in der Simulation in schwarz-weiße Bilder umgewandelt. Letztere zeichnen sich dadurch aus, dass die drei Werte für Rot-, Grün- und Blauanteil, die die Farbgebung eines jeden Pixels beschreiben, gleich sind. Damit kann die Farbintensität jedes einzelnen Pixels durch einen einzigen Wert beschrieben werden.

Dieser Wert kann im nächsten Schritt über alle Pixel integriert werden, woraus sich ein Wert ergibt, der die Intensität des Rußstrahlungsbildes zu diesem Zeitpunkt beschreibt. Dieses Prozedere wurde für alle Rußstrahlungsbilder vom Transparentmotor und in der Simulation durchgeführt. Daraufhin wurden die Simulationsverläufe normiert, indem sie mit einem konstanten Faktor multipliziert wurden. Das Ergebnis ist in Abb. 6.28 dargestellt.

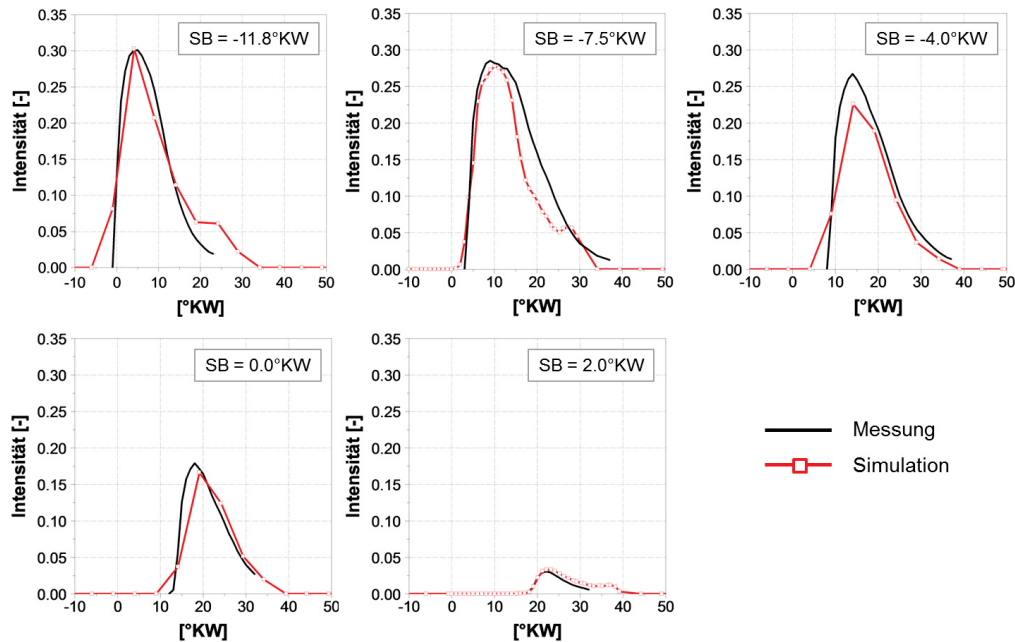


Abbildung 6.28.: Intensität der Rußstrahlungsbilder vom Transparentmotor und in der Simulation für die Spritzbeginnvariation

Abb. 6.28 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Messung am Transparentaggregat und in der Simulation. Die aufintegrierte Intensität im Falle von $SB = -11.5^\circ KW$ weist eine Unstetigkeit bei ca. $25^\circ KW$. Ähnliches Verhalten kann im Falle von $SB = -7.5^\circ KW$ und Falle von $SB = 2.0^\circ KW$ beobachtet werden. Dieses ist auf intensiv strahlende Rußwolken im Quetschspalt zurückzuführen. Die Frage nach der Plausibilität dieser Verläufe kann nicht mit Sicherheit beantwortet werden. Die Quetschspaltbereiche des Transparentmotors können wie bereits erwähnt nicht optimal erfasst werden, weswegen die Existenz solcher Rußwolken in der Realität nicht ausgeschlossen werden kann.

Das Ergebnis in Abb. 6.28 ist in zweierlei Hinsicht von großer Bedeutung. Erstens zeigt es, dass die Rußstrahlungsintensität in der Simulation sehr gut mit derselben in der Messung am Transparentaggregat übereinstimmt. In den vorherigen Kapiteln wurde gezeigt, dass das Rußmodell in der Lage ist, die absolute Rußmasse im Abgas korrekt wiederzugeben, die lokalen Rußreaktionsraten plausibel zu berechnen und die lokalen Rußkonzentrationen korrekt abzubilden. In diesem Kapitel wurde gezeigt, dass die aufintegrierte Rußstrahlungsintensität auch sehr gut wiedergegeben wird. Somit kann das Rußmodell, das in dieser Arbeit entwickelt wurde, als vollständig validiert betrachtet werden. Zweitens beantwortet das Ergebnis in Abb. 6.28 eine Frage, die schon im Kapitel 6.3.3 gestellt wurde: sind die Rußmassenverläufe ohne ausgeprägte Rußbildungs- und Rußoxidationsphase rea-

listisch? Bei KL-Verläufen, die oftmals als Rußmassenverläufe missinterpretiert werden, sind ausgeprägte Rußbildungs- und Rußoxidationsphasen geläufig. Abb. 6.28 zeigt sehr eindeutig, dass der direkte Vergleich zwischen KL-Verlauf und Rußmassenverlauf nicht zulässig ist. Insbesondere beschreibt der KL-Verlauf eine optisch erfassbare Lichtintensitätsgröße, während der Rußmassenverlauf Masse darstellt. Wenn der korrekte Vergleich zwischen den Lichtintensitäten gezogen wird, korreliert das Simulationsergebnis in seiner Ausprägung sehr gut mit der Messung, auch wenn der Rußmassenverlauf keine ausgebildete Rußbildungs- und Rußoxidationsphase aufweist. Diese Erkenntnis ist sehr wichtig und soll bei zukünftigen Interpretationen von diagnostischen und simulatorischen Ergebnissen immer beachtet werden.

6.5. Eignung Steady-State-Flamelet-Ansatz zur dieselmotorischen Emissionssimulation

Der Steady-State-Flamelet-Ansatz hat eine Reihe von Vorteilen. Damit können Verbrennungsfragestellungen unter Berücksichtigung von detaillierter Chemie zu akzeptablen CPU-Kosten beantwortet werden. Dies ist deswegen möglich, weil die detaillierte Chemie a priori gelöst und tabelliert wird, wodurch sich CPU-Zeit während der Verbrennungssimulation sparen lässt. Daraus resultiert aber auch ein Nachteil des Ansatzes: die nicht optimale Berücksichtigung von transienten Effekten und Wärmeübergangsphänomenen [51]. Diese beeinflussen aber entscheidend die Rohemissionsbildung, weswegen die Frage nach der Eignung von Steady-State-Flamelet-Modellen zur dieselmotorischen Emissionssimulation durchaus berechtigt ist. In diesem Unterkapitel soll diese Frage auf Basis der Entwicklungsschritte und Ergebnisse dieser Arbeit beantwortet werden. Darin besteht einer der wesentlichen wissenschaftlichen Beiträge der vorliegenden Arbeit.

Transiente Effekte treten hauptsächlich während der Zündung des Gasgemisches auf. Während der Zündung ist die Rußbildung jedoch gering, so dass die Verbrennungsphase hinsichtlich Rußbildung vernachlässigt werden kann. Damit lassen sich die Gasphasenspezies und die Temperatur in der späten Phase der Verbrennung relativ genau aus den stationären Flamelets ermitteln. Der Rußbildungs- und -oxidationsprozess ist chemisch langsam. Dementsprechend kann die Rußkonzentration selbst nicht aus der Bibliothek entnommen werden. Es können jedoch die Oberflächenspezifischen Bildungs- und Oxidationsraten aus der Temperatur und Gasphasenkonzentration in einer Flameletbibliothek ermittelt werden.

Eine weitere Schwierigkeit von Steady-State-Flamelet-Modellen ist die starke Abnahme der skalaren Dissipationsrate entlang der Strahlachse, wodurch die Flameletlösung und die Qualität der Verbrennungssimulation erheblich beeinflusst werden [128]. Aus diesem Grund wurden unterschiedliche Modifikationen des Flamelet-Modells vorgeschlagen [207, 208, 209]. In dieser Arbeit wurde dagegen ein anderer Ansatz verfolgt. Für die Verbrennungssimulation wurde ein 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodell angewandt [10], das transiente Effekte bei der Zündung abbilden kann. Das Flamelet-Modell diente zur Erstellung der Ruß- und NO_x-Bibliotheken, mit deren Hilfe die Ruß- und NO-Quellterme berechnet wurden. Dadurch wurde die Modellierungsherausforderung auf die Kopplung

zwischen CFD-Code, Verbrennungs- und Rohemissionsmodell verlagert. Konsequenterweise wurde an dieser Stelle der höchste Modellierungsaufwand in dieser Arbeit betrieben.

Zunächst wurde die Notwendigkeit eines Acetylen-Feedbacks erkannt. In der Realität reagieren bestimmte Spezies schnell auf der Rußoberfläche und werden somit sehr schnell aufgebraucht. In der stationären Flamelet-Lösung finden sie allerdings nicht bei jedem Mischungsbruch einen Reaktionspartner. Eine dieser Spezies ist Acetylen, das maßgeblich das Oberflächenwachstum bestimmt. Bei niedrigen Verbrennungstemperaturen, wie z. B. bei Hoch-AGR-Verbrennung, ist das Oberflächenwachstum eine der Hauptquellen des Acetylenverbrauchs. Bei stationären Flamelet-Rechnungen kann dies nicht berücksichtigt werden, da das Oberflächenwachstum von der lokalen Rußoberfläche abhängt, die während der Flamelet-Rechnung nicht bekannt ist. Aus diesem Grund wurde in dieser Arbeit eine Acetylen-Rückkopplung zwischen CFD-Code und Rußmodell vorgeschlagen.

Des Weiteren wurde die Temperaturkopplung zwischen Verbrennungs- und Rohemissionsmodell verbessert. Die Enthalpieverluste in einem Verbrennungsmotor (geleistete Arbeit, Wandwärmeverluste, usw.) werden im Falle von Flamelet-Steady-State-Modellen durch die Oxidatorseitentemperatur berücksichtigt. In früheren Arbeiten mit dem Rußmodell von Mauß [15] wurde die Oxidatorseitentemperatur mit Hilfe einer linearen Enthalpieextrapolation im Mischungsbruchraum bestimmt [179]. Diese Methode ist für den Ansatz, der im Rahmen dieser Arbeit verfolgt wurde, allerdings nicht geeignet. Aufgrund von kalorischen Unterschieden zwischen dem reaktionskinetischen Modell, das für Flamelet-Rechnungen angewandt wurde, und dem 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodells resultiert die Enthalpieextrapolation in ungenauen Oxidatorseitentemperaturen. Aus diesem Grund war die Einführung des Temperatur-Profilen-Ansatzes ein sehr wichtiger Baustein dieser Arbeit. Bei diesem Ansatz wird die mittlere Zellentemperatur mit einer PDF gemittelten Flamelettemperatur verglichen, wodurch eine direkte Temperaturkopplung zwischen Verbrennungs- und Rohemissionsmodell geschaffen wird, die letztendlich eine korrekte Berechnung der chemischen Reaktionsraten gewährleistet.

Vor diesem Hintergrund kann die Frage, die am Anfang dieses Kapitels gestellt wurde – sind Steady-State-Flamelet-Modelle geeignet für verbrennungsmotorische Schadstoffsimulation – mit Einschränkungen positiv beantwortet werden. Die vorliegende Arbeit stellt diese Eignung unter Beweis. Die Rohemissionsergebnisse, die mit diesem CFD-Paket erreicht werden konnten, sind sehr zufriedenstellend. Diese Ergebnisse konnten aber nur durch die gezielt verbesserte Kopplung zwischen Verbrennungs- und Rohemissionsmodellen erreicht werden, die neben Acetylen-Feedback und TP-Ansatz weitere Fortschritte im Detail beinhalten (s. Kapitel 5). Diese Verbesserungen sind die Zusätze zum reinen Steady-State-Flamelet-Modell, die seine Nachteile kompensieren und seinen Einsatz für verbrennungsmotorische Schadstoffsimulation berechtigen.

6.6. Modellapplikation

In den vorherigen Unterkapiteln wurde die Fähigkeit des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Rußmodells demonstriert, das motorische Rußverhalten unter unterschiedlichen

Betriebsbedingungen wiederzugeben. Ein detailliertes Rußmodell soll allerdings nicht nur in der Lage sein, experimentelle Ergebnisse zu reproduzieren. Es soll außerdem die Optimierung von Betriebsstrategien oder Brennraumgeometrien ermöglichen. Zu diesem Zweck soll das Modell als erstes dazu beitragen, die physikalischen und chemischen Phänomene besser zu verstehen, die im Laufe der Verbrennung bzw. der Rußbildung stattfinden. In diesem Unterkapitel werden Variationen von Betriebsparametern, Merkmalen der Brennraumgeometrie sowie detaillierte Analysen von einigen Validierungsbetriebspunkten angeboten, anhand derer der Beitrag des Rußmodells zum besseren motorischen Verständnis beispielhaft illustriert wird.

6.6.1. Analyse der Rußphänomene bei einer Spritzbeginnvariation

Eine Verschiebung des Spritzbeginns führt zu deutlichen Unterschieden in den resultierenden Rußemissionen, auch wenn das globale Luftverhältnis konstant bleibt (s. Kapitel 6.3.3). Zahlreiche, zum Teil gegenläufige, motorische Phänomene führen zu diesem Verhalten. Die Verschiebung des Spritzbeginns nach spät bewirkt eine Verkürzung der Rußoxidationsphase, die wiederum zu höheren Rußemissionen führt. Gleichzeitig wird der Zündverzögerung länger, womit die Zeit für die Gemischaufbereitung verlängert wird. Dies führt zu einem homogenen Gemisch, das wiederum niedrigere Rußemissionen zur Folge hat. Bei späterem Spritzbeginn sinkt außerdem die Verbrennungstemperatur, die gleichermaßen Rußbildung und Rußoxidation beeinflussen. Welcher dieser Effekte bei der Spritzbeginnvariation, die in dieser Arbeit vorgestellt wurde, überwiegt und warum, wird in diesem Unterkapitel detailliert analysiert.

Für diese detaillierte Analyse wurden die Betriebspunkte mit einem Spritzbeginn von -7.5°KW bzw. 2.0°KW ausgewählt. Der erste Punkt weist die höchste Rußmasse im Abgas auf, der Zweite – die niedrigste. Sie illustrieren deswegen ein typisches Problem bei der Applikation von modernen Dieselmotoren. Durch eine Spätverschiebung des Spritzbeginns lassen sich die NO_x -Emissionen senken, wodurch möglicherweise auf teure NO_x -Abgasnachbehandlungssysteme (SCR) verzichtet werden kann. Diese Spätverstellung führt allerdings zunächst zu einem Rußanstieg (s. Kapitel 6.3.3). Trotz effektiver Partikelnachbehandlungssysteme wie der Dieselpartikelfilter (DPF) sollen gleichzeitig die rohen Rußemissionen so niedrig wie möglich bleiben, um den Kraftstoffverbrauch durch häufige Regenerationen nicht zu erhöhen. Aus diesem Grund wird der Spritzbeginn oftmals noch weiter nach spät verstellt, wodurch aber der thermodynamische Wirkungsgrad sinkt.

Die lokale Analyse der beiden Betriebspunkte ($\text{SB} = -7.5^\circ\text{KW}$ und $\text{SB} = 2.0^\circ\text{KW}$) ist in Abb. 6.29 vorgestellt. Dort sind lokale Luftverhältnisse, lokale Gesamtrußreaktionsraten und die resultierende Rußkonzentration zu unterschiedlichen Zeitpunkten dargestellt. Rußbildung findet bekanntermaßen in kraftstoffreichen Bereichen im Brennraum. Dies läßt die Vermutung zu, dass die Luftausnutzung im Falle von $\text{SB} = -7.5^\circ\text{KW}$ schlechter im Vergleich zu $\text{SB} = 2.0^\circ\text{KW}$ ist. Die Güte der Luft-Kraftstoff-Mischung für die beiden Betriebspunkte kann anhand der sogenannten λ -Isoflächen bewertet werden. Diese Isoflächen sind allerdings bei 40°KW (nach Einfrieren der Rußprozesse) sehr ähnlich (s. Abb. 6.29). Auf dieser Basis kann also keine eindeutige Aussage gemacht werden, ob die Luftausnut-

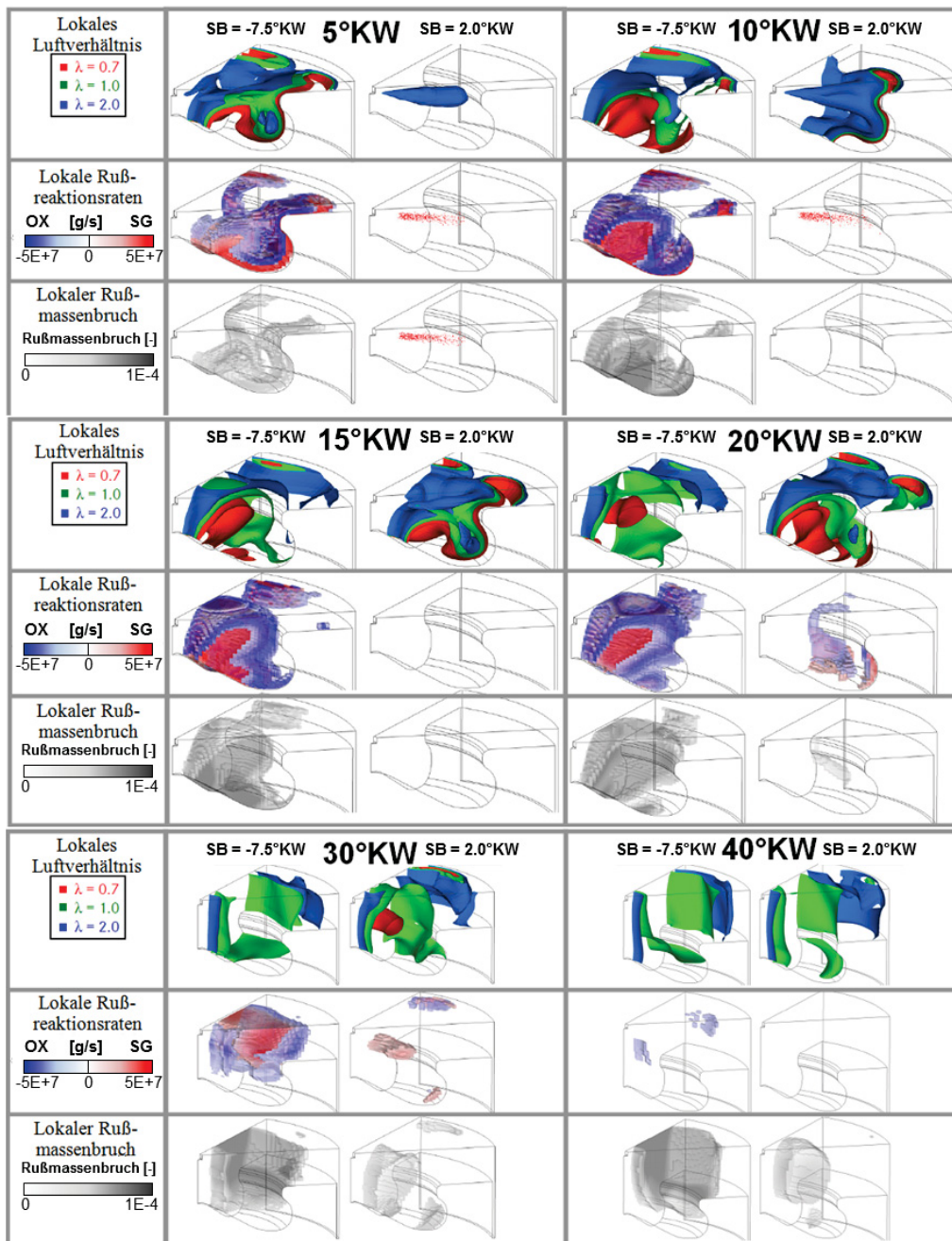


Abbildung 6.29.: Lokales Luftverhältnis, lokale Rußreaktionsraten und lokale Rußkonzentration für $SB = -7.5^\circ KW$ und $SB = 2.0^\circ KW$ in unterschiedlichen Phasen der Verbrennung

zung bei dem einen oder dem anderen Betriebspunkt schlechter ist. Da der Spritzbeginn unterschiedlich ist, sind die jeweiligen Zeiten, die für Verbrennung sowie Schadstoffentstehung und -reduktion zur Verfügung stehen (bis ca. 40°KW), auch unterschiedlich. Unter Berücksichtigung dieser Tatsache sollen die λ -Isoflächen mit einem Zeitversatz von ca. 10°KW miteinander verglichen werden. Die λ -Isoflächen im Falle von $\text{SB} = -7.5^\circ\text{KW}$ bei 5°KW sollen also mit den λ -Isoflächen im Falle von $\text{SB} = 2.0^\circ\text{KW}$ bei 15°KW verglichen werden, die λ -Isoflächen im Falle von $\text{SB} = -7.5^\circ\text{KW}$ bei 10°KW – mit den λ -Isoflächen im Falle von $\text{SB} = 2.0^\circ\text{KW}$ bei 20°KW , usw. Aber auch dieser Vergleich liefert keinen eindeutigen Grund für die unterschiedliche Intensität der Rußbildung und Rußoxidation bei unterschiedlichem Spritzbeginn (s. Abb. 6.29).

Im nächsten Schritt werden Oberflächenwachstums- und Oxidationsraten über alle CFD-Zellen integriert. Dies sind die dominanten Rußprozesse und deren Vergleich kann Aufschluss darüber bringen, warum die Rußemissionen im Falle von $\text{SB} = -7.5^\circ\text{KW}$ höher sind. Die aufintegrierten Reaktionsraten für beide Betriebspunkte werden neben den jeweiligen Rußmassenverläufen in Abb. 6.30 dargestellt. In dieser Abbildung können einige interessante Beobachtungen gemacht werden. Erstens, die wenig ausgeprägte Form des Rußmassenverlaufs kann nicht etwa mit der Abwesenheit von Rußoxidation erklärt werden. Rußoxidationsprozesse finden bei beiden Betriebspunkten während des gesamten Verbrennungsablaufs statt. Aber auch Rußoberflächenwachstum findet bis zum Einfrieren der Rußprozesse statt. Dies kann auf das Vorhandensein von kraftstoffreichen Bereichen während des gesamten Verbrennungsablaufs zurückgeführt werden (s. Abb. 6.29). Das Oberflächenwachstum ist dabei so intensiv, dass die Rußoxidation überkompensiert wird.

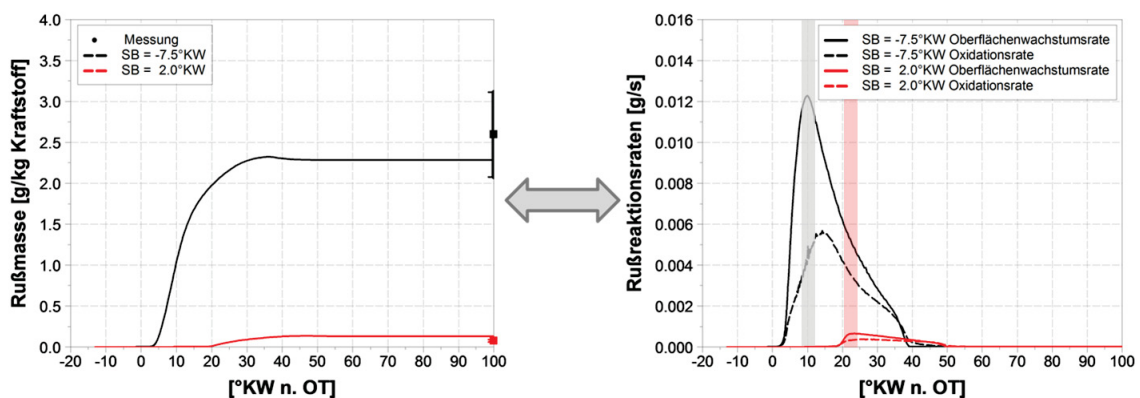


Abbildung 6.30.: Rußmasse und integrierte Oberflächenwachstums- und Oxidationsraten für $\text{SB} = -7.5^\circ\text{KW}$ bzw. $\text{SB} = 2.0^\circ\text{KW}$

Zweitens, die integrierte Rußoberflächenwachstumsrate ist im Falle von $\text{SB} = -7.5^\circ\text{KW}$ viel höher als dieselbe im Falle von $\text{SB} = 2.0^\circ\text{KW}$, weswegen auch die aufintegrierte Rußmasse höher ist. Um diesem Verhalten auf den Grund zu gehen wurden die Isoflächen für $\lambda = 0.7$ zu den Zeitpunkten analysiert, zu denen die Rußbildung am intensivsten ist. In Abb. 6.30 sind diese Zeitpunkte durch einen roten und einen grauen Balken gekennzeichnet. Für $\text{SB} = -7.5^\circ\text{KW}$ liegt dieser Punkt bei ca. 10°KW und für $\text{SB} = 2.0^\circ\text{KW}$ – bei ca. 24°KW . Die Isoflächen für $\lambda = 0.7$ wurden deswegen für die weitere Analyse ausgewählt, weil sie

für die Intensität der Rußbildung für repräsentativ gehalten werden. Das Ergebnis dieses Vergleichs ist in Abb. 6.31 dargestellt.

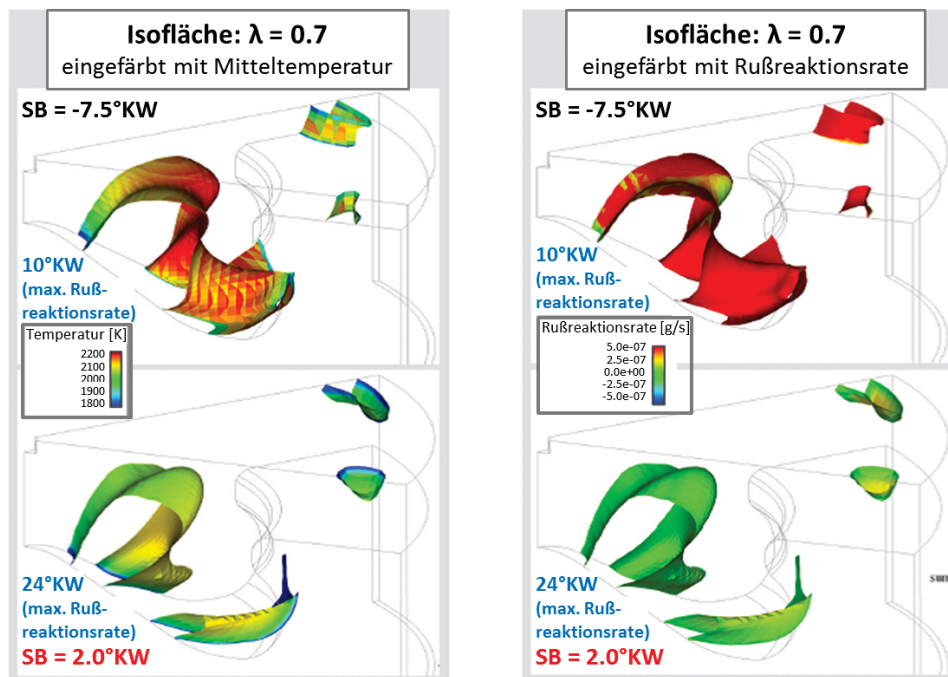


Abbildung 6.31.: $\lambda = 0.7$ Isoflächen für $SB = -7.5^\circ\text{KW}$ bzw. $SB = 2.0^\circ\text{KW}$ zum Zeitpunkt der intensivsten Rußbildung

Dabei sind die Isoflächen auf der linken Seite mit der Zellenmitteltemperatur eingefärbt und diese auf der rechten Seite – mit der akkumulierten Rußreaktionsrate (Summe aus Partikelnukleation, Oberflächenwachstum, Fragmentierung und Oxidation). Das Volumen, das in der $\lambda = 0.7$ Isofläche eingeschlossen ist, scheint im Falle von $SB = -7.5^\circ\text{KW}$ geringfügig größer zu sein. Damit kann aber der signifikante Unterschied in den integrierten Rußreaktionsraten nicht erklärt werden (s. Abb. 6.30).

Der Vergleich der gemittelten Zellentemperaturen ergibt dagegen ein sehr eindeutiges Bild: die Temperaturen im Falle von $SB = -7.5^\circ\text{KW}$ sind deutlich höher. Das kann sehr gut die Ursache für die viel intensivere Rußbildung in diesem Betriebspunkt, da die Rußbildung stark temperaturabhängig ist. Die letzte Bestätigung dafür stellen die akkumulierten Rußreaktionsraten auf der rechten Seite der Abb. 6.31 dar. Diese sind um Größenordnungen höher für $SB = -7.5^\circ\text{KW}$. Die Ursache für die höhere Rußemissionen bei $SB = -7.5^\circ\text{KW}$ ist also die höhere Temperatur der kraftstoffreichen Bereichen. In der Tat liegt der Temperaturunterschied bei gerade mal 150 K, aber er ist damit hoch genug, um zu der viel intensiveren Rußbildung zu führen. Diese Erkenntnis ist eine beeindruckende Illustration der Benefits, die mit einem Rußmodell erzielt werden können.

6.6.2. Analyse der Rußphänomene bei einer AGR-Variation

Im Vergleich zu einer Spritzbeginnvariation, die im letzten Unterkapitel genauer analysiert wurde, scheinen die motorischen Rußphänomene bei einer AGR-Variation eindeutiger zu

sein. Während bei Spritzbeginnvariation Temperatur- und Mischungseffekte teilweise gegenläufig die Rußbildung beeinflussen, wird bei einer Erhöhung der AGR-Rate davon ausgegangen, dass der damit verbundene Sauerstoffmangel zu einer Erhöhung der Rußmasse im Abgas führt. Mit Ausnahme von Höchst-AGR-Brennverfahren (s. Kapitel 2) besitzt diese Aussage unbestritten Gültigkeit. Angesichts teurerer NO_x -Nachbehandlungstechnologien sind Brennverfahren, bei denen hohe AGR-Raten realisiert werden können, von großem Interesse. Insbesondere gilt es herauszufinden, wie eine Verlängerung der Rußoxidationsphase erzielt werden kann. Dafür soll als erstes verstanden werden, warum überhaupt die Rußoxidation in der Expansionsphase einfriert. Diese Fragestellung ist bei einer AGR-Variation nicht unbedingt sehr eindeutig. Der bereits erwähnte Sauerstoffmangel kann genau so gut dafür verantwortlich sein wie die im Falle von hohen AGR-Raten niedrigeren Verbrennungstemperaturen, die die Intensität der Rußoxidation beeinträchtigen. Um dieses motorische Phänomen zu beleuchten, wurden zwei Betriebspunkte aus der AGR-Variation bei einem Mitteldruck von ca. 14 bar – AGR = 0% und AGR = 27% - detailliert analysiert. Der Erste weist keine messbare Rußemission im Abgas auf, während bei dem Zweiten die höchste Rußmasse gemessen wurde (s. Tab. 6.2).

In Abb. 6.32 sind die CFD-Zellen dargestellt, die einen signifikanten Rußvolumenbruch (größer als 10^{-6}) aufweisen. Um das motorische Rußverhalten in den beiden Betriebspunkten zu untersuchen, wurden diese Zellen mit der lokalen Zellenmassenmitteltemperatur (links), dem lokalen Luftverhältnis (Mitte) und den lokalen Rußreaktionsraten (rechts) eingefärbt. Im Kapitel 6.6.1 wurde festgestellt, dass die Mitteltemperatur der fetten Zonen einen entscheidenden Einfluss auf die Rußmasse im Abgas hat. Auch bei der hier untersuchten AGR-Variation ist die Massenmitteltemperatur der dargestellten Zellen unterschiedlich. Sie ist im Falle von AGR = 27% erwartungsgemäß niedriger als im Falle von AGR = 0%. Die Temperaturunterschiede sind insbesondere in der Rußbildungsphase unterschiedlich, die für den Betriebspunkt ohne externe AGR bei ca. 15°KW bereits zu Ende ist (s. Schnittpunkt Oberflächenwachstums- und Oxidationsrate in Abb. 6.33). In dieser Bildungsphase wird im Falle von AGR = 0% tatsächlich mehr Ruß gebildet, wie auch in Abb. 6.33 zu erkennen ist. In Abb. 6.32 ist weiter auffällig, dass die Rußwolken bis 15°KW gleich groß sind. Ab 15°KW ist die Rußwolke in der Kolbenmulde im Falle von AGR = 0% deutlich kleiner. Dies liegt daran, dass das Luft-Kraftstoffgemisch in diesem Betriebspunkt deutlich schneller abmagert. Im Gegensatz dazu bleiben die Rußwolken im Falle von AGR = 27% bis 35°KW in fetten Brennraumbereichen. Für den Beginn der Rußoxidationsphase ist das globale Luft-Kraftstoffverhältnis also von entscheidender Bedeutung. Eine Bestätigung dieser Feststellung ist in Abb. 6.10 und in Abb. 6.12 zu finden: die zeitliche Reihenfolge der Rußmaxima entspricht genau dem Anstieg der AGR-Raten.

Das globale Luft-Kraftstoff-Verhältnis im Falle von AGR = 27% beträgt 1.33. Streng genommen bedeutet das, dass 33% mehr Luft vorhanden ist als für die vollständige Verbrennung notwendig. Wenn also für die Oxidation unendlich lange Zeit zur Verfügung stehen würde, sollten alle Rußpartikel oxidiert werden können. Abb. 6.33 zeigt allerdings, dass das nicht der Fall ist: die Rußoxidation friert kurz nach 45°KW quasi ein. Die Ursache dafür liegt nicht in einem Sauerstoffmangel (s. Abb. 6.32). Unter den Zellen, die signifi-

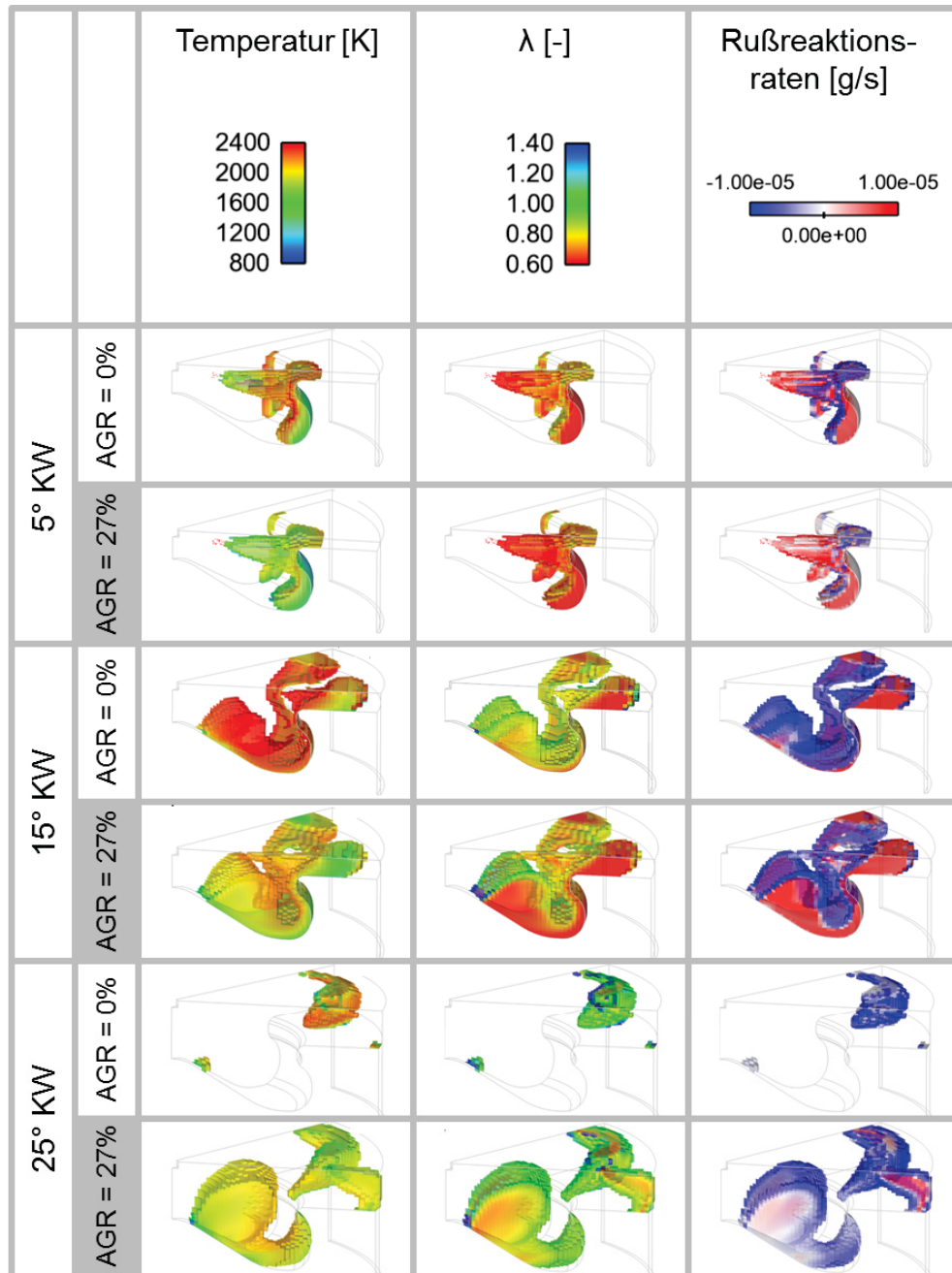


Abbildung 6.32.: Lokale Temperatur, lokales Luftverhältnis und lokale Rußreaktionsraten in Zellen, die signifikanten Rußmassenbruch aufweisen: Vergleich zwischen AGR = 0% und AGR = 27% bei $p_{me} = \text{ca. } 14 \text{ bar}$
 Fortsetzung auf S. 148

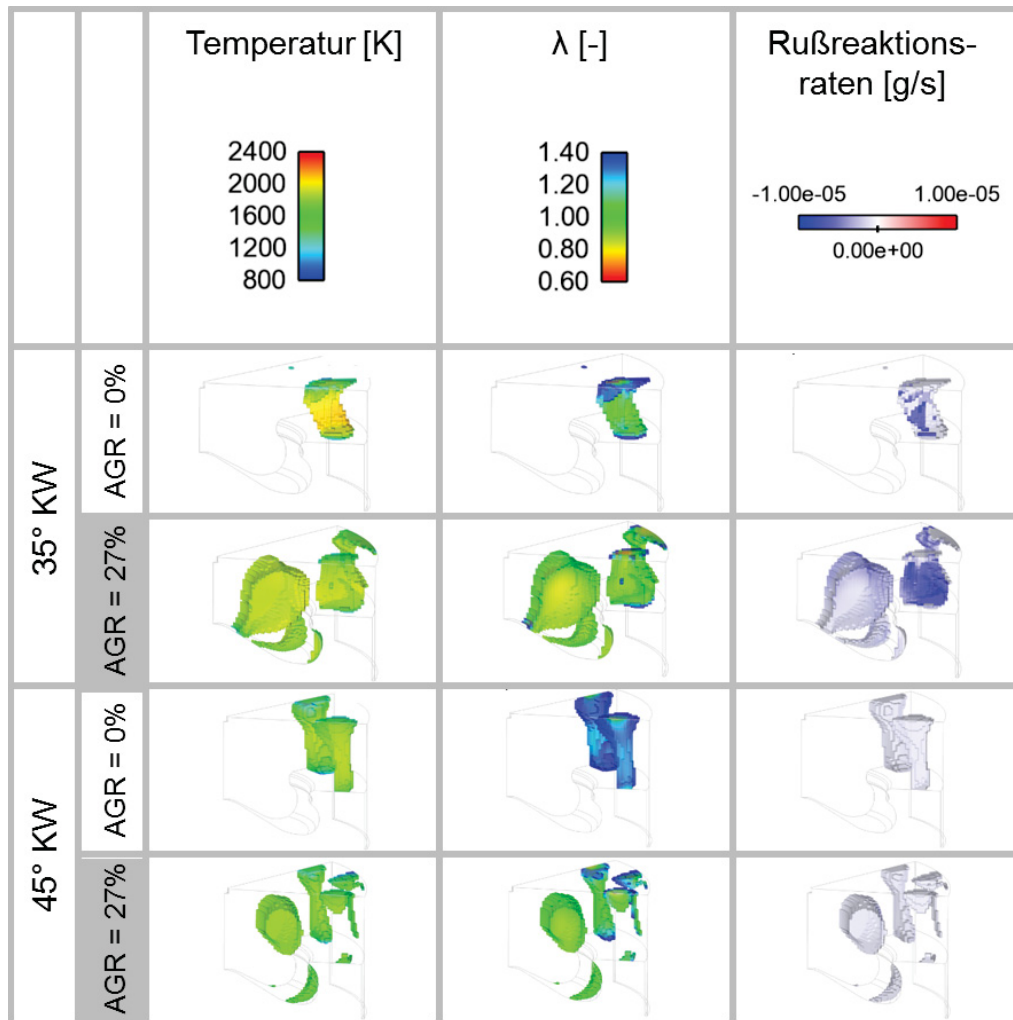


Abbildung 6.32.: Lokale Temperatur, lokales Luftverhältnis und lokale Rußreaktionsraten in Zellen, die signifikanten Rußmassenbruch aufweisen: Vergleich zwischen AGR = 0% und AGR = 27% bei $p_{me} = \text{ca. } 14 \text{ bar}$

kanten Rußmassenbruch aufweisen, sind einige, die zu diesem Zeitpunkt stöchiometrisch oder mager sind. Gleichzeitig sind viele Zellen vorhanden, die fett genug sind, so dass auch Rußbildung stattfinden könnte. Dass keine der beiden Prozesse bei 50°KW abläuft (s. Abb. 6.33) liegt ganz offensichtlich an der Massenmitteltemperatur, die so niedrig ist (ca. 1600 K), dass die Rußreaktionen einfrieren. Damit stellt sich heraus, dass auch im Falle der AGR-Variation der Temperatureffekt entscheidend für die Rußrohmission ist. Bei der Spritzbeginnvariation führten die höheren Verbrennungstemperaturen zu intensiverer Rußbildung, während bei der AGR-Variation die Rußoxidation wegen der niedrigeren Verbrennungstemperaturen früh einfriert. Daraus lässt sich wiederholt schlussfolgern, dass die richtige Temperaturkopplung zwischen der Flamelet-Bibliothek und dem CFD-Code entscheidend für die Qualität der Rußsimulationsergebnisse ist. Dies verdeutlicht nochmals die Wichtigkeit des Temperatur-Profil-Ansatzes, der im Rahmen dieser Arbeit entwickelt und umgesetzt wurde.

In diesem Kapitel wurden Wirkmechanismen der Rußbildung und der Rußoxidation sehr

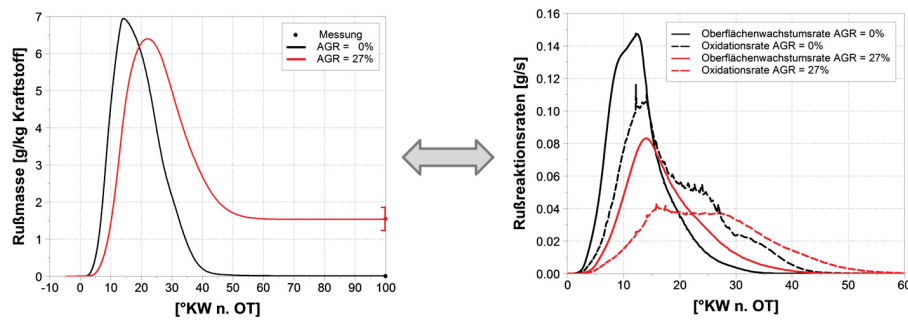


Abbildung 6.33.: Oberflächenwachstums- und Oxidationsrate: Vergleich zwischen AGR = 0% und AGR = 27% bei $p_{me} = \text{ca. } 14 \text{ bar}$

ausführlich analysiert. Damit konnten die motorischen Rußphänomene bei einer Spritzbeginn und einer AGR-Variation erklärt werden. In beiden Fällen stellte sich heraus, dass die Verbrennungstemperaturen eine entscheidende Rolle spielen, die wichtiger als die Mischungsverhältnisse alleine ist. Nun stellt sich die Frage, welche Schlüsse daraus für die Brennverfahrensentwicklung gezogen werden können. Im Folgenden werden Punkte zusammengefasst, die eine rußarme Verbrennung begünstigen. Dabei werden etwaige Kraftstoffeigenschaften nicht berücksichtigt, da die Motorenhersteller keinen Einfluss darauf nehmen können.

Rußbildung und Rußoxidation finden im gesamten Verbrennungsablauf statt. Aus der Intensität dieser beiden Prozesse resultiert die Rußrohmission. Je schwächer die Rußbildung und je intensiver die Rußoxidation ist, desto geringer ist der Rußausstoß. In diesem Kapitel wurde festgehalten, dass die Temperaturen der fetten Zonen die Rußbildung bestimmen. Die Zündung soll also möglichst weit weg von der Düse stattfinden. Man spricht hierbei von einer großen Flammen-Abhebelänge. Dies kann erreicht werden, indem die Ladungstemperaturen vor Einspritzbeginn niedrig gehalten werden. In diesem Fall sollen niedrige Kompressionsverhältnisse, niedrige Ladedrücke oder größere Ladeluftkühlleistungen angestrebt werden. Niedriger Raildruck kann auch zu einer großen Flammen-Abhebelänge beitragen, gleichwohl sind die damit verbundenen Nachteile hinsichtlich Gemischbildung schwerwiegender. Der Zündort kann außerdem durch schlankere Einspritzstrahlen von der Düse entfernt werden, da diese kleine stöchiometrische Mischzonen aufweisen. Solche Spraybilder lassen sich durch eine entsprechende Gestaltung der Einspritzdüse hinsichtlich k -Faktor und Abrundung der Düsenlöcher realisieren. Diese Brennverfahrensstrategie kann allerdings nur dann funktionieren, wenn die Gemischbildung nach der Strahl-Wand-Interaktion intensiv genug ist.

Die Strahl-Wand-Interaktion beeinflusst maßgeblich die Diffusionsverbrennung und die Ausbrandphase der Verbrennung. In diesen Verbrennungsphasen nimmt die Rußoxidation an Bedeutung zu. Die Güte der Luftausnutzung ist in dieser Phase selbstverständlich sehr wichtig für die Intensität der Rußoxidation. Entsprechend soll die Muldengeometrie die Luft-Kraftstoffdurchmischung begünstigen. In modernen Dieselmotoren werden deswegen nicht nur konventionellen ω -Mulden, sondern mittlerweile auch sogenannte Stufenmul-

den eingesetzt [125]. Eine Verbesserung der Luftausnutzung kann auch durch Erhöhung der Düsenlochanzahl sowie durch Erhöhung der Drallzahl erzielt werden. Eine intensive Luft-Kraftstoffdurchmischung erhöht allerdings nur die Wahrscheinlichkeit, dass die Reaktionspartner – Ruß und Sauerstoff bzw. OH-Radikale – aufeinander treffen. Die Rußoxidation – wie jede andere chemische Reaktion – findet nur dann statt, wenn ausreichend Zeit vorhanden ist und die Aktivierungsenergie aufgebracht wird. Die Zeit, die für die Rußoxidation zur Verfügung steht, wird vom Spritzbeginn und insbesondere von der Motordrehzahl bestimmt. DownsPEEDING-Konzepte bei Dieselmotoren haben deswegen nicht nur Verbrauchseinsparpotenzial, sie begünstigen außerdem eine rußarme Verbrennung. Die Überschreitung der Aktivierungsschwelle für die Rußoxidationsreaktionen hängt allein von der Verbrennungstemperaturen statt. Je höher diese sind, desto intensiver die Rußoxidationsphase. Wie in diesem Kapitel bereits festgestellt spielen also die lokalen Verbrennungstemperaturen eine mindestens gleich wichtige Rolle wie die Güte der Gemischbildung. Die Verbrennungstemperaturen in der Rußoxidationsphase zu erhöhen ohne Anstieg derselben in der Rußbildungsphase ist allerdings eine sehr schwierige Aufgabe. Hierbei kommen nur Einspritzstrategien in Frage, die eine angelagerte Nacheinspritzung aufweisen, die allerdings nicht verbrauchsneutral gestaltet werden können.

6.6.3. Sensitivität Verbrennungsnetz: Vergleich zwischen Sektor und Vollnetz

Im Kapitel 6.2 wurden Kriterien definiert, die für eine zuverlässige Rußsimulation erfüllt werden müssen. Insbesondere soll das CFD-Setup Motorgeometrie und Betriebsparameter möglichst genau abbilden. Für die Validierung der Emissionsmodelle, die in dieser Arbeit entwickelt wurden, kamen allerdings CFD-Sektornetze, die deutliche Vereinfachungen im Vergleich zu der realen Motorgeometrie aufweisen. In diesem Unterkapitel wird der Einsatz von detaillierten Vollnetzen vorgestellt und darüber diskutiert, ob und unter welchen Bedingungen die Sektornetze für die Zwecke der Verbrennungs- und Rohemissionssimulation angewandt werden dürfen.

Bei den Sektornetzen wird davon ausgegangen, dass die Brennraumgeometrie rotations-symmetrisch ist. Unter dieser Annahme ist es möglich, den Brennraum in so viele Sektoren zu unterteilen wie die Anzahl an Einspritzlöchern. Die CFD-Rechnung wird nur für einen dieser Teile des Brennraums durchgeführt, wobei an den Schnittebenen zyklischen Randbedingungen definiert werden. Durch die Vereinfachung und die Verkleinerung des Rechen-netzes kann eine deutliche Reduktion der Rechenzeit und eine Steigerung der numerischen Stabilität erreicht werden. Der Brennraum ist aber aufgrund von verschiedenen Totvolumina wie Ventiltaschen oder Kolbenaussparungen nicht rotationssymmetrisch. Insbesondere die Brennräume von PKW-Dieselmotoren zeichnen sich durch viele Totvolumina dieser Art aus. Diese können in Sektornetzen für gewöhnlich nicht berücksichtigt werden, weswegen für die Höhe des Quetschspaltes eine korrigierende Annahme getroffen werden muss (s. Kapitel 6.2). Abb. 6.34 illustriert die Unterschiede zwischen dem vereinfachten Sektornetz, das in dieser Arbeit zum Einsatz kam, und dem Vollnetz, das die Brennraumgeometrie detailliert abbildet.

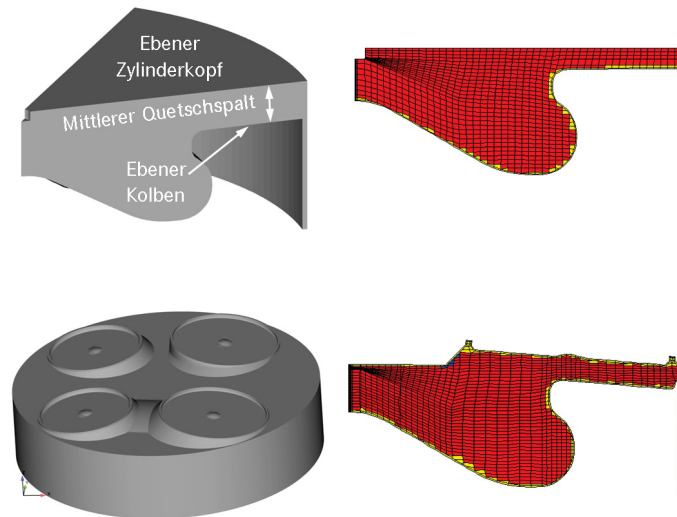


Abbildung 6.34.: Vergleich zwischen dem vereinfachten Sektornetz und dem Vollnetz, das die Brennraumgeometrie detailliert abbildet

Die Messungen, die für die Validierung der Rohemissionsmodelle herangezogen wurden, wurden an einem Einzylindermotor, dessen Einspritzdüse 7 Löcher aufweist. Das Sektornetz, das für die CFD-Rechnungen eingesetzt wurde, soll deswegen ein Siebtel des Brennraums abbilden. Das Vollnetz, das bei diesem Netzvergleich zum Einsatz kam, bildet dagegen detailliert den gesamten Brennraum mit allen vorhandenen Totvolumina ab. Abb. 6.34 zeigt deutlich, dass bei diesem Netz die Quetschspalthöhen in den Brennraumbereichen, in denen sich die einzelnen Einspritzstrahlen ausbreiten, nicht konstant sind. Folglich sind die Strömungsverhältnisse im Quetschspalt nicht für jeden Strahl gleich stark ausgeprägt. Dies führt erwartungsgemäß zu unterschiedlichem Mischungsverhalten im Quetschspalt und in der Mulde wie in Abb. 6.35 dargestellt.

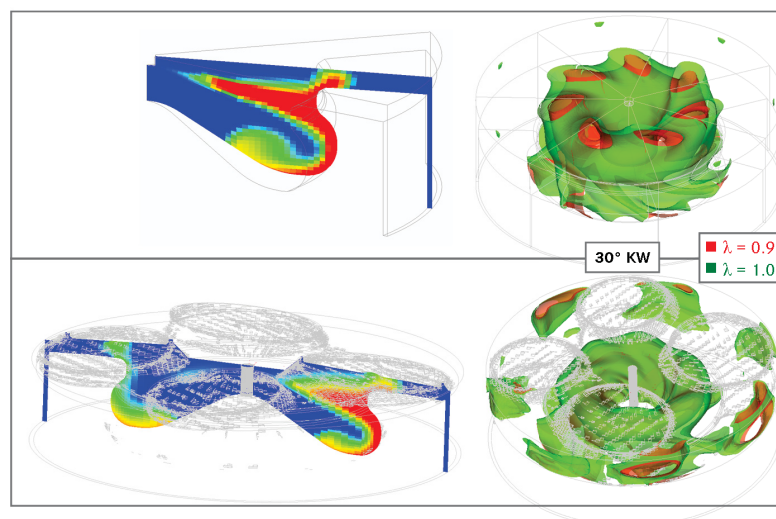


Abbildung 6.35.: Unterschiede in Sprayform und Mischverhalten zwischen Sektor- und Vollnetz

Bei der Anwendung des Vollnetzes wurde im ersten Schritt das komplette CFD-Setup des Sektornetzes übernommen. Dies führte zu einigen Unterschieden zwischen Sektor- und Vollnetz, die nicht unbedingt zu erwarten sind. Auf der linken Seite von Abb. 6.35 ist ein Schnitt durch die Mitte des Einspritzstrahls im Sektornetz dargestellt. Die gleiche Schnittebene ist auch für einen der sieben Einspritzstrahlen im Vollnetz gezeigt. Die Schnittebene durch die Strahlmitte im Sektornetz zeigt einen deutlich schlankeren Strahl im Vergleich zum Vollnetz. Die stöchiometrischen und mageren Bereiche am Sprayrand sind im Vollnetz deutlich stärker ausgeprägt. Dies wirkt sich insbesondere auf den Zündverzug und die Vormischverbrennung aus, die im Falle des Vollnetzes damit deutlich intensiver sein soll. Des Weiteren sind auf der rechten Seite von Abb. 6.35 die Isoflächen für $\lambda = 0.9$ bzw. $\lambda = 1.0$ (rechts) dargestellt. Die Aufteilung des Kraftstoffs zwischen Mulde und Quetschspalt nach dem Auftreffen auf den Muldenrand ist ebenfalls deutlich unterschiedlich. Im Fall des Vollnetzes ist sie gleichmäßig, während sich die kraftstoffreichen Bereiche im Falle des Sektornetzes hauptsächlich in der Mulde befinden. Die Ursache für das unterschiedliche Mischverhalten liegt in den unterschiedlichen Strömungsverhältnissen im Quetschspalt. Um dies zu verdeutlichen sind in Abb. 6.36 Schnitte durch die Mitte von zwei Einspritzstrahlen im Vollnetz dargestellt. Eine dieser Schnittebenen verläuft durch eine Ventiltasche, während die andere Schnittebene den Bereich zwischen Auslass- und Einlassventil schneidet, der eine deutlich geringere Quetschspalthöhe aufweist.

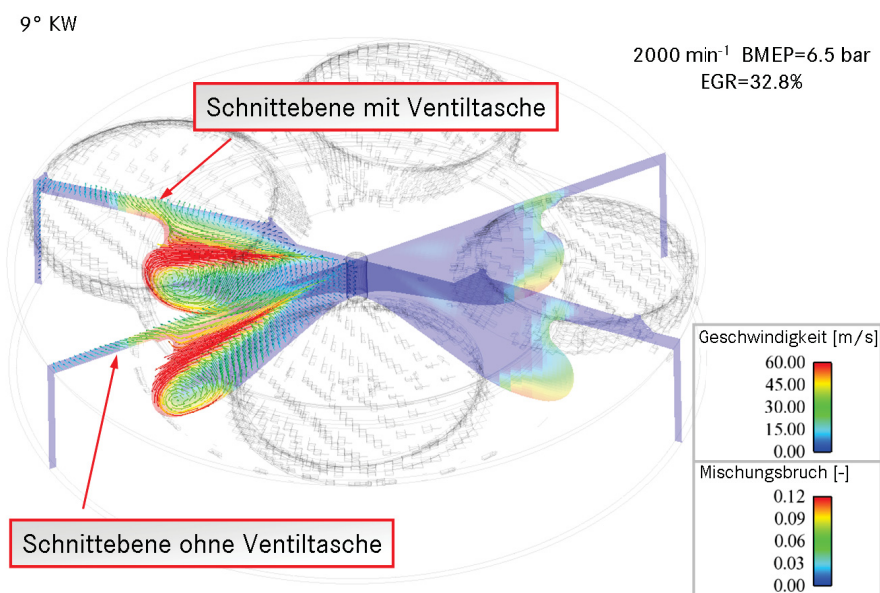


Abbildung 6.36.: Unterschiede in Sprayform und Mischverhalten zwischen Sektor- und Vollnetz

Die beiden Schnittebenen sind nochmals in Abb. 6.37 dargestellt, in der außerdem der Schnitt durch den Einspritzstrahl im Sektornetz zum Vergleich dargestellt ist. Insbesondere in Abb. 6.37 ist der Unterschied zwischen dem Mischverhalten im Sektor- und im Vollnetz klar zu sehen. Solche deutlichen Unterschiede machen sich auch im Verbrennungs- und Emissionsverhalten bemerkbar.

Tatsächlich ist die Wärmefreisetzung in der Vormischphase der Verbrennung bei dem Voll-

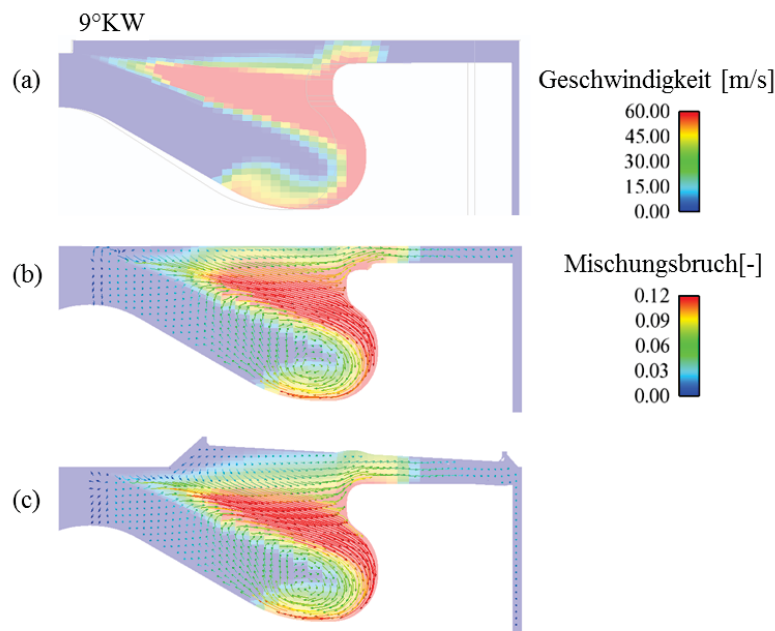


Abbildung 6.37.: Unterschiedliche Spraybilder für Einspritzstrahlen in
 (a) dem Sektornetz
 (b) einem Vollnetzbereich ohne Ventiltasche
 (c) einem Vollnetzbereich mit Ventiltasche

netz deutlich intensiver (s. hellblaue Kurve Abb. 6.38). Folglich sind Brennraumdruck und -temperatur in dieser Phase höher wie in Abb. 6.39 zu sehen ist.

Die erheblichen Unterschiede in der Wärmefreisetzung zwischen Messung und Simulation im Vollnetz machen eine Anpassung des CFD-Setups notwendig, das im ersten Schritt mit Ausnahme des CFD-Netzes identisch mit dem Sektornetz-CFD-Setup war. Insbesondere sind die Lagen der charakteristischen Verbrennungspunkte H10 und H50, die mit dem Sektornetz sehr genau abgebildet werden konnten (s. Abb. 6.11), hier deutlich außerhalb der in Tab. 6.3 definierten Toleranz: H10 wird 0.6°KW und H50 1.3°KW früher erreicht als in der Messung. Dies belegt die zu intensive Vormischverbrennung bei dem Vollnetz. Für das Vollnetz musste aus diesem Grund die Strategie bzgl. der turbulenten Prandtl- und Schmidt-Zahl verändert werden. Die Werte hierfür werden in der Literatur mit Zahlen zwischen 0.7 und 0.9 angegeben (s. Kapitel 3). Im Falle des Sektornetzes wurden sie auf 0.5 reduziert, damit eine realistischere Strahlaufweitung abgebildet werden kann. Im Falle des Vollnetzes muss die Luft-Kraftstoffmischung in der Vormischphase offensichtlich nicht künstlich intensiviert werden. Aus diesem Grund wurden die Vollnetzrechnungen mit einem Wert von 0.7 für die turbulente Prandtl- und Schmidt-Zahl wiederholt. Die Ergebnisse dieser Rechnung sind in dunkelblau in Abb. 6.38 und 6.39 dargestellt. Die Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation ist in diesem Fall deutlich besser. Insbesondere kann damit die Lage des H10- und des H50-Punktes wieder sehr genau abgebildet werden. Daraus resultiert eine sehr gute Übereinstimmung der Rußmasse im Abgas zwischen Messung und Vollnetzsimulation wie in Abb. 6.40 zu sehen ist.

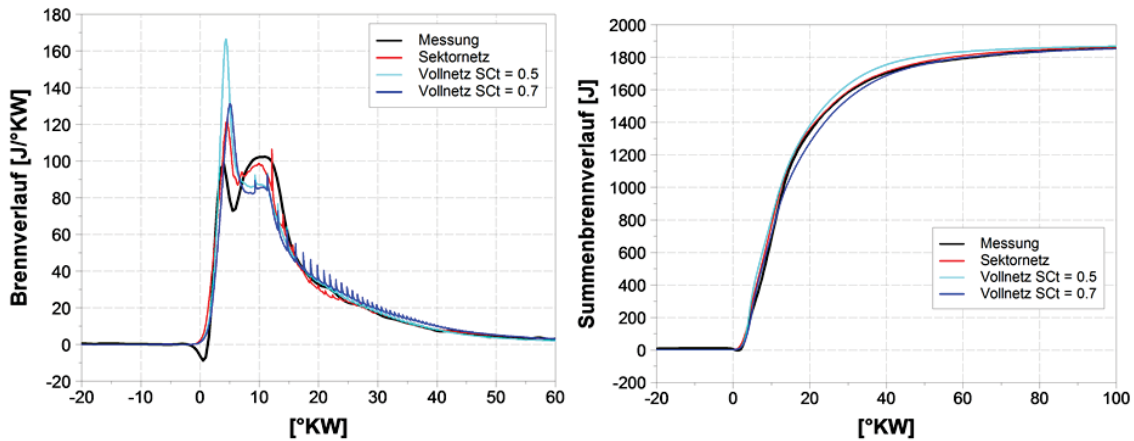


Abbildung 6.38.: Brennvorgang und Summenbrennvorgang 2000 min^{-1} $p_{me} = 14 \text{ bar AGR} = 27\%$: Messung, Sektor- und Vollnetz ($SCt = 0.5$ bzw. $SCt = 0.7$)

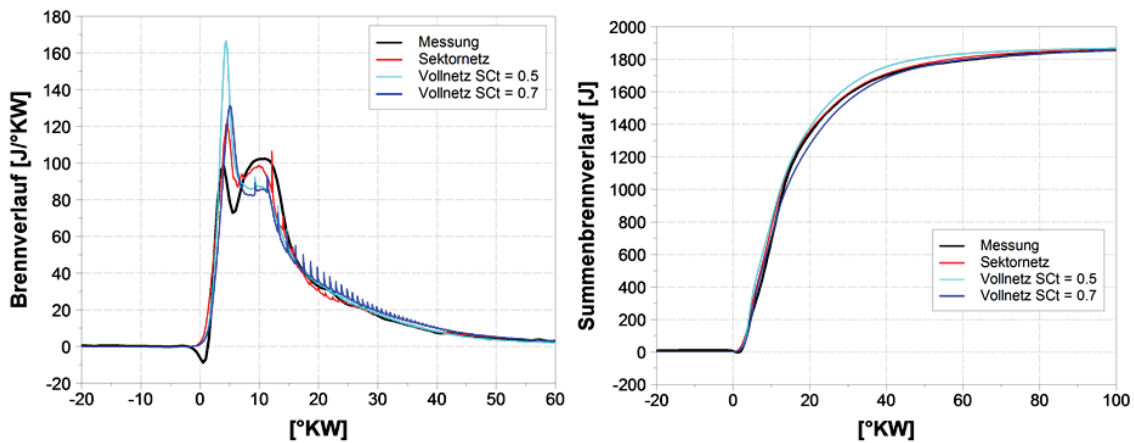


Abbildung 6.39.: Druck- und Temperaturverlauf bei 2000 min^{-1} $p_{me} = 14 \text{ bar AGR} = 27\%$: Messung, Sektor- und Vollnetz

In diesem Kapitel wurde aufgezeigt, dass die Vollnetze die Motorgeometrie deutlich realistischer abbilden. Die Anzahl der CFD-Zellen in solchen Netzen ist allerdings enorm: über 1000000! Trotz der deutlichen Fortschritte, die in den letzten Jahren bei der CPU-Geschwindigkeit gemacht wurden, erfordern Vollnetze deswegen sehr lange Rechenzeiten. Außerdem sind Vernetzungsaufwand und Rechenstabilität nicht auf dem Niveau von Sektornetzen, weswegen der industrielle Einsatz von solchen Netzen nur eingeschränkt möglich ist. Die Sektornetze sollen also weiterhin angewandt werden, allerdings nicht auf Kosten der Qualität der Simulation. Dies wirft die Frage auf, wie die CFD-Setups mit Sektornetzen parametrisiert werden müssen, so dass die Güte der Verbrennungs- und Emissionssimulation vergleichbar mit denselben der Vollnetzen ist. Mit dieser Frage beschäftigt sich der folgende letzte Abschnitt dieses Unterkapitels.

Unter der Prämisse, dass Luft-Kraftstoff-Mischverhalten entscheidend für Verbrennung und Schadstoffentstehung ist, wurde im Rahmen dieser Arbeit der Versuch unternommen, Sektor- und Vollnetz gleichzustellen. Als Kriterium dafür würde die Drallzahl herangezogen.

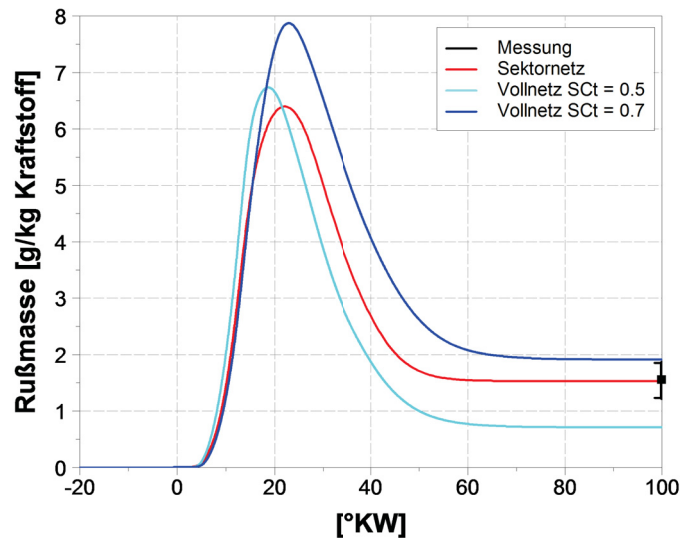


Abbildung 6.40.: Rußmassenverlauf 2000 min^{-1} $p_{me} = 14 \text{ bar}$ $AGR = 27\%$: Messung, Sektor- und Vollnetz ($SCt = 0.5$ und $SCt = 0.7$)

gen. In dieser Arbeit wurde von Ladungswechselrechnungen abgesehen, da der Nutzen nicht im Verhältnis zu dem Aufwand steht. Aus diesem Grund müssen sämtliche Anfangsbedingungen vor Kompressionsbeginn, Drallzahl inklusive, vorgegeben werden. Die Drallzahl für die in dieser Arbeit untersuchte Kopfgeometrie wurde im Rahmen von Blasversuchen ermittelt und für 120°KW v. OT mit 3.5 beziffert. Dies soll die Drallzahlvorgabe für das Vollnetz sein, da dieses die Brennraumgeometrie möglichst genau abbildet.

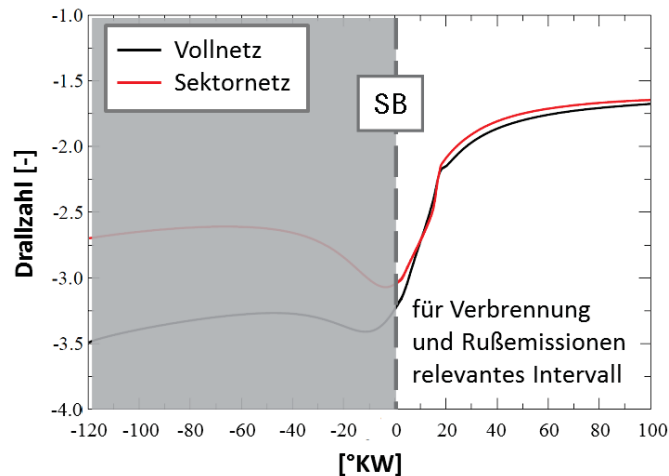


Abbildung 6.41.: Drallzahlverlauf für Sektor- und Vollnetz bei unterschiedlichen Starwerten

Der resultierende Verlauf der Drallzahl zwischen 120°KW v. OT und 100°KW n. OT ist in Abb. 6.41 in schwarz dargestellt. Im Falle des Sektornetzes wurde eine Drallzahlvariation durchgeführt. Das Ziel dabei war, im für Verbrennung und Emissionen relevanten Zeitabschnitt (nach Spritzbeginn) einen möglichst ähnlichen Drallzahlverlauf wie im Vollnetz

zu erzielen. Das Ergebnis dieser Untersuchung ist ebenso in Abb. 6.41 dargestellt: für das Sektornetz erweist sich eine Start-Drallzahl von 2.7 als optimal. Bis zu dem Spritzbeginn weist der Drallzahlverlauf damit zwar deutliche Abweichungen von demselben bei dem Vollnetz, aber nach Spritzbeginn, wenn Verbrennung und Emissionsbildung stattfinden, sind die beiden Verläufe quasi gleich.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das Sektornetz zahlreiche Vorteile dem Vollnetz gegenüber aufweist, z. B. Einfachheit, Rechenzeit, usw. Gleichwohl müssen gewisse Nachteile in Kauf genommen werden wie beispielsweise die relativ ungenaue Abbildung der Motorgeometrie. Dennoch können Sektornetze nach wie vor für Verbrennungs- und Emissionsrechnungen verwendet werden. Voraussetzung dafür ist die mit dem Vollnetz konsistente Vorgabe des Startwerts für die Drallzahl.

6.6.4. Sensitivitätsanalyse CFD-Setup

Im Kapitel 6.2 wurde detailliert über die Kriterien diskutiert, die ein CFD-Setup erfüllen muss, um eine zuverlässige Schadstoffsimulation zu ermöglichen. Des Weiteren wurden diese Kriterien dort quantifiziert (s. Tab. 6.2). In diesem Unterkapitel soll die Auswirkung der Nicht-Einhaltung dieser Kriterien plakativ dargestellt werden. Dadurch soll aufgezeigt werden, dass detaillierte Schadstoffmodelle genauso sensitiv auf Veränderungen der Motorgeometrie oder der Betriebsparameter reagieren wie dies in experimentellen Untersuchungen der Fall ist. Im Einzelnen soll in diesem Unterkapitel beispielhaft über den Einfluss der Quetschspalthöhe und des Spritzbeginns diskutiert werden.

6.6.4.1. Einfluss Quetschspalthöhe

Im Kapitel 2 wurde die Bedeutung der Quetschspaltströmung für die Gemischbildung erläutert. Diese wurde im Rahmen der Diskussion über Vollnetze nochmals verdeutlicht. Aufgrund von Recheninstabilitäten bei der Modellierung des Feuerstegs (s. Kapitel 6.2.1), wird die Quetschspalthöhe oftmals zur Einstellung des thermodynamischen Kompressionsverhältnisses überproportional erhöht. Dies beeinträchtigt entscheidend die Gemischbildung und somit die Qualität der Schadstoffsimulation. Um das Ausmaß dieser Problematik zu demonstrieren, wurde ein CFD-Setup modifiziert, das den OM642 Dieselmotor von Mercedes-Benz abbildet (s. Tab. 6.4).

Motorspezifikation	
Bohrung [mm]	83
Hub [mm]	92
Kompressionsverhältnis (geom.)	18
Anzahl Ventile	4
Anzahl Düsenlöcher	8

Tabelle 6.4.: Motorspezifikation OM642

Die Quetschspalthöhe für dieses Sektornetz wurde nach der Vorgehensweise ermittelt wie für das analoge Sektornetz, das bei der Validierung des Rußmodells zum Einsatz kam. Die

Quetschspalthöhe ergibt sich damit zu 1.64 mm. Das modifizierte Setup weist dagegen eine Quetschspalthöhe von 2.37 mm auf. Die Anfangsbedingungen wurden so angepasst, dass die thermodynamischen Bedingungen, die unmittelbar vor Spritzbeginn herrschen, für beide Setups identisch sind. Das Ergebnis dieser Rechenstudie ist in Abb. 6.42a dargestellt. Die Druckverläufe, die oftmals unbegründet als einziges Kriterium für die Qualität der Verbrennungssimulation herangezogen werden, sind fast identisch. Die Rußmasse im Abgas unterscheidet sich dagegen um Faktor 2. Dieses Verhalten scheint zunächst unplausibel zu sein, lässt sich aber durch eine Analyse der Mischungsgüte leicht erklären. Das Ergebnis dieser Analyse wird in Abb. 6.42b gezeigt. In dieser Abbildung sind zum einen die resultierenden Rußmassenverläufe dargestellt, die nicht nur im Endergebnis (Faktor 2), sondern auch in der Ausprägung der Rußbildungs- und Rußoxidationsphase unterschiedlich sind. Zum anderen sind hier die sogenannten Lambda-Bänder dargestellt. Diese Lambda-Bänder zeigen den Massenanteil von CFD-Zellen mit einem bestimmten lokalen Luftverhältnis bezogen auf die Masse aller CFD-Zellen, die Kraftstoff enthalten. Bei einer Quetschspalthöhe von 1.64 mm weisen beispielsweise bei 40°KW n. OT ca. 55% aller Kraftstoff enthaltenden CFD-Zellen ein lokales Kraftstoffverhältnis auf, das 0.9 oder höher ist. Im Falle einer Quetschspalthöhe von 2.37 mm sind es dagegen nur 40%. Bei einer Quetschspalthöhe von 2.37 mm sind demnach bei 120°KW n. OT 30% aller Kraftstoff enthaltenden Zellen fett (lokales Luftverhältnis zwischen 0.7 und 0.9). In diesen Zellen überwiegt verständlicherweise die Rußbildung, solange die lokalen Temperaturen hoch genug sind. Dies erklärt sowohl die intensive Rußbildungs- als auch die schwache Rußoxidationsphase. Damit lässt sich auch die Rußmasse im Abgas erklären, die bei einer Quetschspalthöhe von 2.37 mm doppelt so hoch ist. Diese Diskussion verdeutlicht die entscheidende Bedeutung der Quetschspalthöhe für die Qualität der Gemischbildung im realen Motor und in der Simulation. Die Gemischbildung hat eine besondere Bedeutung für die Bildung und Oxidation von Ruß. Damit lässt sich eine hochqualitative Simulation der Rußbildung und Rußoxidation nur mit hochqualitativen Gittern im Vollmotor erreichen..

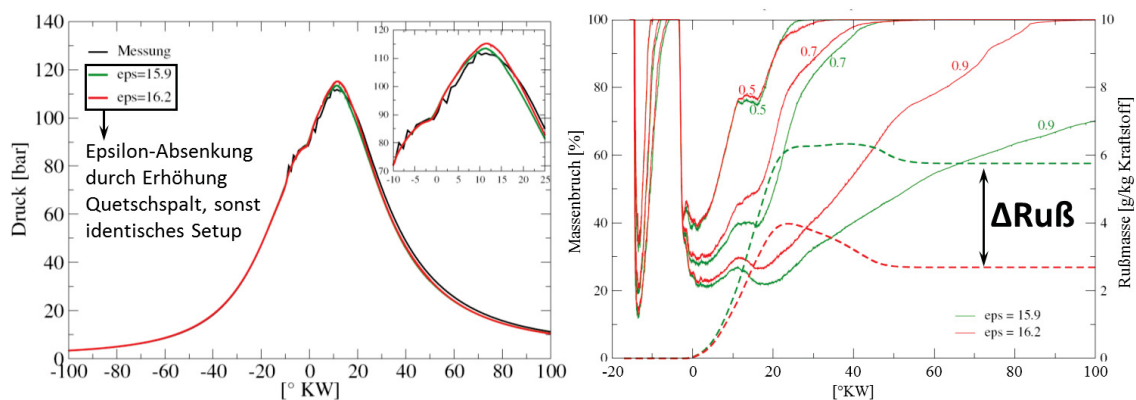


Abbildung 6.42.: (a) Druckverläufe und (b) Rußverläufe und Lambda-Bänder bei einer Erhöhung des Quetschspalts

6.6.4.2. Einfluss Spritzbeginn

In modernen Dieselmotoren kommen fast ausschließlich Common-Rail-Einspritzsysteme zum Einsatz. Die Injektoren werden dabei elektrisch angesteuert, weswegen der Ansteuerbeginn und die Ansteuerdauer sehr genau messbar sind. Der genaue Spritzbeginn lässt sich dagegen nicht leicht ermitteln. Zur Bestimmung der Zeit zwischen Ansteuer- und Spritzbeginn werden häufig hydraulische Simulationen durchgeführt oder zeitlich hoch aufgelöste Einspritzkammeraufnahmen analysiert. Trotzdem ist der berechnete Spritzbeginn mit einer gewissen Unsicherheit behaftet, die durch eine Plausibilisierung anhand des Brennverlaufs (s. Kapitel 6.2) verringert werden kann. Der Zeitaufwand zur Bestimmung des Spritzbeginns, nur einer der vielen Inputparameter, ist also erheblich, aber zwingend notwendig. Dies soll in diesem Unterkapitel anhand einer weiteren Rechenstudie demonstriert werden.

Als Basis für die Rechenstudie dient das Grundsetup der Spritzbeginnvariation, die zur Validierung des Rußmodells durchgeführt wurde (s. Kapitel 6.3.3). Der Spritzbeginn wurde für diese Rechenstudie um 1.0°KW nach spät verstellt: von 0°KW auf 1°KW . Der daraus resultierende Unterschied im Druckverlauf ist sichtbar, aber nicht sehr stark ausgeprägt.

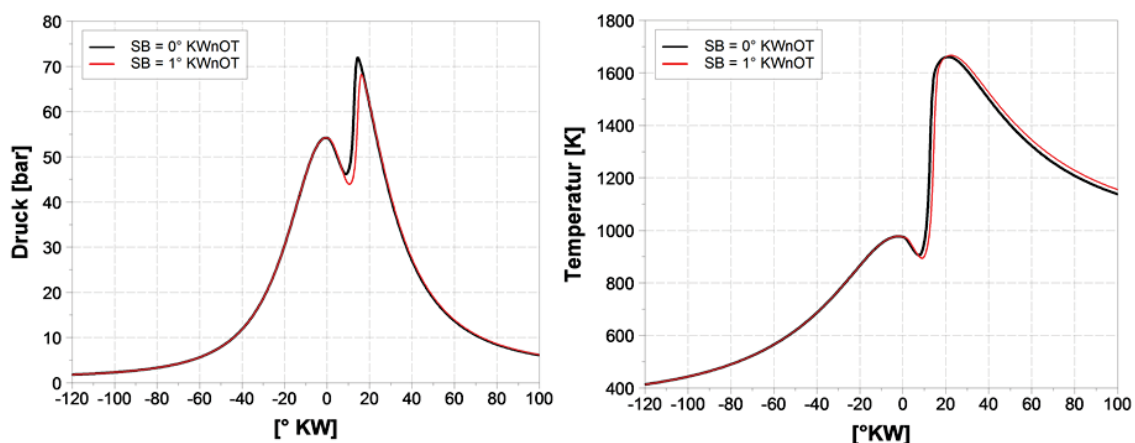


Abbildung 6.43.: Druck- und Temperaturverlauf bei Verstellung des Spritzbeginns um 1°KW nach spät

Die Rußmasse im Abgas unterscheidet sich dagegen sehr deutlich. Sie ist im Falle von $\text{SB} = 1^\circ\text{KW}$ 40% niedriger als im Basisfall bei $\text{SB} = 0^\circ\text{KW}$. Die geringfügige Spritzbeginnverstellung, insbesondere in der Nähe vom oberen Totpunkt hat nur einen unwesentlichen Einfluss auf die Gemischbildung, wie an der Ausprägung des Rußmassenverlaufs und insbesondere an der Lage seines Maximums abzulesen ist. Also ist die Güte der Gemischbildung nicht die Ursache für die wesentlich geringere Rußmasse im Abgas. Schon bei der Analyse der motorischen Rußphänomene wurde festgestellt, dass es meistens die Verbrennungstemperaturen sind, die einen ausschlaggebenden Einfluss auf die Intensität der Rußreaktionen haben. Diese Rechenstudie liefert eine weitere Bestätigung dafür. Die Massenmitteltemperaturen sind deutlich niedriger bei $\text{SB} = 1^\circ\text{KW}$ – insbesondere in der Rußbildungsphase zwischen 10°KW und 25°KW (s. Abb. 6.44) – wodurch die Rußbildung weniger intensiv abläuft.

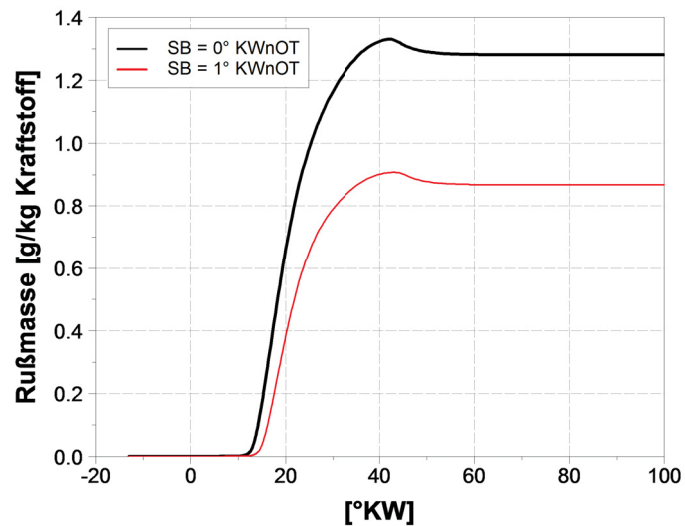


Abbildung 6.44.: Rußmassenverlauf bei Verstellung des Spritzbeginns um 1°KW nach spät

Diese deutlichen Unterschiede im Rußmassenverlauf bei doch ähnlichen Druckverläufen demonstrieren zum einen die Notwendigkeit einer sehr genauen Bestimmung des Spritzbeginns und zum anderen die Untauglichkeit der Druckverläufe als Kriterium zur Bewertung der Simulationsqualität.

7. Zusammenfassung und Ausblick

7.1. Zusammenfassung

Das Hauptziel dieser Arbeit ist die Bereitstellung eines Ruß- und eines NO_x -CFD-Simulationsmodells, die die dieselmotorische Brennverfahrensentwicklung effizient unterstützen und zum besseren Verständnis der motorischen Rohemissionsbildungsprozesse beitragen sollen. Als Basis für die Entwicklung des Ruß- und NO_x -Modells diente das Steady-State-Flamelet-Modell. Unter der Annahme, dass die Schadstoffchemie langsam im Vergleich zu den turbulenten Längenskalen ist, wurden die Ruß- und NO_x -Reaktionsraten mit Hilfe des Steady-State-Flamelet-Modells vorausberechnet und in einer Bibliothek tabelliert. Der wesentliche Vorteil dieses Konzepts liegt darin, dass es die Berücksichtigung detaillierter Schadstoffchemie bei herausragender CPU-Zeit-Effizienz ermöglicht. Gleichzeitig sind gerade die Erstellung der Quelltermbibliotheken sowie deren Kopplung zum CFD-Code die großen Herausforderungen, die für eine zuverlässige Schadstoffsimulation mit dem Steady-State-Flamelet-Modell gemeistert werden sollen. Dieses Modell hat außerdem hinsichtlich Schadstoffsimulation prinzipbedingte Nachteile. Der Modellierungsschwerpunkt dieser Arbeit lag deswegen auf der Entwicklung von zwei Teilmodellen - dem Acetylen-Feedback und dem Temperaturprofilenansatz - die durch eine verbesserte Kopplung zwischen dem CFD-Code und den Rohemissionsmodellen diese Nachteile kompensieren.

Das Ziel, das bei der Entwicklung des Acetylen-Feedbacks verfolgt wurde, war ein realistisches Rußbildungsverhalten hinsichtlich Oberflächenwachstums zu realisieren. Zu diesem Zweck wurden die Oberflächenwachstumsraten im Laufe der CFD-Rechnung unter Berücksichtigung der lokalen Acetylenkonzentration limitiert. Acetylen gehört zu den Spezies, die hoch reaktiv sind und in der Realität schnell aufgebraucht werden. In der stationären Flamelet-Lösung findet es aber nicht bei jedem Mischungsbruch einen Reaktionspartner. Des Weiteren ist das Oberflächenwachstum eine der Hauptquellen des Acetylenverbrauchs bei niedrigen Verbrennungstemperaturen. Bei stationären Flamelet-Rechnungen kann diese Tatsache nicht berücksichtigt werden, da das Oberflächenwachstum von der lokalen Rußoberfläche abhängt, die während der Flamelet-Rechnung nicht bekannt ist. Ist Ober-

flächenwachstum eine der Hauptquellen des Acetylenverbrauchs, werden die Acetylenkonzentration während der Flamelet-Rechnung und folglich die Rußemissionen bei niedrigen Verbrennungstemperaturen signifikant überschätzt. Durch die Limitierung der Oberflächenwachstumsrate unter Berücksichtigung der lokalen Acetylenkonzentration konnte dieser Nachteil des Steady-State-Flamelet-Modells eliminiert werden und ein realistisches Rußbildungsverhalten bei niedrigen Verbrennungstemperaturen realisiert werden.

Durch den Temperaturprofilenansatz kann die Temperaturkonsistenz zwischen CFD-Code und den Schadstoffmodellen gewährleistet werden. Kalorische Unterschiede zwischen dem Verbrennungs- und den Schadstoffmodellen führen bei dem Steady-State-Flamelet-Modell zu Unterschieden zwischen der mittleren Zelltemperatur und der Flamelet-Temperatur bei dem jeweiligen Mischungsbruch. Bei dem Temperaturprofilenansatz wird deshalb die Zellenmitteltemperatur direkt mit einer gemittelten Flamelet-Temperatur verglichen. Der wesentliche Vorteil hierbei ist, dass dadurch etwaige Ungenauigkeiten bei der Berechnung der für die Quellterme wichtigen Oxidatorseitentemperatur eliminiert werden. Damit konnte das Einfrieren der Rußreaktionen in der Expansionsphase sehr gut abgebildet werden.

Eine zentrale Voraussetzung für zuverlässige Schadstoffsimulation ist die korrekte Abbildung von lokaler Temperatur und lokalem Mischungsbruch. Dazu sind konsistente CFD-Setups unabdingbar. Besonders wichtig dabei sind das thermodynamische Verdichtungsverhältnis, der Spritzbeginn und die Düsenposition. Außerdem soll die Verbrennung bestimmte Qualitätskriterien erfüllen, die in dieser Arbeit quantifiziert wurden. Der Einfluss dieser Randbedingungen auf das Simulationsergebnis wurde im Rahmen von Sensitivitätsanalysen beleuchtet. Angesichts der Wichtigkeit der Netztopologie für die Schadstoffsimulation wurde die Eignung stark vereinfachter Sektornetze in Frage gestellt. Um dies zu klären wurden Vollnetze auf Basis detaillierter Geometrie eingesetzt. Der Vergleich zwischen Sektor- und Vollnetzen ergab deutliche Unterschiede in der Ausbreitung des Einspritzstrahls, die auf die unterschiedlichen Quetschspalthöhen zurückzuführen sind. Die Aufteilung des Kraftstoffs zwischen Mulde und Quetschspalt ist ebenfalls unterschiedlich. Diese Differenzen haben einen wesentlichen Einfluss auf Verbrennung und Schadstoffbildung. In dieser Arbeit wurde aufgezeigt, dass Sektornetze trotzdem für Schadstoffsimulationen eingesetzt werden können. Zwingende Voraussetzung dafür ist ein Drallzahlverlauf nach Spritzbeginn, der demselben im Vollnetz entspricht.

Die Validierungsergebnisse stellen die Fähigkeit des in dieser Arbeit entstandenen CFD-Pakets dieselmotorische Rußphänomene korrekt abzubilden deutlich unter Beweis. Neben trivialen Zusammenhängen – wie zwischen Sauerstoffkonzentration und Rußmasse im Abgas – wurden auch gegenläufige Effekte – wie im Falle einer Spritzbeginnvariation vorliegend – vom Rußmodell richtig abgebildet. Die resultierende Rußmasse korrelierte dabei sehr gut mit der experimentell bestimmten Rußmasse im Abgas. Des Weiteren konnte das Trade-off zwischen Ruß und Verbrennungsgeräusch bei einer Variation der hydraulischen Pause zwischen Vor- und Haupteinspritzung korrekt wiedergegeben werden. Ein weiterer Bestandteil der Rußmodellvalidierung in dieser Arbeit stellte die Analyse von Simulationsrußmassenverläufen und experimentellen KL-Verläufen dar. Da diese Verläufe nicht miteinander verglichen werden dürfen, wurde in dieser Arbeit eine neue Methodik

vorgeschlagen, mit der lokale Rußsimulationsergebnisse anhand optischer Aufnahmen an Transparentaggregaten validiert werden können. Mit dieser neuen Methodik ergab sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Rußsimulationsergebnissen, die mit dem in dieser Arbeit entwickelten Rußmodell erzielt wurden, und optischen Aufnahmen an einem Transparentaggregat. Eine zentrale Erkenntnis dieser Untersuchungen war die Anwesenheit beträchtlicher Rußoxidation auch in Betriebspunkten, bei denen der KL-Verlauf keine ausgeprägte Bildungs- und Oxidationsphase aufweist.

Nach der Validierung des CFD-Gesamtpakets wurden damit Wirkmechanismen der dieselmotorischen Rußbildung untersucht. Dabei wurden Ort und Intensität der lokalen Rußbildungs- und Rußoxidationsprozesse verdeutlicht. Im Rahmen einer detaillierten Analyse zweier Betriebspunkte aus einer Spritzbeginnvariation wurde festgestellt, dass die Intensität der Rußbildung insbesondere von der Temperatur der fetten Gemischzonen und nicht so sehr von der Güte der Gemischbildung abhängt. Der detaillierte Vergleich zwischen zwei Betriebspunkten einer AGR-Variation zeigte wiederum, dass die Rußoxidation nicht wegen Sauerstoffmangels sondern wegen zu niedriger lokaler Temperaturen einfriert. Aus den beiden Erkenntnissen kann gefolgert werden, dass für das untersuchte Brennverfahren die Verbrennungstemperaturen einen wesentlich größeren Einfluss auf die Rußbildung und die Rußoxidation als die Gemischbildung haben.

7.2. Ausblick

Die Validierung der in dieser Arbeit entwickelten Schadstoffmodelle zeigte Modellbereiche auf, in denen Verbesserungspotenzial besteht. Für die korrekte Beschreibung der Schadstoffchemie in den Steady-State-Flamelets sind beispielsweise Mehrkomponentenkraftstoffe, die Aromatenanteile aufweisen, sicherlich besser geeignet als simple Modellkraftstoffe wie *n*-Heptan. Die Genauigkeit der Quelltermberechnung kann außerdem gesteigert werden, indem die mathematische Modellierung der Quellterme in der Ruß- und NO_x-Quelltermbibliothek verbessert wird oder sogar wegfällt. Letzteres ist möglich, wenn die kompletten Quelltermbibliotheken direkt tabelliert und die Quellterme mittels eines geeigneten Interpolationsverfahrens berechnet werden. Die Voraussetzungen dafür sind allerdings deutlich höhere CPU- und Arbeitsspeicherkapazitäten. Die Ergebnisqualität der Schadstoffsimulation kann weiterhin durch die Berücksichtigung der Schadstoffverteilung im Mischungsbruchraum gesteigert werden. Dazu können Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen eingesetzt werden. Theoretisch noch besser argumentiert sind die CMC-Modelle zweiter Ordnung, die bisher aus Rechenzeitgründen nur bedingt für den industriellen Einsatz geeignet waren. Durch Fortschritte in der Modellierung der Strahlbildung, Zündung, Gemischbildung und letztendlich Verbrennung können die lokalen Temperaturen und Mischungsbrüche genauer abgebildet werden, wodurch die Randbedingungen für die Schadstoffmodelle verbessert werden.

Die Validierung des Rußmodells, das im Rahmen dieser Arbeit entstanden ist, kann durch eine quantitative Bewertung der lokalen Rußkonzentrationen ergänzt werden. Dazu sind allerdings motorische Versuchsdaten weniger geeignet, weswegen hierbei experimentelle Daten aus Kammerversuchen (z. B. aus [43]) herangezogen werden sollen.

Literaturverzeichnis

- [1] <http://oica.net/category/economic-contributions/facts-and-figures/> , International Organization of Motor Vehicle Manufacturers, aufgerufen am 17.10.2013
- [2] <http://www.dieselnet.com/standards/eu/ld.php>, aufgerufen am 17.10.2013
- [3] <http://oica.net/category/climate-change-and-co2/> , International Organization of Motor Vehicle Manufacturers, aufgerufen am 17.10.2013
- [4] Langen, W.: Entwurf einer Stellungnahme zu dem Vorschlag für eine Verordnung des Europäischen Parlaments und des Rates zur Festsetzung von Emissionsnormen für neue Personenkraftwagen im Rahmen des Gesamtkonzepts der Gemeinschaft zur Verringerung der CO₂-Emissionen von Personenkraftwagen und leichten Nutzfahrzeugen, KOM(2007)0856 – C6-0022/2008 – 2007/0297(COD)
- [5] Merker, G. P., Stiesch, G., Otto, F.: Grundlagen Verbrennungsmotoren, Vieweg+Teubner, GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden 2009
- [6] Spicher, U.: Verbrennungsmotoren A, Vorlesungsumdruck, Institut für Kolbenmaschinen, Universität Karlsruhe (TH), 2005
- [7] Blessing, M.: Untersuchung und Charakterisierung von Zerstäubung, Strahlausbreitung und Gemischbildung aktueller Dieseleinspritzsysteme, Dissertation, Universität Stuttgart, 2004
- [8] Heywood, J. B.: Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill, New York, 1988
- [9] Pischinger, S.: Verbrennungsmotoren, Vorlesungsumdruck, RWTH Aachen, 2001
- [10] Steiner, R.: Modellbildung und strömungsmechanische Simulation der dieselmotorischen Verbrennung, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 2004
- [11] Pischinger, R., Kraßnig, G., Taučar, G., Sams, T.: Thermodynamik der Verbrennungskraftmaschine, Springer Verlag, Wien, 1989
- [12] Bockhorn, H., (Ed.): Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models, Springer Series in Chemical Physics, Vol. 59, Springer-Verlag, Berlin, 1994
- [13] McEnally, C. S., Ciuparu, D. M., Pfefferle, L. D.: Experimental study of fuel decomposition and hydrocarbon growth processes for practical fuel components: heptanes, Combust. Flame, Vol. 134, 339–359, 2003

-
- [14] Frenklach, M., Wang, H.: Detailed Mechanism and Modeling of Soot Particle Formation, in Soot Formation in Combustion: Mechanisms and Models (H. Bockhorn, Ed.), Springer Series in Chemical Physics, Vol. 59, Springer-Verlag, Berlin, 1994, pp. 162-190
- [15] Mauß, F.: Entwicklung eines kinetisches Modells der Rußbildung mit schneller Polymerisation, Dissertation, RWTH Aachen, 1997
- [16] McEnally, C. S., Pfefferle, L. D., Atakan, B., Kohse-Höinghaus, K.: Studies of aromatic hydrocarbon formation mechanisms in flames: Progress towards closing the fuel gap, Prog. Energy and Combust. Sci., Vol. 32, 247–294, 2006
- [17] Mathis, U., Mohr, M., Kaegi, R., Bertola, A., Boulouchos, K.: Influence of Diesel Engine Combustion Parameters on Primary Soot Particle Diameter, Environ. Sci. Technol., Vol. 39, i5, 1887–1892, 2005
- [18] Rauchwertmessung mit der Filterpapiermethode: Application Notes, AVL Dokumentation, AT1007D, Rev. 02, Juni 2005
- [19] Emission Test Instruments: AVL 415S Smoke Meter - The New Correlation Curve, AVL Dokumentation, Oktober 2002
- [20] Seinfeld, J. H.: Atmospheric Chemistry and Physics of Air Pollution, Wiley, New York, 1986
- [21] Smith, R. C., Prezelin, B. B., Baker, K. S., Bidigare, R. R., Boucher, N. P., Coley, T., Karentz, D., MacIntyre, S., Matlick, H. A., Menzies, D.: Ozone depletion: ultraviolet radiation and phytoplankton biology in antarctic waters, Science Magazine, Vol. 255, 952-959, 1992
- [22] Warnatz, J., Maas, U., Dibble, R. W.: Verbrennung: Physikalisch-chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung, Springer Verlag, Berlin, 2001
- [23] Miller, J. A., Bowman, C. T.: Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 15, 287–338, 1989
- [24] Liu, Y., Amr, A., Reitz, R. D.: Simulation of Effects of Valve Pockets and Internal Residual Gas Distribution on HSDI Diesel Combustion and Emissions, SAE paper 2004-01-0105, 2004
- [25] Hill, P. G., McTaggart-Cowan, G. P.: Nitrogen Oxide Production in a Diesel Engine Fueled by Natural Gas, SAE paper 2005-01-1727, 2005
- [26] Upatnieks, A., Mueller, C. J., Martin, G. C.: The Influence of Charge-Gas Dilution and Temperature on DI Diesel Combustion Processes Using a Short-Ignition-Delay, Oxygenated Fuel, SAE paper 2005-01-2088, 2005
- [27] Bressloff, N.W., Moss, J.B., and Rubini, P.A.: Proc., Comb. Inst. Vol. 26 (1996) p.2379.
- [28] Owen, K.; Coley, T.: Automotive Fuels Reference Book, SAE International, Warrendale, 1995

- [29] Nakakita, K., Ban, H., Takasu, S., Hotta, Y., Inagaki, K., Weissman, W., Farrel, J. T.: Effect of hydrocarbon molecular structure in diesel fuel on in-cylinder soot formation and exhaust emissions”, SAE Paper 2003-01-1914, 2003
- [30] Nakov, G.: Untersuchung des Kraftstoffeinflusses auf das CHHC-Brennverfahren, Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH), 2006
- [31] Figer, G.: Homogene Selbstzündung und Niedertemperaturbrennverfahren für direkteinspritzende Dieselmotoren mit niedrigsten Partikel- und Stockoxidemissionen, Dissertation, Technische Universität Graz, 2003
- [32] Pischinger, F., Schulte, H., Hansen, J.: Grundlagen und Entwicklungslinien der Dieselmotorischen Brennverfahren, VDI Berichte 714, Die Zukunft des Dieselmotors, 1988
- [33] Kamimoto, T., Bae, M.: High Combustion Temperature for the Reduction of Particulate in Diesel Engines, SAE-Paper 880423, 1988
- [34] Wünsche, P., Moser, F., Dreisbach R., Sams, T.: Can the Technology for Heavy Duty Engines be Common for Future Emission Regulations in USA, Japan and Europe?, SAE-Paper 2003-01-0344, 2003
- [35] Spicher, U., Velji, A., Anca, R., Wagner, U.: Homogene Dieselerbrennung mit innerer und äußerer Gemischbildung, 5. Dresdner Motorenkolloquium, 2003
- [36] Wagner, U., Anca, R., Velji, A., Spicher, U.: An Experimental Study of Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) with Various Compression Ratios, Intake Air Temperatures and Fuels with Port and Direct Fuel Injection, SAE-Paper, 2003-01-2293, 2003
- [37] Szybist, J. P., Bunting, B. G.: Cetane Number and Engine Speed Effects on Diesel HCCI Performance and Emissions, SAE-Paper, 2005-01-3723, 2005
- [38] www.diganars.com
- [39] Wagner, U., Anca, R., Velji, A., Spicher, U., Pöttker, S., Merker, G. P.: HCCI Combustion with Various Fuels for Heavy and Light Duty Engines. In Proc. ASME 2005 Spring Technical Conference, ICES2005-1091, 2005
- [40] Helmantel, A., Denbratt, I.: HCCI Operation of a Passenger Car Common Rail DI Diesel Engine With Early Injection of Conventional Diesel Fuel, SAE-Paper, 2004-01-0935, 2004
- [41] Kimura, S., Aoki, O., Kitahara, Y., Aiyoshizawa, E.: Ultra-Clean Combustion Technology Combining a Low-Temperature and Premixed Combustion Concept for Meeting Future Emission Standards. SAE 2001-02-0200, 2001
- [42] Kimura, S., Aoki, O., Ogawa, H., Muranaka, S., Enomoto, Y.: New Combustion Concept for Ultra-Clean and High-Efficiency Small DI Diesel Engines. SAE 1999-01-3681, 1999
- [43] Siebers: Paper bzgl. Ruß und Lift-off-Längen in Abhängigkeit von Druck und Temperatur

-
- [44] Truckenbrodt, E.: Fluidmechanik, Band 1, Springer-Verlag, Berlin, 3. Auflage, 1992
- [45] Hirsch, C.: Numerical Computation of Internal and External Flows, Vol.1 Fundamentals of Numerical Discretisation, Wiley Sons: Chichester, New York, 1988
- [46] Peters, N.: Turbulent Combustion, Cambridge Press, 2000
- [47] Oertel, H.: Strömungsmechanik. Vieweg-Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 1999
- [48] STAR-CD 3.26 User Manual. Computational Dynamics Ltd, London, 2005
- [49] Krüger, C.: Validierung eines 1D-Spraymodells zur Simulation der Gemischbildung in direkt einspritzenden Dieselmotoren. Universität Aachen. Dissertation, 2001
- [50] Burke, S. D., Schumann, T. E. W.: Diffusion Flames, Ind. Eng. Chem., 20, p.998, 1928
- [51] Peters, N.: Laminar Diffusion Flamelet Models in Non-Premixed Turbulent Combustion, Prog. Energy Combustion Sci., 10, S.319-339, 1984
- [52] Jones, W. P., Whitelaw, J. H.: Calculation Methods for Turbulent Flows: A Review, Combust. Flame, Vol. 48, S. 1 – 26, 1982
- [53] Reveillon, J., Vervisch, L.: Spray Vaporization in Nonpremixed Turbulent Combustion Modeling: A Single Droplet Model, Combust. and Flame, 121:75-90, 2000
- [54] Williams, F.A.: Spray Combustion and Atomization, Phys. Fluids, Band 1, S. 541-545, 1958
- [55] Dukowicz, J.K.: A Particle-Fluid Numerical Model for liquid Sprays, J. of Comput. Phy., Band 35, Nr.2, S.229-253, 1980
- [56] Wan, Y.: Numerical Study of Transient Fuel Sprays with Autoignition and Combustion under Diesel-Engine relevant Conditions, Dissertation, Universität Aachen, 1997
- [57] Wan, Y., Peters, N.: Scaling of Spray Penetration with Evaporation, Atomization and Sprays, Band 9, S. 111-132, 1999
- [58] Hallmann, M., Scheurlen, M., Wittig, S.: Computation of Turbulent Evaporating Sprays: Eulerian vs. Lagrangian Approach, ASME Winter Annual Meeting, Cincinnati, 1993
- [59] Streule, T.: Dreidimensionale Simulation von Selbstzündung, Verbrennung und Schadstoffbildung in DE-Dieselmotoren, Universität Karlsruhe, Dissertation, 2000.
- [60] 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
- [61] 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

- [62] 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
- [63] 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
- [64] Abraham, J., Bracco, F., Reitz, R.D.: Comparisons of Computed and Measured Premixed Charge Engine Combustion, *Combustion and Flame*, 60:309-322, 1985
- [65] 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 2004-01-0106, 2004
- [66] Haynes, B. S., Wagner H. Gg.: Soot formation. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 7:229–273, 1981
- [67] Glassmann, I.: Soot formation in combustion processes. In *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, S. 295–311. The Combustion Institute, 1988
- [68] Frenklach, M.: Reaction mechanism of soot formation in flames. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 4:2028–2037, 2002
- [69] Kennedy, I. M.: Models of Soot Formation and Oxidation. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 23:95-132, 1997
- [70] Hiroyasu H., Kadota T., Arai M.: Development and use of a spray combustion modeling to predict diesel engine efficiency and pollutant emissions. *Bull Jap Soc Mech Eng* 1983, 26(214):569
- [71] Edelman, R. B., Harsha, P. T.: Laminar and Turbulent Gas Dynamics in Combustors – Current Status. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 4:1-62, 1978
- [72] Hudson, J. L., Heicklen, J.: Theory of Carbon Formation in Vapor-Phase Pyrolysis. *Carbon*, 6:405-418, 1968
- [73] Mehta, P. S., Das, S.: A Correlation for Soot Concentration in Diesel Exhaust Based on Fuel-Air Mixing Parameters. *Fuel*, 71:689-692, 1992
- [74] Rizk, N. K., Mongia, H. C.: Further Validation of a Semi-Analytical Approach for Fuel Injectors of Different Concepts. *Proc. Joint Propulsion Conference*, 6:660-667, 1990
- [75] Khan, I. M., Greeves, G., Probert, D. M.: *Air Pollution Control in Transport Engines*, Vol. C142/71, S. 205 – 217, The Institution of Mechanical Engineers, London, 1971
- [76] Khan, I. M., Greeves, G.: *International Seminar*, Trogir, Yugoslavia, 1973
- [77] Patterson, M., Kong, S.-C., Hampson, G., Reitz, R. D.: Modeling the Effects of Fuel Injection Characteristics on Diesel Engine Soot and Nox Emissions, SAE-Paper 940523, 1994

-
- [78] Nakov, G., Mauss, F., Wenzel, P., Steiner, R., Krüger, C., Zhang, Y., Rawat, R., Borg, A., Perlman, C., Fröjd, K., Lehtiniemi, H., “Soot Simulation under Diesel Engine Conditions Using a Flamelet Approach”. SAE Technical Paper 2009-01-2679, 2009.
- [79] Nagle, J., and Strickland-Constable, R. F., In: Proc. of the Fifth Carbon Conference, 1962.
- [80] Hountalas, D. T., Mavropoulos, G. C., Binder, K. B.: Effect of exhaust gas recirculation (EGR) temperature for various EGR rates on heavy duty DI diesel engine performance and emissions. Prog. Energy Combust. Sci. Vol. 33, S. 272-283, 2008
- [81] Smith, G.: A Simple Nucleation/Depletion Model for the Spherule Size of Particulate Carbon. Combust. Flame 48, 265-272, 1982
- [82] Bradley, D., Dixon-Lewis, G., El-Din Habik, S., Mushi, E. M. J.: In Twentieth Symposium (International) on Combustion, S. 931, Pittsburgh, 1984. The Combustion Institute
- [83] Tao, F., Srinavas, S., Reitz, R. D., Foster, D. E.: Comparison of Three Soot Models Applied to Multi-Dimensional Diesel Combustion Simulations. JSME International Journal, Series B, Vol. 48, No.4: 671-678, 2005
- [84] Fusco, A., Knox-Kelecy, A. L., Foster, D. E.: Application of a Phenomenological Soot Model for Diesel Engine Combustion, COMODIA 94, S. 571 – 576, 1994
- [85] Leung, K. M., Lindstedt, R. P., Jones, W. P.: A Simplified Reaction Mechanism of Soot Formation in Non-Premixed Flames, Combust. Flame, Vol. 87, S. 289 – 305, 1991
- [86] Zellat, M., Rolland, Th., Poplow, F.: Three-Dimensional Modeling of Combustion and Soot Formation in an Indirect Injection Diesel Engines, SAE-Paper 900254, 1990
- [87] Nakakita, K., Nagaoka, M. Fujikawa, T., Ohsawa, K., Yamaguchi, S.: Photographic and Three-Dimensional Numerical Studies of Diesel Soot Formation Process, SAE-Paper 902081, 1990
- [88] Gorkhovski, M., Borghi, R.: Numerical Simulation of Soot Formation and Oxidation in Diesel Engines, SAE-Paper 930075, 1993
- [89] Belardini, P., Bertoli, C., Del Giacomo, N., Iorio, B.: Soot Formation and Oxidation in a DI Diesel Engine: A Comparison between Measurements and Three-Dimensional Computations, SAE-Paper 932658, 1993
- [90] Belardini, P., Bertoli, C., Beatrice, C., D’Anna, A., Del Giacomo, N.: Application of a Reduced Kinetic Model for Soot Formation and Burnout in Three-Dimensional Diesel Combustion Computations, Proc. Combust. Inst., Vol. 26, S. 2517 – 2524, 1996
- [91] Tao, F., Foster, D. E., Reitz, R. D.: Characterization of soot particle distribution in conventional, non-premixed DI diesel flame using a multi-step phenomenological soot model. Proc. of the Comb. Inst. Vol. 31 S. 2991–2998, 2007
- [92] Kazakov, A., Foster, D. E.: Modeling of Soot Formation during DI Diesel Combustion Using a Multi-Step Phenomenological Model, SAE-Paper 982463, 1998

- [93] Tao, F., Golovitchev, V. I., Chomiak, J.: Application of Complex Chemistry to Investigate Combustion Zone Structure of DI Diesel Sprays under Engine-Like Conditions, COMODIA 2001, S. 92-100, 2001
- [94] Tao, F.: Numerical Modelling of Soot and NO_x Formation in Non-Stationary Diesel Flames with Complex Chemistry. Dissertation. Chalmers University of Technology, 2003
- [95] Hong, S., Wooldrige M. S., Im, H. G., Assanis, D. N., Pitsch, H.: Development and application of a comprehensive soot model for 3D CFD reacting flow studies in a diesel engine. *Combust. Flame* 143 (2005) 11-26.
- [96] Vishwanathan, G., Reitz, R.: Modeling soot formation using reduced polycyclic aromatic hydrocarbon chemistry in *n*-heptane lifted flames with application to low-temperature combustion. *J. Eng. Gas Turbines Power* 131 (3) 032801, 2009.
- [97] Tesner, P. A., Snegiriova, T. D., Knorre, V. G.: Kinetics of Dispersed Carbon Formation. *Combust. Flame*, 17:253-260, 1971
- [98] Magnussen, B. F., Hjertager, B. H.: On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In Sixteenth Symposium (International) on Combustion, S. 719–729, Pittsburgh, The Combustion Institute, 1977
- [99] Nakov, G., Mauss, F., Wenzel, P., Krüger, C., “Application of a Stationary Flamelet Library Based CFD Soot Model for Low-NO_x Diesel Combustion”. Thiesel-Paper, 2010
- [100] Wenzel, P., Steiner, R., Krüger, C., Schießl, R., Hofrath, C., Maas, U. “3D-CFD Simulation of DI-Diesel Combustion applying a Progress Variable Approach accounting for detailed Chemistry”. SAE Technical Paper 2007-01-4137, 2007.
- [101] Ahmed, S.S., and Mauss, F., Moreac, G., Zeuch, T., A comprehensive and compact *n*-heptane oxidation model derived using chemical lumping, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2007, 9, 1107–1126.
- [102] A.S. Tomlin, T. Turanyi, M.J. Pilling, Mathematical tools for the construction, investigation and reduction of combustion mechanisms, in: M.J. Pilling (Ed.), *Low Temperature Combustion and Autoignition*, Elsevier, Amsterdam, 1997, pp. 293–437, Chapter 4.
- [103] Saylam, A., Ribaucour, M., Pitz, W.J., Minetti, R., *Int. J. Chem. Kinet.* 39, p. 181–195, 2007.
- [104] Maroteaux, F., Noel, L., *Combust. Flame* 146, p. 246–267, 2006.
- [105] Barba, C.: Erarbeitung von Verbrennungskennwerten aus Indizierdaten zur verbesserten Prognose und rechnerischen Simulation des Verbrennungsablaufes bei Pkw-DE-Dieselmotoren mit Common-Rail-Einspritzung, Dissertation, ETH Zürich, 2001
- [106] Bertsch, D.: Experimentelle Untersuchungen zum Einfluß gemischbildungsseitiger Maßnahmen auf den Zündprozeß, Verbrennung und Schadstoffbildung an einem optisch zugänglichen DE-Dieselmotor, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), 1999

-
- [107] Pinson, J. A., Ni, T., Litzinger, T. A. „Quantitative Imaging Study of the Effects of Intake Air Temperature on Soot Evolution in an Optically-Accessible DI Diesel Engine“. SAE-Paper 942044, 1994
- [108] Brookes, S. J., Moss, J. B.: Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, 116:486–503, 1999
- [109] Harris, S. J.: Surface growth and soot particle reactivity. *Combustion Science and Technology*, 72:67–77, 1990
- [110] Xu, F., Sunderland, P. B., Faeth, G. M.: Soot formation in laminar premixed ethylene / air flames at atmospheric pressures. *Combustion and Flame*, 108:471–493, 1997
- [111] Leung, K. M., Lindstedt, R. P., Jones, W. P.: A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames. *Combustion and Flame*, 87:289–305, 1991
- [112] Kronenburg, A., Bilger, R. W., Kent, J. H.: Modeling soot formation in turbulent methane-air jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, 121:24–40, 2000
- [113] Haynes, B. S., Jander, H., Wagner, H. Gg: The effect of metal additives on the formation of soot in premixed flames. In *Seventeenth Symposium (International) on Combustion*, pages 1365–1374, Pittsburgh, The Combustion Institute, 1979
- [114] Wersborg, B. L., Howard, J. B., and Williams, G. C.: Physical mechanisms in carbon formation in flames. In *Fourteenth Symposium (International) on Combustion*, pages 929–940, Pittsburgh, The Combustion Institute, 1973
- [115] König, G., Koyanagi, K., Zahn, M.: Dokumentation Farbtemperaturmessgerät FTM2000, Interne Dokumentation Daimler AG, 2000
- [116] B. Lawton, G. Klingenberg, *Transient Temperature in Engineering and Science*, Oxford University Press, 1996.
- [117] Shaw, B.D., Dakka, S.M.: Theory of Influence of Fuel Pyrolysis on Soot Shell Standoff Ratios in Reduced-Gravity Droplet Combustion, *Combust. Sci. and Tech.*, 177, pp. 1939-1959, 2005.
- [118] Siegel, R. and Howell, J.R., *Thermal Radiation Heat Transfer*, Hemisphere Publishing, Washington, 1981.
- [119] Kleiveland, R. N.: Modelling of Soot Formation and Oxidation in Turbulent Diffusion Flames, Norwegian University of Science and Technology, Doktorarbeit, 2005
- [120] Frenklach, M., Clary, D. W., Gardiner, J., Stein, S. E.: *Twentieth Symposium (International) on Combustion*, S. 887-901, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1984
- [121] Balthasar, M., Mauss, F., Knobel, A., Kraft, M.: Modeling of soot formation in a partially stirred plug flow reactor. *Combustion and Flame*, 128:395–409, 2002
- [122] Kosaka, H., Aizawa, T., Kamimoto, T.: Two-Dimensional Imaging of Ignition and Soot Formation Processes in a Diesel Flame, *International Journal of Engine Research*, Vol. 6, No.1, p. 21-42, 2005

- [123] Mauss, F., Trilken, B., Breitbach, H., Peters, N.: Soot formation in partially premixed diffusion flames at atmospheric pressure. In *Soot Formation in Combustion*, pages 325–349. Springer-Verlag, 1994
- [124] Balthasar, M., Eismark, J., Magnusson, I.: Soot modelling in HD diesel engines. In: H. Bockhorn, A. D’Anna, A. F. Sarofim and H. Wang (eds.) *Combustion generated fine carbonaceous particles. Proceedings of an international workshop held in Villa Orlandi, Anacapri, May 13-16*, pp. 611-636, Karlsruhe Univ. Press, In press, 2007.
- [125] Herrmann, H.-O., Nielsen, B., Gropp, C., Lehmann: Mercedes-Benz Medium-Duty Commercial Engines Part 1: Engine Concept and Exhaust Aftertreatment, MTZ worldwide, 10/2012, S. 4-11, Springer Automotive Media Wiesbaden GmbH (2012)
- [126] Pitsch, H., Peters, N.: Reduced kinetics of multi-component fuels to describe the auto-ignition, flame propagation and post-flame oxidation of gasoline and Diesel fuels, IDEA EFFECT Technical report, 1996
- [127] 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-Ppaper 962057, 1996
- [128] Pitsch, H., Chen, M., Peters, N.: Unsteady Flamelet Modeling of Turbulent Hydrogen-Air Diffusion Flames, Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 1998, pp. 1057-1064.
- [129] Christensen, M., Johansson, B., Amnèus, P. and Mauss, F., “Supercharged Homogeneous Charge Compression Ignition”, SAE-Transactions 980787, Journal of Engines, 1998
- [130] Miller, J.A.; Melius, C.F., ”Kinetic and thermodynamic issues in the formation of aromatic compounds in flames of aliphatic fuels”, *Combustion and Flame* 91 (1992) 21-39
- [131] Mauß, F.; Netzell, K.; Lehtiniemi, H.: Aspects of Modeling Soot Formation in Turbulent Diffusion Flames, *Combust. Sci. and Tech.*, 178: 1871-1885, 2006
- [132] Vogel, S., Hasse, C., Gronki, J., Andersson, S., Peters, N., Wolfrum, J., Schulz, C.: Numerical simulation and laser-based imaging of mixture formation, ignition, and soot formation in a diesel spray. *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005) 2029–2036
- [133] M. Auriemma, G. Caputo, F.E. Corcione, G. Valentin: Influence of a Swirling Air Flow on an Evaporating Diesel Spray from a Common Rail Injection System under Realistic Engine Conditions, SAE-Paper, 2007-24-0021, 2007
- [134] Wenzel, P.: Entwicklung eines Fortschrittsvariablenmodells zur 3D-CFD-Simulation dieselmotorischer Zündung und Verbrennung, Dissertation, Universität Karlsruhe (TH), in Bearb., 2010

-
- [135] 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
- [136] Siebers, D.: Liquid-Phase Fuel Penetration in Diesel Sprays, SAE-Paper, 980809, 1998
- [137] Siebers, D.: Scaling Liquid-Phase Fuel Penetration in Diesel Sprays Based on Mixing-Limited Vaporization, SAE-Paper, 1999-01-0528, 1999
- [138] J.S. Lighty, V. Romano, A.F. Sarofim: Soot oxidation. In: H. Bockhorn, A. D'Anna, A. F. Sarofim and H. Wang (eds.) *Combustion generated fine carbonaceous particles. Proceedings of an international workshop held in Villa Orlandi, Anacapri, May 13-16*, pp. 487 - 500, Karlsruhe Univ. Press, In press, 2007.
- [139] Pitsch, H.: Extended flamelet model for LES of non-premixed combustion, Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs 2000
- [140] Frenklach, M., Warnatz, J., Detailed Modeling of PAH-Profiles in a Sooting Low Pressure Acetylene Flame, *Combust. Sci. Technol.*, 51, p. 265, 1987.
- [141] Frenklach, M., Harris, S. J., Aerosol Dynamics Modeling Using the Method of Moments, *J. Colloid Interface Sci.*, 118, No. 1, p. 252, 1987.
- [142] Pitsch, H., Modellierung der Zündung und Schadstoffbildung bei der dieselmotorischen Verbrennung mit Hilfe eines interaktiven Flamelet-Modells, Dissertation, Universität Aachen, 1998.
- [143] Borg, A., Fitting of Soot Library with Restraints in Respect to Maximum Mixture Fraction, Technical Report, LOGE AB, 2010
- [144] Zeuch, T., Moreac, G., Ahmed, S.S., and Mauss, F., A Comprehensive Skeleton Mechanism for the Oxidation of *n*-heptane Generated by Chemistry Guided Reduction, *Combustion and Flame*, 155, p. 651, 2008.
- [145] Nakakita, K., Ban, H., Takasu, S., Hotta, Y., Inagaki, K., Weissman, W., Farrel, J. T.: Effect of hydrocarbon molecular structure in diesel fuel on in-cylinder soot formation and exhaust emissions", SAE Paper 2003-01-1914, 2003.
- [146] Balthasar, M., Eismark, J., and Magnusson, I. Soot modelling in HD diesel engines. In: H. Bockhorn, A. D'Anna, A. F. Sarofim and H. Wang (eds.) *Combustion generated fine carbonaceous particles. Proceedings of an international workshop held in Villa Orlandi, Anacapri, May 13-16*, pp. 611-636, KIT Scientific Publishing, 2009.
- [147] Smoluchowski, M. V., *Z. Phys. Chem.*, 92, p. 129, 1917.
- [148] Barths, H. and Pitsch, H. and Peters, N.: 3D Simulation of DI Diesel Combustion and Pollutant Formation Using a Two-Component Reference Fuel, *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP* 54, 233-244, 1999.
- [149] C. P. Fenimore; G. W. Jones, *Journal of Physical Chemistry* 1967, 71, 593-597.

- [150] Pitsch, H., Chen, M., Peters, N.: Unsteady Flamelet Modelling of Turbulent Hydrogen/Air Diffusion Flames, Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998.
- [151] K. G. Neoh; J. B. Howard; A. F. Sarofim, in: Particulate Carbon: Formation during Combustion, G. W. S. D. C. Sieglä, (Ed.) Plenum: New York, 1981; pp 261-277.
- [152] Klimenko, A. Yu., Multicomponent Diffusion of Various Admixture in Turbulent Flow, Fluid Dynamics, v25, pp 327-334, 1990.
- [153] Bilger, R. W., Conditional Moment Methods for Turbulent Reacting Flow, Physics of Fluids A, v5, pp 436-444, 1993.
- [154] Kronenburg, A., Mastorakos, E., The Conditional Moment Closure Model, Turbulent Combustion Modeling, Fluid Mechanics and Its Applications, 2011, Volume 95, Part 2, 91-117, DOI: 10.1007/978-94-007-0412-1 5
- [155] Miller, J., Bowman, C.: Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion, Prog. Energy Combust. Sci. 1989, Vol. 15. pp. 287-338
- [156] Goos, E., Sickfeld, C., Mauß, F., Seidel, L., Ruscic, B., Burcat, A., Zeuch, T.: Prompt NO formation in flames: The influence of NCN thermochemistry, Proc. of the Comb. Inst. 34 (2013) 657-666
- [157] Frank, J.H., Barlow, R.S., Lundquist, C.: Radiation and nitric oxide formation in turbulent non-premixed jet flames. Proc. Combust. Inst. 28, 447-454 (2000)
- [158] Kim, I. S.: Conditional Moment Closure for Non-Premixed Turbulent Combustion, Dissertation, University of Cambridge, 2004
- [159] Seidel, L.: Validation of an existing mechanism for *n*-heptane, *iso*-octane and toluene reference fuels Studienarbeit, BTU Cottbus, 2010
- [160] Pasternak, M., Mauss, F., Simulation of Fuel Effects under Diesel-Engine Conditions using 0D-Fuel-Test Bench, International Congress on Engine Combustion Processes, 2013, Stuttgart, Deutschland
- [161] Zeldovich, YB: The oxidation of nitrogen in combustion and explosions, Acta- Physicochim., 1946
- [162] Mastorakos, E.: Ignition of turbulent non-premixed flames. Prog. Energ. Combust. Sci. 35, 57-97 (2009)
- [163] Cha, C.M., Kosály, G., Pitsch, H.: Modeling extinction and reignition in turbulent nonpremixed combustion using a doubly-conditional moment closure approach. Phys. Fluids 13, 3824-3834 (2001)
- [164] Bilger, R.W.: Advanced laser diagnostics: implications of recent results for advanced combustor models. In: R.S.L. Lee, J.H. Whitelaw, T.S.Wung (eds.) Aerothermodynamics in Combustors. Springer Verlag, Berlin (1993)
- [165] Kronenburg, A., Kostka, M.: Modeling extinction and reignition in turbulent flames. Combust. Flame 143, 342-356 (2005)

-
- [166] D. L. Baulch, D. D. Drysdall, D. G. Horne, and A. C. Lloyd.: *Evaluated Kinetic Data for High Temperature Reactions*, volume 1,2,3. Butterworth, 1973
- [167] Smith, N. S. A., Bilder, R. W., Carter, R. D., Barlow, R. S., Chen, J. Y., „A comparison of CMC and PDF modeling predictions with experimental nitric oxide LIF/Raman measurements in a turbulent H₂ jet flame“, *Combust. Sci. Tech.*, Vol. 105, 357-375, 1995
- [168] Kim, S. H., Huh, K. Y., „Use of the conditional moment closure model to predict NO formation in a turbulent CH₄/H₂ flame over a bluff body“, *Combust. Flame*, Vol. 48, 1-26, 2002
- [169] Kim, S. H., Huh, K. Y., Fraser, R. A., „Modeling autoignition of a turbulent methane jet by the conditional moment closure model“, *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 28, 185-191, 2000
- [170] Kim, S. H., Huh, K. Y., „Numerical simulation of spray autoignition by the first order conditional moment closure model“, *Proc. Combust. Inst.*, Vol. 29, 569-576, 2002
- [171] Kronenburg, A., Bilger, R. W., Kent, J. H., *Modeling Soot Formation in Turbulent Methane–Air Jet Diffusion Flames*, *Combust. Flame*, Vol. 121, 24-40, 2000
- [172] Seo, J., Lee, Y., Han, I., Huh, K. Y., Kim, H., *Extended CMC Model for Turbulent Spray Combustion in a Diesel Engine*, SAE-Paper 2008-01-2411, 2008.
- [173] De Paola, G., Wright, Y.M., Boulouchos, K. and Mastorakos, E. (2008): “Diesel Engine Simulations With Multi-Dimensional Conditional Moment Closure”, *Combustion Sci. and Tech.* 180, 883-899
- [174] Wright, Y. M., Boulouchos, K., De Paola, G., Mastorakos, E.: “Multi-dimensional Conditional Moment Closure Modelling Applied to a Heavy-duty Common-rail Diesel Engine”, SAE-Paper 2009-01-0717, 2009.
- [175] Directive 1999/96/EC, December 13, 1999
- [176] Bikas, G. (2001): “Kinetic Mechanisms for Hydrocarbon ignition”, PhD Thesis, RWTH, Germany
- [177] De Paola, G.: *Conditional Moment Closure for Autoignition in Turbulent Flows*, PhD Thesis, University of Cambridge, 2007
- [178] Lai, F. S., Friedlander, S. K., Pitch, J., Higy, G. M.: *The Self-Preserving Particle Size Distribution Function for Brownian Coagulation in the Free-Molecular Regime*, *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 39, Nr. 2, S. 395, 1972
- [179] Wenzel, P., Gezgin, A., Steiner, R., Krüger, C., Netzell, K., Lehtiniemi, H., Mauss, F.: *Modeling of the Soot Particle Size Distribution in Diesel Engines*, Thiesel-Paper, 2004
- [180] Mauss, F., Netzell, K. and Lehtiniemi, H.: “Aspects of Modeling Soot Formation in Turbulent Diffusion Flames”, to appear in *Combust. Sci. Tech.* (2006).

- [181] Pitsch, H., Riesmeier, E., and Peters, N.: "Unsteady Flamelet Modeling of Soot Formation in Turbulent Diffusion Flames", *Combust. Sci. Tech.* 158 (2000) pp. 389-406.
- [182] Netzell, K., Lehtiniemi, H., and Mauss, F.: "Calculating the Soot Particle Size Distribution Function in Turbulent Diffusion Flames using a Sectional Method", full length paper submitted to *Proc. Comb. Inst.* 31 (2006).
- [183] Weber, J., Peters, N., Bockhorn, H., and Pittermann, R.: SAE 2004-01-1840, 2004.
- [184] Bai, X.S., Fuchs, L., Balthasar, M., and Mauss, F.: "Detailed Kinetic Soot Modeling in Turbulent Jet Diffusion Flames", *Proc. Comb. Inst.*, Vol. 27 (1998) pp. 1623-1630.
- [185] Balthasar, M., Mauss, F., Pfitzner, M., and Mack, A.: "Implementation and Validation of a New Soot Model and Application to Industrial Aero-engine Combustor", *ASME Journal of Turbo Machinery, J. Eng. Gas Turbines Power* Vol. 124\1 (2002) p.66.
- [186] Karlsson, A., Magnusson, I., Balthasar, M., and Mauss, F.: "Simulation of Soot Formation under Diesel Engine Conditions Using a detailed Kinetic Soot Model", SAE-Transactions 981022, *Journal of Engines*.
- [187] Barths, H., Peters, N., Brehm, N., Mack, A., Pfitzner, M., and Smiljanovski, V.: *Proc. Comb. Inst.* 27 (1998) pp. 1841-1847.
- [188] Emissions Test Instruments: AVL 415S Smoke Meter - The New Correlation Curve, AVL LIST GmbH, 2002
- [189] Alkemade, U., Homann, K. H.: Formation of C₆H₆ Isomers by Recombination of Propynyl in the System Sodium Vapour/Propynylhalide, *Z. Physik. Chemi.* 161 (1989) pp. 19-34.

Anhang

A. Verbrennungsgeräusch

In diesem Anhang wird die Methodik, die zur Bestimmung des Motorengeräusches bei einem Verbrennungsablauf wie in der Simulation angewandt wurde, in Anlehnung an [105] kurz beschrieben.

Bei dem Motorgeräusch wird grundsätzlich zwischen Verbrennungsgeräusch und mechanischem Geräusch unterschieden. Das Verbrennungsgeräusch kann weiter in direktes und indirektes Verbrennungsgeräusch unterteilt werden. Das direkte Verbrennungsgeräusch kann als der Anteil im Luftschall definiert werden, der gefiltert durch die Motorstruktur auf den Zylinderdruckverlauf zurückzuführen ist. Das indirekte Verbrennungsgeräusch beinhaltet im Gegensatz dazu noch mechanische Geräuschanteile, die lastabhängig sind wie Kolbenkippen oder Hochdruckpumpengeräusche. Aus einem gemessenen oder simulierten Druckverlauf kann mittels Fouriertransformation das Anregungsspektrum abgeleitet werden. Unter Berücksichtigung des bekannten Übertragungsverhaltens der Motorstruktur kann aus diesem Anregungsspektrum das direkte Verbrennungsgeräusch berechnet werden [105]. Das gesamte Prozedere ist in Abb.A.1 dargestellt.

Das Geräusch kann mit einem Kennwert erfasst werden, indem aus dem Verbrennungsgeräusch der Summenpegel berechnet wird. Mit dem Summenpegel wird eine einfache Beurteilung des Geräusches möglich [105].

Diese Methodik zur Berechnung des Verbrennungsgeräusches wurde sowohl für die gemessenen als auch für die berechneten Druckverläufe angewandt.

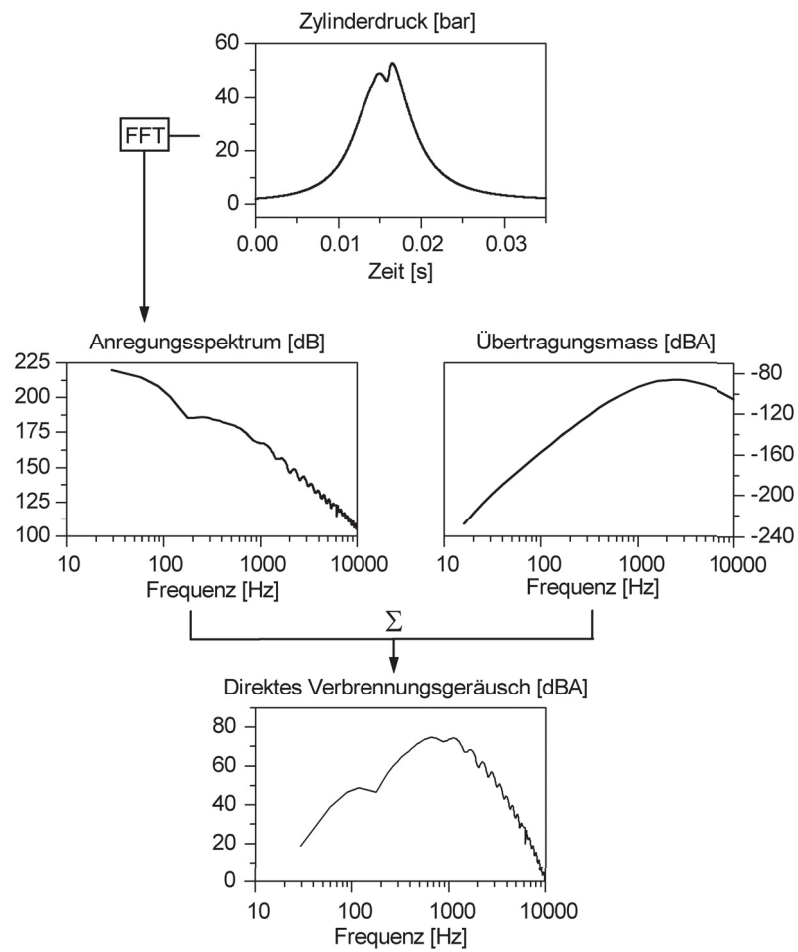


Abbildung A.1.: Verbrennungsgeräuschberechnung [105],
Nachdruck genehmigt von Dr. Barba

B. Bestimmung KL

Wie im Kapitel 6.3.2 bereits erläutert kann der bei der dieselmotorischen Verbrennung strahlende Ruß als idealen schwarzen Strahler aufgefasst werden. Die spektrale Verteilung der Strahlungsdichte L_s eines idealen schwarzen Strahlers kann als Funktion von Temperatur T und Wellenlänge λ durch das Planck'schen Strahlungsgesetzes beschrieben werden:

$$L_s(\lambda, T) = C_1 * \lambda^{-5} \frac{1}{\exp(C_2/(\lambda * T)) - 1} \quad [\text{W} * \text{sr}^{-1} * \text{m}^{-3}] \quad (7.1)$$

mit den Konstanten:

$$C_1 = \frac{2hc_0^2}{\Omega_0} = 1.191 * 10^{-16} [\text{W} * \text{m}^2] \quad \text{und} \quad C_2 = \frac{hc}{k} = 1.4388 * 10^{-2} [\text{m} * \text{K}]$$

Dabei ist:

- h : Planck'schen Wirkungsquantum [J * s]
- c_0 : Lichtgeschwindigkeit (Vakuum) [m/s]
- λ : Wellenlänge [m]
- k : Boltzmann'sche Konstante [J * K⁻¹]
- Ω_0 : Einheitsraumwinkel 1 [sr]
- L_s : Strahlungsdichte schwarzer Strahler

Für eine Strahlung bei Wellenlängen zwischen 700 und 900 nm und bei Temperaturen kleiner 3000K – wie im Fall des Rußleuchtens im Dieselmotor – kann die Wien'sche Näherungsgleichung verwendet werden, die in diesem Bereich gut mit der Planck'schen Verteilung übereinstimmt.

$$L_s(\lambda, T) = C_1 * \lambda^{-5} \frac{1}{\exp(C_2/(\lambda * T))} \quad [\text{W} * \text{sr}^{-1} * \text{m}^{-3}] \quad (7.2)$$

Damit ergibt sich eine spektrale Strahlungsdichte wie in Abb. B.1 dargestellt. Bei einem realen Strahler ist die Strahlungsdichte $L(\lambda)$ bei einer gegebenen Temperatur T von seinen optischen Eigenschaften abhängig und im Vergleich zur Strahlungsdichte eines schwarzen Strahlers $L_s(\lambda)$ durch das Emissionsverhältnis $\varepsilon(\lambda)$ gekennzeichnet.

$$L(\lambda, T) = \varepsilon(\lambda) * L_s(\lambda, T) \quad (7.3)$$

Durch die Messung der Intensität von Rußleuchten bei zwei verschiedenen Wellenlängen im Spektralbereich von 500 nm bis 900 nm, in dem die Strahlungsintensität nahezu linear ansteigt, kann nach [107] mit Hilfe des Planck'schen Strahlungsgesetzes und des Wien'schen

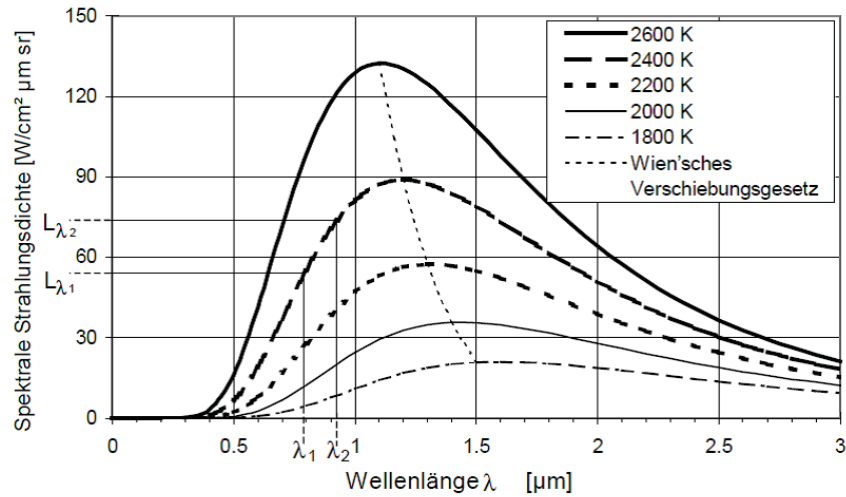


Abbildung B.1.: Spektrale Strahlungsdichte eines schwarzen Strahlers als Funktion von λ und T [106], *Nachdruck genehmigt von Dr. Bertsch*

Verschiebungsgesetzes eine der Strahlung zugrunde liegende Rußtemperatur bestimmt werden.

$$T = \frac{C_2 \left(\frac{1}{\lambda_2} - \frac{1}{\lambda_1} \right)}{\ln \left(\frac{L_{\lambda_1}}{L_{\lambda_2}} * \frac{\lambda_1^5}{\lambda_2^5} \right)} \quad (7.4)$$

Des Weiteren können unter Berücksichtigung des Lambert-Beer'schen Gesetzes die optischen Eigenschaften von feindisperssem Ruß beschrieben werden:

$$\varepsilon(\lambda) = 1 - \exp \left(-\frac{q * cr * s}{\lambda^n} \right) \quad (7.5)$$

dabei ist:

- $\frac{q}{\lambda^n}$: molarer Extinktionskoeffizient [$\text{m}^2 * \text{mol}^{-1}$]
- n : Konstante = 1.39 [1]
- cr : Rußkonzentration [$\text{mol} * \text{m}^{-3}$]
- s : Schichtdicke der rußenden Flamme [m]
- $\varepsilon(\lambda)$: Emissionsverhältnis
- λ : Wellenlänge [m]

Die Schichtdicke s ist während eines Verbrennungsvorganges nicht konstant. Aus diesem Grund werden die Faktoren s , cr und q zur relativen Rußkonzentration rk zusammenge-

fasst:

$$\text{rk} = q * cr * s \quad (7.6)$$

Durch Einsetzen von Gleichungen 7.2 und 7.5 in Gleichung 7.3 ergibt sich für die Rußkonzentration:

$$\text{rk} = -\lambda^n \ln(1 - L(\lambda, T)) * \frac{\lambda^5}{C_1} * \exp\left(\frac{C_2}{\lambda * T}\right) \quad (7.7)$$

Um die Strahlungsdichte $L(\lambda, T)$ messen zu können, bedarf es zunächst einer absoluten Strahlungsdichtekalibrierung. Aussagen über Rußkonzentration können deswegen nur unter den gleichen Randbedingungen, unter denen diese absolute Kalibrierung durchgeführt wurde, gemacht werden [115]. Zur Bestimmung der Rußtemperatur reicht die Kalibrierung des Messaufbaus auf das Verhältnis der spektralen Strahlungsdichten $L_s(\lambda_1)/L_s(\lambda_2)$ für zwei unterschiedliche Wellenlängen. Zur Bestimmung der relativen Rußkonzentration muss wiederum die absolute Strahlungsdichte bekannt sein. Als Strahlungsdichtenormal wurde für die Messungen in dieser Arbeit eine Ulbrichtkugel mit einer Halogenlampe verwendet, für die die spektralen Strahlungsdichten von 300 nm bis 2400 nm angegeben sind. Zur Kalibrierung wird die rußstrahlungserfassende Diode so nahe wie möglich vor die Öffnung der Ulbrichtkugel positioniert. Die Ausgangsspannung U des Intensitätsmessgeräts (Photodioden incl. Verstärkereinheit) ist proportional der auf den Photodetektor auftreffenden Strahlungsleistung:

$$U = e(\lambda) * \tau(\lambda) * \Delta\lambda * L_\lambda(\lambda) * \Omega_K * A_O \quad (7.8)$$

dabei ist:

- U : Ausgangsspannung [V]
- $e(\lambda)$: Proportionalitätsfaktor des Messkanals [V/W]
- $\tau(\lambda)$: spektraler Transmissionsgrad des optischen Messweges [1]
- $L_\lambda(\lambda)$: spektrale Bestrahlungsstärke [W/(m³ * sr)]
- $\Delta\lambda$: Messbandbreite der Strahlungsfiter [W]
- Ω_K : Raumwinkel der auftreffenden Strahlung [sr]
- A_O : bestrahlte Oberfläche der Optode [m²]

Bildet man den Quotienten der Signalspannungen bei zwei Wellenlängen λ_1 und λ_2 , so entspricht dieser dem Produkt aus einem Proportionalitätsfaktor (Kalibrierfaktor: $K(\lambda_1, \lambda_2)$) und den Quotienten der spektralen Strahlungsstärken der Kalibrierlampe $L_{\lambda k}(\lambda)$ bei

den beiden Wellenlängen.

$$\frac{U_1}{U_2} = \frac{e(\lambda_1) * \tau(\lambda_1) * \Delta\lambda_1 * L_\lambda(\lambda_1) * \Omega_K * A_O}{e(\lambda_2) * \tau(\lambda_2) * \Delta\lambda_2 * L_\lambda(\lambda_2) * \Omega_K * A_O} = K(\lambda_1, \lambda_2) * \frac{L_{\lambda k}(\lambda_1)}{L_{\lambda k}(\lambda_2)} \quad (7.9)$$

Die relative Rußkonzentration, die nach Gleichung 7.7 berechnet wird, ist deswegen auch unter der Bezeichnung KL bekannt. Die sich damit ergebenden Verläufe werden entsprechend KL-Verläufe genannt.