Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung in Ottomotoren unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen

Von der Fakultät Energietechnik der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktors der
Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von Udo Günther Riegler aus Hermannstadt/Rumänien

Hauptberichter:	Prof. Dr. Dr. h.c. Jürgen Warnatz
Mitberichter :	Prof. Dr. habil. Ulrich Maas
	Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende

Tag der mündlichen Prüfung: 02.07.1999

Institut für Technische Verbrennung
Universität Stuttgart

1999

Inhaltsverzeichnis

1 Zusammenfassung **7**

2 Physikalisch-chemische Grundlagen **10**
2.1 Die Transportgleichungen dreidimensionaler reaktiver Strömungen 10
2.2 Die empirischen Gesetze 12
2.2.1 Das Newtonsche Schubspannungsgesetz 12
2.2.2 Diffusion 13
2.2.3 Wärmeübertragung 16
2.3 Die Zustandsgleichung des idealen Gases 19
2.4 Die spezifische Wärmekapazität 20
2.5 Quellterme in der Kontinuitätsgleichung 21
2.6 Die chemischen Produktionsterme 22

3 Turbulenz **26**
3.1 Die Reynolds-Gleichungen 27
3.2 Turbulenz-Modelle 31
3.2.1 Algebraische Turbulenzmodelle 33
3.2.2 Turbulenzmodelle basierend auf Transportgleichungen für Turbulenzgrößen; das k-ϵ-Modell 33
3.2.3 Voraussetzungen für die Anwendung des k-ϵ-Turbulenzmodells zur Berechnung der Turbulenz in einem Ottomotor 39
3.3 Bestimmung der Randbedingungen für die Turbulenzgrößen 40

4 Laminare und turbulente Vormischflammen **43**
4.1 Das Flamelet-Konzept 43
4.2 Laminare Vormischflammen 44
4.2.1 Die Struktur laminarer Vormischflammen 44
4.2.2 Die laminare Flammengeschwindigkeit 46
4.2.3 Die Bibliothek gestreckter und gekrümmter laminarer Flammen . . . 50
4.2.4 Längen- und Zeitskalen in der laminaren Vormischflamme 51
4.2.5 Flammenverlöschung 52
4.3 Turbulente Vormischflammen 53
4.3.1 Die Regimes der turbulenten Verbrennung 53
4.3.2 Die Regimes der Verbrennung in Ottomotoren 57
4.3.3 Berechnung der Mittelwerte der Massenbrüche der chemischen Spezies 58
4.3.4 Das Eingleichung-Verbrennungsmodell von H. G. Weller 63
4.3.5 Die Herweg-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit . 67

5 Schadstoffbildung **69**
5.1 Mechanismen der Stickoxidbildung 70
5.1.1 Das thermische NO; der Zeldovich-Mechanismus 70
5.1.2 Das prompte NO; der Fenimore-Mechanismus 73
5.1.3 Die Bildung von Stickstoffdioxid NO_2 74
5.2 Mechanismen der Kohlenmonoxidbildung 74

6 Numerik **75**
6.1 Diskretisierungsfehler und Netzabhängigkeit 75
6.1.1 Der Einfluß der Algorithmen der Netzbewegung auf die Lösung der Erhaltungsgleichungen 76
6.1.2 Einfluß der Netzfeinheit auf die Lösung der Transportgleichungen . . 77
6.2 Einfluß der Diskretisierung der Quellterme 81
6.3 Numerisches Lösungsverfahren 82

7 Ergebnisse **84**
7.1 Berechnungen für den M112-3V/DZ (Vierhubtriebwerk) 84
7.1.1 Versuchsträger 84
7.1.2 Anfangs- und Randbedingungen 85
7.1.3 Berechnung des Ladungswechsels mit dem „groben“ Netz 87
7.1.4 Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung mit dem „groben“ Netz 95
7.1.5 Berechnung der Strömung mit dem „feinen“ Netz 120
7.1.6 Berechnung der Strömung und der Verbrennung mit dem „verfeinerten“ Netz 132
7.2 Berechnungen für den Quadratischen Forschungsmotor 144
7.2.1 Versuchsträger 144
7.2.2 Berechnung des Ladungswechsels 145
7.2.3 Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung 148

8 Ausblick **166**

Symbole und Abkürzungen

A_r	präexponentieller Faktor der Reaktion r	$\mathrm{m^3/(kmol \cdot s)}$
b	Reaktionsrückschrittsvariable	-
b_{sp}	Leckspaltweite	μm)
c	Reaktionsfortschrittsvariable	-
c_i	Konzentration der Spezies i	$\mathrm{kmol/m^3}$
c_p	spezifische Wärmekapazität des Gemisches bei konst. Druck	$\mathrm{J/(kg \cdot K)}$
$c_{p,i}$	spezifische Wärmekapazität der Spezies i bei konst. Druck	$\mathrm{J/(kg \cdot K)}$
c_v	spezifische Wärmekapazität des Gemisches bei konst. Volumen	$\mathrm{J/(kg \cdot K)}$
C_i	Sutherland-Korrekturfaktor der Spezies i	K
C_μ	Kolmogorov-Konstante	$-$
dA	differenzielles Oberflächenelement	$\mathrm{m^2}$
Da	Damköhler-Zahl	-
D_{ij}	binärer Diffusionskoeffizient	$\mathrm{m^2/s}$
$D_{i,M}$	mittlerer Diffusionskoeffizient der Spezies i	$\mathrm{m^2/s}$
$E_{A,r}$	Aktivierungsenergie der Reaktion r	J
$\sqrt{g}$	Determinante des Metrischen Tensors	$\mathrm{m^2/s^2}$
$\overrightarrow{F}$	Kraft	N
$F_{m_i,j}$	Komponente j der Massenstromdichte der Spezies i	$\mathrm{kg/(m^2 \cdot s)}$
$F_{q,j}$	Komponente j der Wärmestromdichte	$\mathrm{g/(m^2 \cdot s)}$
h	spezifische Enthalpie	J/kg
H_n^0	spezifische Bildungsenthalpie des Soffes n	J/kg
k	turbulente kinetische Energie	$\mathrm{m^2/s^2}$
k_r	Geschwindigkeitskoeffizient der Reaktion r	$\mathrm{m^3/(kmol \cdot s)}$
k_B	Boltzmannkonstante	$\mathrm{J/(kg \cdot K)}$
Ka	Karlovitz-Zahl	-
l_{int}	integrales Längenmaß	m
l_G	Gibson-Längenmaß	m
l_K	Kolmogorov-Längenmaß	m
L	Markstein-Länge	m
Le	Lewis-Zahl	-
L_M	Markstein-Zahl	-
M_i	Molare Masse der Spezies i	kg/kmol
$\overline{M}$	mittlere molare Masse der Gasgemisches	kg/kmol
n	Stoffmenge des Gasgemisches	kmol
n_r	Motordrehzahl	$\mathrm{min^{-1}}$
n_i	Molenzahl der Spezies i	kmol
$\vec{n}$	äußerer Normalenvektor (senkrecht zur Oberfläche)	-

$\overrightarrow{n_F}$	Normaleneinheitsvektor (senkrecht zur Flammenoberfläche)	-
Nu	Nußelt-Zahl	-
p	Druck	Pa
Pr	molekulare Prandtl-Zahl	-
Pr_t	turbulente Prandtl-Zahl	-
$\vec{r}$	Ortsvektor	m
R	universelle Gaskonstante	$\mathrm{J/(kg \cdot K)}$
R_F	mittlerer Krümmungsradius der Flammenfront	m
Re	Reynolds-Zahl	-
Re_T	Turbulenz-Reynolds-Zahl	-
Sch	molekulare Schmidt-Zahl	-
Sch_t	turbulente Schmidt-Zahl	-
t	Zeit	s
t_{ign}	Zeitpunkt der Funkenentladung	s
t_K	Kolmogorov-Zeitmaß	s
T	Temperatur	K
T_0	Temperatur des Referenzzustandes	K
T_b	Temperatur des verbrannten Gasgemisches	K
T_{unb}	Temperatur des unverbrannten Gasgemisches	K
T_{wall}	Temperatur des begrenzenden festen Wand	K
u'	turbulente Schwankungsgeschwindigkeit	m/s
u_i	Komponente i der Geschwindigkeit	m/s
u_lam	laminare Flammengeschwindigkeit	m/s
$u_{\mathrm{lam},0}$	adiabate, laminare Flammengeschwindigkeit	m/s
u_T	turbulente Flammengeschwindigkeit	m/s
V	Volumen	$\mathrm{m^3}$
V_i	Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies i	-
w_i	Massenbruch der Spezies i	-
x_i	Komponente i des Ortsvektors	m
y	Wandabstand	m
y^+	dimensionslose Variable für Wandabstand	$-$
X_i	Molenbruch der Spezies i	-
X_{exg}	Molenbruch des Restgases	-
BDC	bottom dead center,i.e. unterer Totpunkt	
DNS	direkte numerische Simulation	
EBU	Eddy-Break-Up-Modell	
GOT	Gaswechsel-OT	
KW	Kurbelwinkel	$^\circ$
LES	Large-Eddy Simulation	
OT	oberer Totpunkt	
pdf	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl.)	
TDC	top dead center,i.e. oberer Totpunkt	
TKE	turbulente kinetische Energie	$\mathrm{m^2/s^2}$
UHC	unverbrannte Kohlenwasserstoffe	
UT	unterer Totpunkt	
ZOT	Zünd-OT	
ZZP	Zündzeitpunkt	$^\circ$KW

α_h	Wandwärmeübergangskoeffizient	$\mathrm{W/(m^2 \cdot K)}$
β_r	Temperaturexponent der Reaktion r	-
β_{E_A}	reduzierte Aktivierungsenergie	-
γ	Adiabatenexponent des Gasgemisches	-
γ_T	reduzierter Gasexpansionsfaktor	-
δ_{ij}	Kroneckersymbol	
δ_{lam}	laminare Flammendicke	m
$\delta(\phi)$	Dirac'sche Delta-Funktion	
$\vec{\delta}$	Korrelationsraumvektor	m
$\Delta(\phi)$	Laplace-Operator	
ϵ	Dissipationsgeschwindigkeit der turb. kinet. Energie	$\mathrm{m^2/s^3}$
χ	Flammenstreckung	$\mathrm{s^{-1}}$
χ_q	kritische Flammenstreckung	$\mathrm{s^{-1}}$
κ	Volumenzähigkeitskoeffizient	$\mathrm{kg/(m \cdot s)}$
κ_K	von Karman-Konstante	
λ_h	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient	$\mathrm{J/(m \cdot s \cdot K)}$
λ_T	Taylor-Längenmaß	m
μ	dynamischer Scherzähigkeitskoeffizient	$\mathrm{kg/(m \cdot s)}$
μ_{eff}	effektiver Zähigkeitskoeffizient	$\mathrm{kg/(m \cdot s)}$
μ_t	turbulenter Zähigkeitskoeffizient	$\mathrm{kg/(m \cdot s)}$
μ_r	reduzierte Masse	kg
ν	kinematischer Scher-Zähigkeitskoeffizient	$\mathrm{m^2/s}$
$\nu_{n,r}^{(a)}$	stöchiom. Koeffizient des Stoffes n in der Reaktion r	-
Φ	Äquivalenzverhältnis	-
$\overline{\Phi}$	Ensemble-Mittelwert der Strömungsvariablen Φ	
$\tilde{\Phi}$	Favre-Mittelwert der Strömungsvariablen Φ	
Φ'	Ensemble-Fluktuation der Strömungsvariablen Φ	
Φ''	Favre-Fluktuation der Strömungsvariablen Φ	
$\Phi_{h,\vec{u}}$	Enthalpiestromdichte im Inneren des Fluids	$\mathrm{J/(m^2 s)}$
$\Phi_{h,wall}$	Enthalpiestromdichte bei Wandwärmeübergang	$\mathrm{J/(m^2 s)}$
θ	reduzierte Temperatur	-
ρ	Dichte	$\mathrm{kg/m^3}$
σ_i	molekularer Stoßdurchmesser	nm
Σ	Flammenflächendichte	$\mathrm{m^{-1}}$
Ξ	Faltungsfaktor der Flammenoberfläche	-
τ_{chem}	charakt. Zeitmaß der Reaktionskinetik	s
τ_{flam}	Flammenzeit (flame time)	s
τ_{ij}	Komponente des Spannungstensors	$\mathrm{N/m^2}$
τ'_{ij}	Komponente des zähen Spannungstensors	$\mathrm{N/m^2}$
τ_{ij}^R	Komponente des Tensors der Reynolds-Spannungen	$\mathrm{N/m^2}$
τ_{int}	integrales Zeitmaß	s
τ_q	Verlöschungszeit	s
τ_{wall}	Wandscherspannung	s
Ω	beliebiges Strömungsgebiet	$\mathrm{kg/m^3}$
$\partial\Omega$	Oberfläche des beliebigen Strömungsgebiets Ω	$\mathrm{kg/m^3}$

Kapitel 1

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt die Flamelet-Modellierung der Verbrennung und der Schadstoffbildung in Ottomotoren. In Abhängigkeit von Motorgeometrie und der vorgegebenen Betriebsparameter Last, Drehzahl, Äquivalenzverhältnis, Restgasgehalt und Zündzeitpunkt werden das turbulente Strömungsfeld, die Flammenausbreitung, die Energiebilanz und die chemische Zusammensetzung des Gasgemisches im Arbeitszylinder eines Ottomotors räumlich und zeitlich aufgelöst berechnet.

Bei der dreidimensionalen Simulation der Strömung in einem Verbrennungsmotor besteht grundsätzlich die Schwierigkeit der exakten Berechnung des turbulenten Strömungsfeldes. Analytische Lösungen des Systems der Reynolds-Gleichungen, welche die turbulente Strömung beschreiben, sind nicht möglich. Deshalb müssen numerische Methoden angewendet werden. Der Grund dafür liegt einerseits in der Komplexität der Geometrie des Brennraums sowie der angeschlossenen Kanäle und andererseits in der Modellierung der Turbulenz im Bereich mittlerer bis höherer Reynolds-Zahlen.

Im Falle einer chemisch reagierenden Strömung, wie sie in Ottomotoren während der Verbrennung vorliegt, nehmen die Komplexität und die Steifheit des zu lösenden gekoppelten Differentialgleichungssystems, das die Strömung beschreibt, weiterhin stark zu. Um die chemische Reaktionskinetik, welche der Bildung der Schadstoffkomponenten zu Grunde liegt, korrekt zu beschreiben, sind detaillierte Reaktionsmechanismen notwendig, die jedoch schon für die einfachsten Kohlenwasserstoffe (z.B. Methan, Propan, Acetylen) 40 bis 70 Spezies und Hunderte von Elementarreaktionen beinhalten. Zwar ist die numerische Lösung eines solchen Differentialgleichungssystems für laminare Strömungen in Strömungsgebieten mit einfacher Geometrie heute schon möglich, für hochturbulente Strömungen in den komplexen Geometrien praxisnaher technischer Anwendungen wird eine numerische Lösung dieses komplexen Differentialgleichungssystems auch in den kommenden Jahrzehnten alle Dimensionen möglicher Rechenkapazitäten sprengen. Außerdem ist das Problem der Modellierung der Wechselwirkung von Turbulenz und chemischer Reaktionskinetik trotz intensiver Forschung bis heute noch nicht in seiner ganzen Bandbreite gelöst.

In diesem Rahmen nimmt das Flamelet-Regime der turbulenten Verbrennung eine Sonderstellung ein. In dem Flamelet-Regime der turbulenten Verbrennung ist eine Entkopplung der Turbulenz und der chemischen Reaktionskinetik möglich, weil in diesem Verbrennungsregime die chemischen Prozesse in einer sehr viel kürzeren Zeit ablaufen als die Prozesse, die mit der turbulenten Strömung zusammenhängen. Dabei bleibt die Struktur der turbulenten Flamme mit der Struktur der laminaren Flamme identisch. Die turbulente Flamme in einem Ottomotor kann somit im Flamelet-Regime als ein statistisches Ensemble laminarer Vor-

mischflammen beschrieben werden. Zur statistischen Beschreibung des Ensembles laminarer Vormischflammen kann auf eine Bibliothek laminarer Flammen zurückgegriffen werden, die mit Hilfe detaillierter Reaktionsmechanismen unabhängig von dem turbulenten Strömungsfeld berechnet werden. Damit kann, in Abhängigkeit von den Mittelwerten (und eventuell den Varianzen) der primitiven Strömungsvariablen, die gemittelte chemische Zusammensetzung der reagierenden turbulenten Strömung räumlich und zeitlich aufgelöst berechnet werden. Das beinhaltet die mittleren Massenbrüche einiger chemischer Spezies wie z.B. des Kohlenmonoxids CO, des Hydroxylradikals OH oder des atomaren Sauerstoffs O, die mit den heute üblichen Konzepten der Einschritt-Chemie nicht berechnet werden können. Die Bildung einiger der wichtigsten Schadstoffkomponenten im Brennraum (CO, NO) kann damit sehr viel genauer erfolgen, wobei die Computer-Ressourcen (Hauptspeicherbedarf und Rechenzeit), die eine solche Flamelet-Simulation in Anspruch nimmt, in derselben Größenordnung liegen, wie dies bei der Simulation derselben turbulenten Strömung mit Einschritt-Chemie der Fall wäre.

In der vorliegenden Arbeit wurde in das kommerziellen Strömungsberechnungsprogramm Star-CD eine auf der Flamelet-Modellierung beruhende Berechnungsmethode für den ottomotorischen Verbrennungsprozeß integriert und darauf basierend ein Modell zur Berechnung einiger Schadstoffkomponenten (des Stickoxids NO einerseits und des Kohlenmonoxids CO in der Hochtemperaturphase andererseits) implementiert. In Abhängigkeit von Motorgeometrie und der vorgegebenen Betriebsparameter (Last, Drehzahl, Äquivalenzverhältnis, Zündzeitpunkt) wurde der entwickelte Code für den Fall des Ottomotors M112-3V/DZ der Daimler Benz AG und des Quadratischen Forschungsmotors (Daimler Benz AG, F1M/T) angewendet. Damit konnte die Verifikation der numerischen Ergebnisse (3D-Flammenausbreitung, Energiebilanz, Abgaszusammensetzung inkl. CO und NO) anhand der entsprechenden experimentellen Daten vollzogen werden, um die Möglichkeiten und Grenzen der eingebauten Modelle und Konzepte zu bewerten und auszubauen. Gleichzeitig kann den Motorenentwicklern ein detaillierter Einblick in die spezifischen Strömungsverhältnisse des Ottomotors M112-3V/DZ sowie deren Auswirkungen auf Leistung und Abgasemissionen ermöglicht werden.

Bei der Überführung des partiellen Differentialgleichungssystems der Reynolds-Gleichungen in ein System algebraischer Beziehungen, das in diskreten Punkten des Strömungsfeldes gelöst wird, müssen numerische Fehler in Kauf genommen werden, deren Größe von dem Auflösungsvermögen des verwendeten Rechennetzes abhängig ist. Der Einfluß numerischer Effekte (Netzfeinheit, Diskretisierungsverfahren, Verzerrung der Zellen des Rechengitters) wurde für den Fall des Ottomotors M112-3V/DZ anhand von drei unterschiedlich feinen Rechennetzen untersucht. Eine hohe räumliche und zeitliche Auflösung der Strömung und die Anwendung von Turbulenzmodellen höherer Ordnung ist durch die hohe, jedoch endliche Leistungsfähigkeit der modernen Höchstleistungs-Computer eingeschränkt. Die Verwendung unterschiedlich feiner Rechennetze für dieselbe Brennraumgeometrie verdeutlicht die relative Größe dieser Diskretisierungsfehler und deren asymptotisches Verhalten bei steigendem Auflösungsvermögen des Rechennetzes.

Aus einer Untersuchung der Netzabhängigkeit der Lösung des Systems der Reynolds-Gleichungen für alle relevanten Strömungsvariablen wurden Schlußfolgerungen über die Größe der asymptotischen Werte der Strömungsvariablen ausgehend von der Berechnung der Strömung mit einem gegebenen Rechennetz gezogen [61]. Diese Werte der Strömungsvariablen entsprechen einer Berechnung mit einem idealen, d.h. unendlich feinen Rechennetz. Sie sind für die realitätsnahe Simulation der turbulenten Flammenausbreitung im Zylinder notwen-

dig. Die Gültigkeit dieser Schlußfolgerungen für eine seriennahe Brennraumgeometrie konnte in der vorliegenden Arbeit bestätigt werden, jedoch ist eine Verfeinerung des angewendeten Extrapolationsverfahrens möglich.

Die Ergebnisse der Berechnungen (Druckverlauf, mittlere Ankunfszeiten der turbulenten Flammenfront an unterschiedlichen Positionen in Brennraum, chemische Zusammensetzung des Gasgemisches und der Wandwärmeübergang) werden mit den vorliegenden experimentellen Ergebnissen verglichen. Die Analyse der unterschiedlichen Fehlerquellen führt zu einer deutlichen Verbesserung der Simulationsergebnisse. Die Übereinstimmung ist abschließend als gut zu bewerten. Wege zu einer weiteren Verbesserung dieser Ergebnisse, die jedoch den Rahmen der vorliegenden Arbeit überschreiten würden, werden in Kap. 8 („Ausblick“) aufgezeigt.

Kapitel 2

Physikalisch-chemische Grundlagen

2.1 Die Transportgleichungen dreidimensionaler reaktiver Strömungen

Verbrennungsprozesse resultieren aus dem Zusammenspiel einer Vielfalt verschiedener Prozesse wie Strömung, chemischer Reaktion, molekulare Transportvorgänge (z.B. Wärmeleitung, Diffusion und Zähigkeit) und evtl. Turbulenz oder Phasenübergänge. Bei einer detaillierten Beschreibung von Verbrennungsprozessen müssen alle diese Phänomene berücksichtigt werden [1, 2].

Zur Charakterisierung des Zustandes einer chemisch reagierenden Strömung sind zu jeder Zeit und an jedem Ort Angaben über Druck, Temperatur, Dichte, Geschwindigkeit der Strömung und chemische Zusammensetzung der Mischung notwendig. Alle diese Eigenschaften werden mathematisch als Funktionen der Zeit und des Ortes (z.B. $\vec{v}(\vec{r},t)$, $\rho(\vec{r},t)$) im gesamten Gebiet, das von der Strömung eingenommen wird, ausgedrückt. Zwischen diesen physikalischen Größen gibt es Beziehungen (z.B. die Zustandsgleichung des idealen Gases $p = \rho RT/\overline{M}$), mit deren Hilfe einige dieser Größen bestimmt werden können, wenn andere bekannt sind [2, 6].

Einige dieser Größen besitzen die Eigenschaft, daß sie unabhängig von den stattfindenden Prozessen weder gebildet noch verbraucht werden können (Erhaltungsgrößen oder konservative Größen). Hierzu gehören Masse, Impuls und Energie sowie die Teilchenmassen eines jeden Elements. Aus der Erhaltung der Atome eines jeden Elements folgen Beziehungen zwischen den Teilchenmassen der chemisch reagierenden Spezies.

Eine Bilanzierung über alle Prozesse, die diese Erhaltungsgrößen ändern, führt zu den Erhaltungsgleichungen oder Transportgleichungen, die die chemisch reagierende Strömung beschreiben. Die allgemeine Form der Erhaltungsgleichungen kann sowohl aufgrund von makroskopischen (kontinuumsmechanischen) als auch mit Hilfe von mikroskopischen (molekulardynamischen) Betrachtungen hergeleitet werden. Die makroskopische Herleitung der Erhaltungsgleichungen ist bei Warnatz und Maas [2, 3] ausführlich beschrieben.

Die Integralform der allgemeinen Erhaltungsgleichung für eine konservative Größe ist [3]:

$$\int_\Omega \frac{\partial f}{\partial t} \mathrm{d}V + \int_\Omega \mathrm{div}\left(\overrightarrow{\Phi_f}\right) \mathrm{d}V = \int_\Omega q_f \mathrm{d}V + \int_\Omega s_f \mathrm{d}V \qquad . \tag{2.1}$$

Die differentielle Form der allgemeinen Erhaltungsgleichung einer konservativen Größe ist

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathrm{div}\left(\overrightarrow{\Phi_f}\right) = q_f + s_f \qquad . \tag{2.2}$$

Damit können sämtliche Erhaltungsgleichungen abgeleitet werden. Die Formulierung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und Teilchenmassen, so wie sie in der vorliegenden Arbeit verwendet werden, sind dem Handbuch des angewendeten Strömungscodes „Star-CD“ [7] entnommen. In den folgenden Gleichungen bezeichnet x_j die Ortskoordinate j eines beliebigen Punktes innerhalb des Strömungsgebiets in einem krummlinigen Koordinatensystem und g die Determinante des metrischen Tensors (mit dessen Hilfe der Übergang von einem beliebigen, krummlinigen Koordinatensystem zu einem anderen Koordinatensystem, z.B einem kartesischen, durchgeführt wird).

1) Masse (Kontinuitätsgleichung)

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \rho)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u_j)}{\partial x_j} = s_m \qquad , \tag{2.3}$$

2) Impuls (Navier-Stokes-Gleichungen)

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \rho \cdot u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u_i \cdot u_j - \tau'_{ij})}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = s_i \qquad , i = 1,2,3 \qquad , \tag{2.4}$$

3) Energie (Erhaltungsgleichung für die spezifische Enthalpie h, die definiert ist als

$$h = c_p \cdot T - c_p^0 \cdot T_0 + \sum_{n=1}^{N} m_n \cdot H_n^0 \ ) \tag{2.5}$$

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \rho \cdot h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u_j \cdot h - F_{h,j})}{\partial x_j} = \\ &\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot p)}{\partial t} + u_j \frac{\partial p}{\partial x_j} + \tau'_{ij} \cdot \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + s_h \qquad , \end{aligned} \tag{2.6}$$

4) Teilchenmassen (für jede der chemischen Spezies $i = 1, 2, \ldots, N$, wobei $\sum_{i=1}^{N} w_i = 1$)

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \rho \cdot w_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u_j \cdot w_i - F_{m_i,j})}{\partial x_j} = s_{m,i} \qquad . \tag{2.7}$$

Dieses System von Erhaltungsgleichungen ist erst in sich geschlossen, wenn man Beziehungen formuliert, welche die Komponenten des zähen Spannungstensors τ'_{ij} und die Komponenten der Wärme- und Massenstromdichte $F_{h,j}$, bzw. $F_{m_i,j}$ als Funktionen der primitiven Strömungsvariablen ausdrückt. Man verwendet hierzu die sogenannten empirischen Gesetze, auch „phänomenologische Gleichungen“ genannt, die aufgrund empirischer Beobachtungen aufgestellt wurden. Sie lassen sich jedoch auch aus theoretischen Überlegungen (kinetische Gastheorie, Thermodynamik irreversibler Prozesse) ableiten [1, 2, 4]. Im einzelnen sind dies das Newtonsche Schubspannungsgesetz, das Fouriersche Wärmeleitungsgesetz und das Ficksche Diffusionsgesetz. All diese Beziehungen verbinden den Fluß einer Erhaltungsgröße mit

den räumlichen partiellen Ableitungen erster Ordnung einer intensiven Größe. Glieder, die räumliche Ableitungen höherer Ordnung als Eins enthalten, werden vernachlässigt. Die aufgrund dieser Näherung erster Ordnung entstandenen Transportgleichungen tragen den Sammelnamen „Navier-Stokes-Gleichungen“.

Auf die Gesetzmäßigkeiten der Zweiphasenströmungen (z.B. Spray oder Wandfilm im Zylinder) wird nicht näher eingegangen, weil in den Ottomotoren, für welche die Strömung, die Verbrennung und die Schadstoffbildung im Rahmen dieser Arbeit berechnet werden sollen, Zweiphasenströmungen nicht vorkommen. Der Effekt der Strahlung auf die Strömung und die Reaktionskinetik wird vernachlässigt, weil er in Ottomotoren (im Gegensatz zu Dieselmotoren) von untergeordneter Bedeutung ist. Nach Heywood [55] beträgt der Wärmefluß an der Brennraumwand durch Strahlungsvorgänge maximal 5 % des Wärmeflusses durch Konvektion. Der Fehler, der durch die Vernachlässigung der Wärmeübertragung durch Strahlungsvorgänge resultiert, ist, über einen Zyklus gemittelt, vernachlässigbar. Deshalb wird auf die Gesetzmäßigkeiten der Strahlungsvorgänge ebenfalls nicht näher eingegangen.

2.2 Die empirischen Gesetze

2.2.1 Das Newtonsche Schubspannungsgesetz

In einer laminaren Strömung eines einfachen Fluids treten zwischen Schichten, die sich mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten bewegen, innere Reibungskräfte (viskose Kräfte) auf, die sich der relativen Bewegung der Schichten widersetzen. Ursache dieser Kräfte ist ein Austausch von Impuls auf molekularer Ebene. Wirkt eine Kraft $\mathrm{d}\overrightarrow{F}$ auf eine elementare Oberfläche $\mathrm{d}A$, deren äußere Senkrechte die Richtung des Einheitsvektors $\vec{n}$ besitzt, so definiert man den Spannungstensor τ mit Hilfe seiner Komponenten $\mathrm{d}F_i = \mathrm{d}A \cdot n_k \cdot \tau_{ik}$, wobei $i, k = 1, 2, 3$. Der Spannungstensor τ gibt den Teil des Impulsstromes an, der nicht mit dem unmittelbaren Transport des Impulses gemeinsam mit der Masse des bewegten Fluids zusammenhängt. In einem idealen Fluid (in welchem keine Prozesse der Energiedissipation wie Zähigkeit oder Wärmeleitung auftreten) folgen die Komponenten des Spannungstensors dem Ausdruck $\tau_{ij} = -p \cdot \delta_{ij}$, d.h. der Spannungstensor beschränkt sich auf den hydrostatischen Anteil. Für ein zähes Fluid kann der Spannungstensor τ in der Form $\tau_{ij} = -p \cdot \delta_{ij} + \tau'_{ij}$ geschrieben werden, wobei der Tensor mit den Komponenten τ'_{ij} zäher Spannungstensor oder Reibungstensor heißt.

Das Newtonsche Schubspannungsgesetz drückt die Komponenten des zähen Spannungstensors τ'_{ij} als negative Werte des Produkts der räumlichen partiellen Ableitungen der Geschwindigkeitskomponenten mit einer skalaren Größe, der dynamischen Zähigkeit oder Viskosität μ, aus:

$$\tau'_{ij} = -\mu \cdot \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \qquad . \tag{2.8}$$

Der zähe Spannungstensor τ' kann als Funktion des Deformationstensors D (Tensor mit den Komponenten $D_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$), der Divergenz des Geschwindigkeitsvektors $\frac{\partial u_l}{\partial x_l}$, des Scherzähigkeitskoeffizienten μ und des Volumenzähigkeitskoeffizienten κ dargestellt werden [1, 6] :

$$\tau'_{ij} = \mu \cdot (2 \cdot D_{ij} - \frac{2}{3} \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \cdot \delta_{ij}) + \kappa \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \cdot \delta_{ij} \qquad . \tag{2.9}$$

Der Ausdruck in der Klammer des ersten Terms hat die Eigenschaft, daß seine Verjüngung Null ist. Die dynamische Zähigkeit oder Scher-Zähigkeit charakterisiert Reibungseffekte, die in der Kontaktoberfläche zwischen aneinanderliegenden, sich mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten bewegenden Flüssigkeitsschichten (Fluidteilchen) auftreten und sich der Relativbewegung der Schichten (Fluidteilchen) widersetzen. Der dynamische Zähigkeitskoeffizient μ ist für eine weitreichende Klasse von Fluiden nicht von den räumlichen Ableitungen der Geschwindigkeit abhängig, sondern nur von Temperatur und Druck. Fluide, die dieser Klasse angehören, heißen Newtonsche Fluide. Dazu gehören alle Gase und alle homogenen nichtpolymeren Flüssigkeiten [4]. Die kinetische Theorie verdünnter Gase (Modell harter Kugeln) liefert für den dynamischen Zähigkeitskoeffizienten eines idealen Gases der molaren Masse M_i und dem molekularen Durchmesser σ_i folgenden Ausdruck:

$$\mu_i = \frac{5}{16} \cdot \frac{\sqrt{\pi \cdot n \cdot M_i \cdot k_B \cdot T}}{\pi \cdot \sigma_i^2} \quad . \tag{2.10}$$

Bei Berücksichtigung von Realgaseffekten mit Hilfe des Sutherland-Korrekturfaktors ergibt sich für den dynamischen Zähigkeitskoeffizienten der Ausdruck [2]

$$\mu_i = \frac{5}{16} \cdot \frac{\sqrt{\pi \cdot n \cdot M_i \cdot k_B \cdot T}}{\pi \cdot \sigma_i^2 \, (1 + C_i/T)} = 2,6693 \cdot 10^{-8} \frac{\sqrt{M_i \cdot T}}{\sigma_i^2 \cdot (1 + C_i/T)} \qquad \left[\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{m} \cdot \mathrm{s}}\right], \tag{2.11}$$

wobei σ_i in nm eingesetzt wird. Der dynamische Viskositätskoeffizient hängt nicht vom Druck ab und ist mit der Wurzel der Temperatur annähernd proportional.

Für ein Gemisch idealer Gase kann folgende empirische Näherungsformel benutzt werden [2]:

$$\mu = \frac{1}{2} \left(\sum_i X_i \cdot \mu_i + \left(\sum_i \frac{X_i}{\mu_i} \right)^{-1} \right) \quad . \tag{2.12}$$

In der vorliegenden Arbeit wurde der molekulare dynamische Zähigkeitskoeffizient der Komponenten und des Gasgemisches anhand der Beziehungen (Gl. 2.11) bzw. (Gl. 2.12) berechnet, die in das Anwenderunterprogramm VISMOL.F eingebaut wurden.

Die Volumenviskosität κ beschreibt Reibungseffekte, die bei der Expansion eines Fluids auftreten und durch Relaxationseffekte zwischen inneren Freiheitsgraden der Moleküle und der Translationsbewegung bedingt sind. Sie ist gleich Null für einatomige Gase; im allgemeinen ist der Beitrag der Volumenviskosität zu dem Reibungstensor sehr gering, so daß sie in den meisten Fällen vernachlässigt werden kann [1,3]. Unter Verwendung dieser Näherung ergibt sich für den zähen Spannungstensor der Ausdruck

$$\tau'_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \cdot \delta_{ij} \right) \quad . \tag{2.13}$$

2.2.2 Diffusion

In inhomogenen Strömungen, in denen das Fluid aus einem Gemisch unterschiedlicher chemischer Spezies besteht, treten aufgrund von Konzentrationsgradienten, Temperatur- oder Druckgradienten oder aufgrund äußerer (z.B. elektromagnetischer) Kräfte Massenströme von

chemischen Spezies relativ zum Gesamtmassenstrom des Fluids auf. Dieses Phänomen wird als Diffusion bezeichnet. Dabei bewegt sich der Massenschwerpunkt einer bestimmten chemischen Spezies i relativ zum Massenschwerpunkt des Gemisches (d.h. Fluidteilchens) mit einer Geschwindigkeit $\overrightarrow{V_i}$, die Diffusionsgeschwindigkeit genannt wird [4]. Es gilt

$$\sum_i \rho_i \overrightarrow{V_i} = 0 \qquad . \tag{2.14}$$

Treten in einer Strömung gleichzeitig Gradienten mehrerer Zustandsgrößen des Fluids (Temperatur, Druck, Spezieskonzentrationen, elektrisches Potential) auf, so erzeugt jeder Gradient einen Diffusionsfluß der Teilchenart i [8]. Die resultierende Massenstromdichte der chemischen Spezies i relativ zum Fluidschwerpunkt ist durch die vektorielle Summe der einzelnen Massenstromdichten gegeben

$$\overrightarrow{F^d_{m_i}} = n_i \cdot M_i \cdot \overrightarrow{V_i} = \overrightarrow{F^d_{m_i}} + \overrightarrow{F^T_{m_i}} + \overrightarrow{F^p_{m_i}} + \overrightarrow{F^{ext}_{m_i}} \qquad . \tag{2.15}$$

Für den Massentransport der chemischen Spezies i aufgrund des Konzentrationsgradienten einer Spezies j („normale“ oder „einfache“ Diffusion) ergibt sich nach dem 1. Fickschen Gesetz, daß die Massenstromdichte proportional zum Konzentrationsgradienten der betreffenden Spezies j ist [1],

$$\overrightarrow{F^d_{m,i}} = \frac{n^2}{\rho} \sum_j D^p_{ij} \cdot M_i \cdot M_j \cdot \mathrm{grad}\,(c_j) \qquad . \tag{2.16}$$

Die Koeffizienten D^p_{ij} heißen polynäre Diffusionskoeffizienten. Für ein Gemisch aus nur zwei unterschiedlichen Teilchenarten i und j gilt

$$\overrightarrow{F^d_{m,i}} = \frac{n^2}{\rho} D_{ij} M_i M_j \cdot \mathrm{grad}\,(c_j) = -\frac{n^2}{\rho} D_{ij} M_i M_j \cdot \mathrm{grad}\,(c_i) = -\rho D_{ij} \cdot \mathrm{grad}\,(w_i)\,. \tag{2.17}$$

Der Koeffizient D_{ij} heißt binärer Diffusionskoeffizient der Teilchenart i in die Teilchenart j und ist praktisch unabhängig von den Konzentrationen der Spezies i und j. Die polynären Diffusionskoeffizienten sind im Gegensatz dazu konzentrationsabhängig. Sie lassen sich jedoch aus den binären Diffusionskoeffizienten berechnen. Natürlich gilt $D_{ii} = 0$.

Für ein ideales Gas liefert die kinetische Gastheorie (Modell der harten Kugeln) [2] für binäre Diffusionskoeffizienten den Ausdruck

$$D_{ij} = \frac{3}{8} \frac{\sqrt{\pi k T \cdot 2\mu_r}}{\pi \cdot \rho \cdot \sigma^2_{ij}} \qquad . \tag{2.18}$$

Darin wurde für den molekularen Parameter σ_{ij}, der den minimalen Abstand zwischen den Molekülen vom Typ i und j bei einem Stoß beschreibt, das arithmetische Mittel

$$\sigma_{ij} \cong \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \tag{2.19}$$

angenommen. In (Gl. 2.18) stellt $\mu_r = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}$ die reduzierte Masse eines Systems bestehend aus jeweils einem Teilchen der Spezies i und der Spezies j dar. Für die binären Diffusionskoeffizienten ergibt sich nach Eliminierung der Dichte (ideales Gasgesetz) der Ausdruck

$$D_{ij} = 2,662 \cdot 10^{-9} \frac{\sqrt{T^3 \cdot \frac{M_1 + M_2}{2 \cdot M_1 \cdot M_2}}}{p \cdot \sigma^2_{ij}} \qquad \left[\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}}\right]. \tag{2.20}$$

Die Beiträge der Thermodiffusion (Soret-Effekt), der Druckdiffusion und der erzwungenen Diffusion zum Gesamtmassenstrom (d.h. die Massenströme der Teilchenart i aufgrund eines Temperaturgradienten, eines Druckgradienten, bzw. einer äußeren Kraft $\overrightarrow{F^*}$) unterliegen den folgenden Gesetzmäßigkeiten [2]:

Thermodiffusion:

$$\overrightarrow{F_{m_i}^T} = -D_i^T \cdot \mathrm{grad}\left[\ln\left(T\right)\right] \qquad , \tag{2.21}$$

Druckdiffusion:

$$\overrightarrow{F_{m_i}^p} = \frac{n^2}{\rho} \sum_j D_{ij} \cdot m_i \cdot m_j \cdot \left(\frac{n_j}{n} - \frac{n_j m_j}{\rho}\right) \mathrm{grad}\left[\ln\left(p\right)\right] \qquad , \tag{2.22}$$

Erzwungene Diffusion:

$$\overrightarrow{F_{m_i}^{ext}} = -\frac{n^2}{\rho} \sum_j D_{ij} \cdot m_i \cdot m_j \cdot \left(\frac{n_j m_j}{\rho \cdot p}\right) \cdot \left[\frac{\rho}{m_j} \overrightarrow{F_j^*} - \sum_k n_k \overrightarrow{F_k^*}\right] \qquad . \tag{2.23}$$

Die Thermodiffusion ist nur bei tiefen Temperaturen und leichten Teilchen (H, H_2, He) von Bedeutung, der Druckgradient ist in Flammen (außer in Explosionen) klein. Keines dieser beiden Phänomene spielt eine nennenswerte Rolle im Falle ottomotorischer Verbrennungsprozesse. Sie können daher vernachlässigt werden [2]. Äußere Kräfte (z.B. elektromagnetische Felder) sind nur während der Zündphase bei Funkenzündung von Bedeutung. Somit ist in Flammen die „normale“ Diffusion der dominierende Diffusionsprozeß. Daher wurden die restlichen Diffusionsflüsse in der vorliegenden Arbeit vernachläßigt. In 3D-Simulationsprogrammen (z.B. in Star-CD) wird standardmäßig zur Berechnung des Diffusionsflusses einer Spezies i in einem Gemisch anstelle des sehr Rechenzeit-intensiven Ausdrucks (Gl. 2.16), eine empirische Näherung verwendet. Sie verbindet die Massenstromdichte der Teichenart i mit dem Gradienten des Massenbruchs dieser Teilchenart über den mittleren Diffusionskoeffizienten $D_{i,M}$ des Stoffes i in der Mischung der restlichen Spezies:

$$\overrightarrow{F_{m,i}^d} = \frac{n^2}{\rho} D_{i,M} M_i \bar{M} \mathrm{grad}\left(c_i\right) = -\frac{n^2}{\rho} D_{i,M} \frac{w_i}{c_i} \mathrm{grad}\left(c_i\right) = -\rho D_{i,M} \cdot \mathrm{grad}\left(w_i\right). \tag{2.24}$$

Nach Stefan (1874) ist der mittlere Diffusionskoeffizient des Stoffes i in die Mischung der restlichen Stoffe durch die folgende Beziehung gegeben [2]:

$$D_{i,M} = \frac{1 - w_i}{\sum\limits_{j \neq i} \frac{X_j}{D_{ij}}} \qquad . \tag{2.25}$$

In der vorliegenden Arbeit wurde zur Berechnung der molekularen Massenstromdichte $F_{m_i,j}$ der Ausdruck (Gl. 2.20) zur Berechnung der binären Diffusionskoeffizienten zusammen mit (Gl. 2.25) in das Anwenderunterprogramm DIFFUS.F eingebaut.

Das Verhältnis zwischen molekularer Zähigkeit und dem Produkt aus Dichte und molekularem Diffusionskoeffizient eines Stoffes i ist eine charakteristische dimensionslose Größe, die als „Schmidt-Zahl“ bekannt ist:

$$Sch_i = \frac{\mu_i}{\rho \cdot D_{i,M}} \approx 0,7 \qquad . \tag{2.26}$$

2.2.3 Wärmeübertragung

Wärmeübertragung findet im allgemeinen durch folgende Vorgänge statt [3, 9, 10]:

1) Wärmeleitung in Festkörpern oder ruhenden Fluiden $\left(\overrightarrow{F_h^{\lambda}}\right)$,

2) Diffusionsflüsse $\left(\overrightarrow{F_h^{d}}\right)$ und Dufour-Effekt $\left(\overrightarrow{F_h^{D}}\right)$,

3) Konvektion, d.h. durch Mitführung in bewegten Flüssigkeiten und Gasen, was auch die Berührung von wärmeaustauschenden Wänden einschließt ($\Phi_{h,\vec{u}}$),

4) Strahlung als Wärmeaustausch zwischen Körpern ohne Zwischenträger ($\Phi_{h,rad}$).

Der resultierende Diffusionswärmefluß, die unbekannte Größe in dem dritten Glied der Transportgleichung für die Enthalpie (Gl. 2.6), ist gegeben durch die vektorielle Summe der einzelnen Wärmestromdichten:

$$\overrightarrow{F_h} = \overrightarrow{F_h^{\lambda}} + \overrightarrow{F_h^{d}} + \overrightarrow{F_h^{D}} \quad . \tag{2.27}$$

Wärmeleitung

In einem festen Körper oder einem ruhenden Fluid tritt aufgrund von Temperaturgradienten ein Wärmefluß auf, der gemäß dem 1. Fourierschen Gesetz mit dem Temperaturgradienten proportional ist [9, 10]:

$$\overrightarrow{F_h^{\lambda}} = -\lambda_h \cdot \mathrm{grad}\,(T) \quad . \tag{2.28}$$

Der Proportionalitätsfaktor λ_h heißt Wärmeleitfähigkeitskoeffizient. Dafür liefert die kinetische Gastheorie (Modell harter Kugeln) für ein ideales Gas i folgenden Ausdruck [2]:

$$\lambda_{h,i} = \frac{25}{32} \cdot \frac{\sqrt{\pi m_i k_B T}}{\pi \cdot \sigma_i^2} \cdot \frac{c_v}{m_i} \approx 8,332 \cdot 10^{-8} \cdot \frac{\sqrt{T/M_i}}{\sigma_i^2} \quad \left[\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{m \cdot s \cdot K}}\right] \quad . \tag{2.29}$$

In (Gl. 2.29) ist der Stoßdurchmesser σ_i der Teilchenart i in nm einzusetzen.

Für ein Gemisch idealer Gase kann man die mittlere Wärmeleitfähigkeit der Mischung λ_h mit Hilfe des folgenden empirischen Gesetzes (Mathur et al.,1967) ermitteln [2]:

$$\lambda_h = \frac{1}{2} \cdot \left[\sum_i X_i \cdot \lambda_{h,i} + \left(\sum_i \frac{X_i}{\lambda_{h,i}}\right)^{-1}\right] \quad . \tag{2.30}$$

Die oben aufgeführten Beziehungen (Gl. 2.29) und (Gl. 2.30) wurden in das Anwenderunterprogramm zur Berechnung des molekularen Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten CONDUC.F eingebaut.

Das Verhältnis zwischen dem Produkt aus Viskositätskoeffizient und spezifischer Wärmekapazität bei konstantem Druck und dem molekularen Wärmeleitfähigkeitskoeffizienten eines Stoffes i ist eine dimensionslose Größe, die als "Prandtl-Zahl" bekannt ist:

$$Pr_i = \frac{\mu_i \cdot c_{p,i}}{\lambda_{h,i}} \approx 0,7 \quad . \tag{2.31}$$

Das Verhältnis von Schmidt-Zahl und Prandtl-Zahl ergibt eine andere für Verbrennungsvorgänge sehr wichtige dimensionslose Größe, die „Lewis-Zahl" einer Teilchenart i:

$$Le_i = \frac{Sch_i}{Pr_i} = \frac{\lambda_{h,i}}{\rho D_{i,M} c_{p,i}} \approx 1 \qquad . \tag{2.32}$$

Bei Gasgemischen wird die Lewis-Zahl des Gemisches der Lewis-Zahl des unterschüssigen Ausgangsstoffes gleichgesetzt.

Diffusionsflüsse und Dufour-Effekt

Die Enthalpie H eines thermodynamischen Systems beträgt

$$H = T \cdot S + p \cdot V + \sum_i \mu_i^0 \cdot N_i + V \cdot (\overrightarrow{E_{el}} \cdot \overrightarrow{P_{el}} + \mu_{0,magn} \cdot \overrightarrow{H_{mag}} \cdot \overrightarrow{M_{mag}}) + \ldots \tag{2.33}$$

In inhomogenen Strömungen, in welchen das Fluid aus einem Gemisch unterschiedlicher chemischer Stoffe gebildet wird, tritt gleichzeitig mit dem Diffusionsmassenstrom (aufgrund der normalen Diffusion) ein Enthalpiestrom auf, weil jede chemischen Substanz eine chemische Enthalpie besitzt. Die Bildungsenthalpie stellt die Reaktionsenthalpie der Bildungsreaktion dieser Substanz aus den darin enthaltenen Elementen dar. Die Absolutwerte der Enthalpien der Elemente sind für praktische Rechnungen nicht festgelegt. Aus diesem Grund legt man für alle chemischen Elemente willkürlich einen Bezugszustand (Standardzustand: $p = 1,0$ bar und $T = 298{,}15$ K) fest, in dem vereinbarungsgemäß alle Elemente (in ihrem stabilsten Zustand) die Enthalpie $H = 0$ besitzen. Die Standardbildungsenthalpie eines Stoffes ist die Reaktionsenthalpie seiner Bildungsreaktion aus reinen Elementen bei der Temperatur $T = 298,15K$ und dem Druck $p = 1,0$ bar. In Star-CD ist die spezifische Enthalpie definiert als

$$h = \overline{c_p} \cdot T - c_p^0 \cdot T_0 + \sum w_n \cdot H_n^0 \qquad , \tag{2.34}$$

wobei w_n der Massenbruch und H_n^0 die spezifische Bildungsenthalpie des Stoffes n sind und T_0 die Temperatur des vereinbarten Bezugszustandes ist.

Die Wärmestromdichte durch Diffusionsflüsse ist somit

$$\overrightarrow{F_h^d} = \sum_n H_n^0 \cdot \overrightarrow{F_{m_n}^d} \cong \sum nH_n^0 \cdot \rho \cdot D_{n,M} \cdot \mathrm{grad}\,(w_n) \qquad . \tag{2.35}$$

Durch Diffusionsprozesse, die in einem Gemisch stattfinden, tritt zusätzlich zu dem Enthalpiestrom durch Diffusionsflüsse ein Enthalpiestrom aufgrund von Konzentrationsgradienten auf. Dieser Vorgang wird Dufour-Effekt genannt und ist der reziproke Effekt zur Thermodiffusion [2,3]. Beide Effekte sind gekoppelte Effekte, gekennzeichnet dadurch, daß ein Gradient mehrere Flüsse (einen Massenstrom und einen Enthalpiestrom) hervorruft. Die Wärmestromdichte aufgrund des Dufour-Effekts ist

$$\overrightarrow{F_h^D} = \overline{M} RT \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{D_i^T}{\rho \cdot D_{ij} M_i M_j} \left(\frac{w_j}{w_i} \cdot \overrightarrow{F_i^d} - \overrightarrow{F_j^d} \right) \qquad . \tag{2.36}$$

Der Dufour-Effekt ist in Verbrennungsprozessen normalerweise vernachlässigbar [2,3] und wurde auch in der vorliegenden Arbeit nicht berücksichtigt.

Konvektion

In strömenden Flüssigkeiten und Gasen tritt zusätzlich zur molekularen Wärmeleitung noch der Energietransport durch Konvektion (Mitführung durch die Hauptströmung des Fluids) hinzu. Diese Enthalpiestromdichte ist im Inneren der Strömung durch das zweite Glied in der Transportgleichung der Enthalpie (Gl. 2.6) beschrieben, das deshalb „Konvektionsterm“ genannt wird:

$$\Phi_{h,\vec{u}} = \sum_i \frac{\partial\left(\rho h u_i\right)}{\partial x_i} \qquad . \tag{2.37}$$

Zur Wärmeübertragung durch Konvektion wird auch der Wärmeaustausch mit den undurchlässigen („festen“) Wänden, die das Fluid begrenzen, gezählt. Auch wenn im Inneren des Fluids die Strömung turbulent ist, so ist sie in einer dünnen, wandnahen Schicht laminar und der mit der Wand ausgetauschte Wärmestrom läßt sich gemäß dem Newtonschen Wärmeübergangsgesetz berechnen:

$$\Phi_{h,wall} = \alpha_h \cdot A \cdot (T_\infty - T_{wall}) \qquad , \tag{2.38}$$

wobei A der Flächeninhalt der Kontaktoberfläche Fluid/Wand, T_{wall} die Wandtemperatur und T_∞ die Temperatur des Fluids in genügend großer Entfernung von der Wand (d.h. im Bereich der voll ausgebildeten Turbulenz) darstellt. Der Proportionalitätsfaktor α_h wird Wärmeübergangskoeffizient genannt und ist im allgemeinen eine Funktion der Stoffeigenschaften des Fluids (z.B. Wärmeleitfähigkeit, dynamische Zähigkeit), des Strömungszustandes (z.B. der lokalen mittleren Strömungsgeschwindigkeit des Fluids in Wandnähe) und der geometrischen Verhältnisse.

In dem Versuch, den Wärmeübergangskoeffizienten α_h als Funktion der oben genannten Parameter darzustellen, hat die Ähnlichkeitstheorie die besten Ergebnisse geliefert, und sie findet heute in motorischen Berechnungen die am weitesten verbreitete Anwendung. Die Ähnlichkeitstheorie ist begründet auf der Idee der Zusammenfassung der relevanten physikalischen Größen zu dimensionslosen Größen (Kennzahlen), so daß gewisse Strömungszustände vergleichbar werden, wenn die entsprechenden Kennzahlen gleich sind. Solche Kennzahlen sind z.B. die bereits erwähnten Prandtl-Zahl, Schmidt-Zahl und Lewis-Zahl, die Reynolds-Zahl oder die „Nußelt-Zahl“, die das Verhältnis aus dem Produkt von Wärmeübergangskoeffizient mit charakteristischen Länge des Fluids und der Wärmeleitfähigkeit des Fluids darstellt,

$$Nu = \frac{\alpha_h \cdot d}{\lambda_h} \qquad . \tag{2.39}$$

In der vorliegenden Arbeit werden zwei unterschiedliche Beziehungen für die Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten α_h verwendet, und die jeweiligen Ergebnisse werden miteinander verglichen. Die eine Beziehung ist die 2. Form der Woschni-Korrelation (Woschni, 1967 [10]),

$$\alpha_h = 3,26 \cdot D^{-0.2} \cdot p^{0.8} \cdot T_\infty^{-0.53} \cdot \left[C_1 \cdot c_m + C_2 \cdot \frac{V_H \cdot T_1}{p_1 \cdot V_1} \cdot (p - p_0)\right]^{0.8} \qquad \left[\frac{\mathrm{W}}{\mathrm{m^2K}}\right] \quad . \tag{2.40}$$

In (Gl. 2.40) ist D der Durchmesser der Zylinderbohrung, c_m die mittlere Kolbengeschwindigkeit, C_1 und C_2 sind Modell-Konstanten (mit den Werten $C_1 = 6,18$ für den Ladungswechsel bzw. $C_1 = 2,28$ für den Verdichtungs- und Ausdehnungshub, $C_2 = 0,00324$). Die Größe p_0

ist der Druck des Arbeitsgases in einem ungefeuerten Zyklus, p_1, T_1, V_1 sind Druck, Temperatur, bzw. Volumen des Arbeitsgases bei Beginn der Verdichtung (Ladungswechsel-UT) und V_H ist das Hubvolumen des Arbeitszylinders. Die Woschni-Korrelation basiert auf der von Nußelt anhand der Ähnlichkeitstheorie gefundenen Beziehung für den Wärmeübergang in einem durchströmten Rohr.

Die zweite Beziehung für den Wärmeübergangskoeffizienten ist auf der Turbulenztheorie (Wärmeübergang in einer wandnahen Scherschicht) begründet und ist in dem Programmpaket Star-CD standardmäßig eingebaut. Auf diese Beziehung wird in Kap. 2 (Turbulenz) detailliert eingegangen.

Die Woschni-Korrelation (Gl. 2.40) zur Berechnung des Wärmeübergangskoeffizienten wurde in das Anwenderunterprogramm MODSWF.F eingebaut. Dabei wurde als T_∞ die Temperatur im Mittelpunkt der Zellen in der wandnächsten Zellschicht angenommen, deren Abstand zur festen Wand den Bedingungen der Gültigkeit des logarithmischen Wandgesetzes (s. Kap. 2.3) genügen muß.

Die Wärmeübertragung durch Strahlung spielt bei Ottomotoren im Gegensatz zu Dieselmotoren eine untergeordnete Rolle. Auf die Gesetzmäßigkeiten des radiativen Wärmeübergangs wird im Rahmen dieser Arbeit nicht eingegangen und der Beitrag der Strahlung in der Transportgleichung der Enthalpie wurde vernachlässigt.

2.3 Die Zustandsgleichung des idealen Gases

Neben den im letzten Abschnitt behandelten phänomenologischen Gleichungen, die die Stromdichten als Funktion der räumlichen Ableitungen der primitiven Strömungsvariablen ausdrücken, wird zur Lösung des Systems von Erhaltungsgleichungen eine weitere Beziehung benötigt, die die Zustandsvariablen Druck, Temperatur, Dichte, Volumen miteinander verbindet.

Es gibt mehrere und unterschiedlich aufwendige Ansätze zur Beschreibung realer Gasgemische beruhend auf der Gleichung von van der Waals, der von Beattie und Bridgeman oder der von Redlich-Kwong usw. Für ein Gasgemisch gilt in dem Bereich mittlerer Drücke und Temperaturen (p zwischen 1 bar und 100 bar, T zwischen 270 K und 3000 K), wie sie in Ottomotoren vorkommen, mit guter Genauigkeit die van der Waals-Gleichung

$$\left(p + \frac{(\sum_i n_i^2) \cdot a_{mix}}{V^2} \right) \cdot (V - b_{mix}) = \left(\sum_i n_i \right) \cdot RT \qquad , \tag{2.41}$$

wobei die van der Waals-Koeffizienten des Gemisches

$$a_{mix} \approx \left(\sum_i c_i \sqrt{a_i} \right)^{\frac{1}{2}} \qquad \text{und} \qquad b_{mix} \approx \left(\sum_i c_i \sqrt{b_i} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{2.42}$$

aus den entsprechenden van der Waals-Koeffizienten der reinen Substanzen näherungsweise berechnet werden. Eine alternative Zustandsgleichung ist im Falle der motorischen Verbrennungsprozesse in ausreichend guter Näherung die Zustandsgleichung der idealen Gase

$$p = \rho RT / \bar{M} \qquad , \tag{2.43}$$

wobei

$$\bar{M} = \frac{1}{\sum\limits_i \frac{w_i}{M_i}} \tag{2.44}$$

die mittlere molare Masse des Gemisches darstellt. Die Beziehungen (Gln. 2.41 - 2.44) wurden in das Anwenderunterprogramm DENSIT.F in einer Form eingebaut, die es dem Anwender erlaubt, durch Umstellen eines Schalters die eine oder die andere der beiden Zustandsgleichungen zu verwenden. Der Spitzendruck im Brennraum von Ottomotoren beträgt meistens viel weniger als 100 bar (30 bis 70 bar), so daß in einem solchen Fall die Unterschiede bei der Berechnung der Dichte mit den beiden genannten Ansätzen vernachlässigbar sind. Deshalb wurde in den folgenden Berechnungen durchgehend das ideale Gasgesetz verwendet. Die Berechnung der Dichte anhand der van der Waals-Gleichung ist nämlich unverhältnismäßig Rechenzeit-intensiver als die Berechnung aufgrund des idealen Gasgesetzes.

2.4 Die spezifische Wärmekapazität

Die Enthalpie eines Gemisches idealer Gase ist durch die Summe der Enthalpien der einzelnen Komponenten des Gemisches gegeben. Somit gilt für die spezifische Enthalpie der Mischung

$$h = \frac{H}{m} = \sum_n w_n \cdot h_n \qquad . \tag{2.45}$$

Für jede Komponente des Gemisches kann die Änderung der Enthalpie geschrieben werden als

$$\mathrm{d}h_n = \left(\frac{\partial h_n}{\partial T}\right)_p \mathrm{d}T = c_{p,n}\left(T\right) \qquad , \tag{2.46}$$

weil die spezifische Enthalpie eines idealen Gases druckunabhängig ist. Die partielle Ableitung der Enthalpie (bzw. spezifischen Enthalpie) nach der Temperatur wird Wärmekapazität (bzw. spezifische Wärmekapazität) bei konstantem Druck genannt. Sie läßt sich aus experimentellen Daten (z.B. aus der „Chemkin Thermodynamics Data Base“ der Sandia National Laboratories, USA, 1990 oder den „JANAF Thermochemical Tables“, [8]) durch einen Polynomansatz näherungsweise berechnen als

$$c_{p,n} = \frac{R}{M_n} \cdot \left(a_1 + a_2 \cdot T + a_3 \cdot T^2 + a_4 \cdot T^3 + a_5 \cdot T^4\right) \qquad . \tag{2.47}$$

Die spezifische Wärmekapazität der Mischung und deren spezifische Enthalpie sind dann

$$\overline{c_p} = \sum_n w_n \cdot c_{p,n} \qquad , \tag{2.48}$$

$$h = \frac{H}{m} = \overline{c_p} \cdot T - c_p^0 \cdot T_0 + \sum_n w_n \cdot H_n^0 \qquad . \tag{2.49}$$

Die Beziehungen (Gl. 2.47) und (Gl. 2.48) werden in der vorliegenden Arbeit zur Berechnung der spezifischen Wärmekapazität verwendet. Das entsprechende Anwenderunterprogramm SPECHT.F wurde von Computational Dynamics Ltd, London zur Verfügung gestellt.

2.5 Quellterme in der Kontinuitätsgleichung

Weil die Gesamtmasse eines makroskopischen Systems sich durch keinerlei physikalische oder chemische Prozesse verändern kann, ist der Quellterm für die Gesamtmasse in der Kontinuitätsgleichung gleich Null. Jedoch kann es u.U. vorteilhaft sein, die Prozesse, in denen ein Massenaustausch des betrachteten Systems mit der Umgebung stattfindet, anstatt durch Konvektion besser durch Quellterme in der Kontinuitätsgleichung zu modellieren. Ein solcher Prozeß ist die Leckage (engl. blowby).

Der Brennraum einer Verbrennungskraftmaschine ist mit einer Anzahl kleiner Volumina mit sehr engen Querschnitten (Spalten) verbunden, die in dem Kontaktbereich verschiedener Motorkomponenten entstehen.Während einer jeden Umdrehung strömt das Gasgemisch aus dem Brennraum in diese Spalte hinein, wird in diesen für eine bestimmte Zeit eingelagert und strömt dann wieder zurück. Die wichtigsten hiervon sind die Volumina zwischen Kolben, Kolbenringen und Zylinderwand (Kolbenringspalte). Entlang der Kolbenringspalte tritt infolge des Überdruckes in dem Arbeitszylinder des Motors ein Massenstrom auf, welcher Masse über die Grenzen des betrachteten Strömungsgebiets (Zylinder und evtl. Kolbenringspalte) hinaus in das Kurbelgehäuse befördert (Leckage) [39]. Der umgekehrte Prozess, das Eindringen von Gasgemisch aus dem Kurbelgehäuse in den Brennraum, spielt im Teillastbereich eine wichtige Rolle; bei Vollast ist er relativ unbedeutend. Um eine korrekte Berechnung des Drucks anhand der Zustandsgleichung durchführen zu können, muß dieser Massenfluß berücksichtigt werden .

Für die Massenstromdichte eines idealen Gases, das aus einem großen Behälter mit Druck p_0 durch eine gut abgerundete, konvergente Düse in die Umgebung mit dem Druck p_{ext} austritt, gilt die Beziehung [9]

$$\Phi_m = -\sqrt{2\frac{\gamma}{\gamma-1}\cdot\frac{p_0^2}{RT_0}\cdot\left[\left(\frac{p_m}{p_0}\right)^{\frac{2}{\gamma}}-\left(\frac{p_m}{p_0}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma}}\right]} \quad , \tag{2.50}$$

wobei $\gamma = c_p/c_v$ der Adiabatenexponent des Gasgemisches,

$$p_m = \max\left(p_{ext}, p_{crit}\right)$$

und

$$p_{crit} = \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma+1}}\cdot p_0 \tag{2.51}$$

den kritischen Druck (Laval-Druck) darstellen [9]. Der Ausdruck (Gl. 2.50) kann näherungsweise auch für den Lekagefluß angewendet werden. Der Massenstrom der Gase, die durch Leckage den Zylinder verlassen, ist

$$\left(\frac{\partial m}{\partial t}\right)_{leck} = A_{eff}\cdot\Phi_m = U\cdot b_{sp}\cdot\Phi_m \quad , \tag{2.52}$$

wobei U der Umfang des Kolbenrings ist und $b_{sp} \approx 10$ μm die mittlere Weite des Kolbenspaltes.

Aus Gründen der Netzgenerierung ist es bei heutigen Rechennetzen (mit Zelldimensionen der Größenordnung $\Delta U \approx 1$ mm) nicht möglich, eine Zellschicht der Dicke 0,01 mm

am Kolbenring zu verwenden, an der ein Massenfluß gemäß (Gl. 2.50) über eine sog. „Inlet"-Randbedingung vorgeschrieben werden soll. Ersatzweise kann den Zellen entlang des Kolbenspalts Fluidmasse entzogen werden, so daß der Gasstrom mit der Massenstromdichte aus (Gl. 2.50) simuliert wird. Der Massenverlust durch Leckage in einem Volumenelement $\mathrm{d}V$ entlang des Kolbenspaltelements der Länge $\mathrm{d}U$ im Zeitraum $\mathrm{d}t$ beträgt

$$\mathrm{d}m = \Phi_m \cdot \mathrm{d}A \cdot \mathrm{d}t = \Phi_m \cdot b_{sp} \cdot \mathrm{d}U \cdot \mathrm{d}t = s_m \cdot \mathrm{d}V \cdot \mathrm{d}t \qquad . \tag{2.53}$$

Diese Massenentnahme erfolgt in Form eines Senkenterms in der Kontinuitätsgleichung,

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \rho)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u_j)}{\partial x_j} = s_m \qquad , \tag{2.54}$$

wobei

$$s_m = \frac{\Phi_m dA}{dV} \cong \frac{\Phi_m \cdot b_{sp} \cdot \Delta U}{\Delta V} \qquad , \tag{2.55}$$

wenn die Zelle mit Volumen ΔV von dem (obersten) Kolbenringspalt begrenzt wird und

$$s_m = 0 \qquad , \tag{2.56}$$

wenn dies nicht der Fall ist.

Die (Gl. 2.50) und (Gln. 1.55 - 1.56) wurden zur Berücksichtigung der Leckage in den Berechnungen zum Quadratischen Forschungsmotor von Daimler-Benz verwendet. Das Unterprogramm FLUINJ.F zusammen mit dem angepaßten Wert $b_{sp} = 14\ \mu$m für die Leckspaltweite bei dem Quadratischen Forschungsmotor (bestimmt durch Nachrechnung des Druckverlaufs in einem geschleppten Zyklus) wurde von B. Heel zur Verfügung gestellt [53].

2.6 Die chemischen Produktionsterme

In chemisch reagierenden Strömungen findet eine Umwandlung von Stoffen statt, die durch eine Gleichung vom Typ:

$$\mathrm{A} + \mathrm{B} + \mathrm{C} + \mathrm{D} + \ldots \overset{k_f}{\rightarrow} \mathrm{E} + \mathrm{F} + \mathrm{G} + \ldots \tag{2.57}$$

annähernd beschrieben werden kann. Der globale chemische Prozeß läßt sich prinzipiell in eine große Zahl von chemischen Reaktionen der Form

$$\sum_n \nu_{n,r}^{(a)} \mathrm{A}_n \overset{k_l}{\rightarrow} \sum_n \nu_{n,r}^{(p)} \mathrm{A}_n \tag{2.58}$$

zerlegen, die im Gegensatz zu Bruttoreaktionen wie (Gl. 2.57) auf molekularer Ebene genauso ablaufen wie es die Reaktionsgleichung beschreibt (Elementarreaktionen). Die Koeffizienten $\nu_{n,r}^{(a)}$ und $\nu_{n,r}^{(p)}$ heißen stöchiometrische Koeffizienten des Stoffes n in der Reaktion r. Die Bildungsgeschwindigkeit eines Stoffes n durch chemische Reaktionen in einer Mischung von S Stoffen kann ausgedrückt werden als

$$\left(\frac{\partial c_n}{\partial t}\right)_{chem,r} = \sum_{r=1}^{R} k_f\,(T,p) \cdot \left(\nu_{n,r}^{(p)} - \nu_{n,r}^{(a)}\right) \cdot \prod_{s=1}^{S} c_s^{\nu_{s,r}^{(a)}} \qquad \left[\frac{\mathrm{kmol}}{\mathrm{m}^3 \cdot \mathrm{s}}\right], \tag{2.59}$$

wobei c_s die Konzentration des Stoffes s darstellt. Die Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskoeffizienten $k_f\,(T,p)$ wird mit befriedigender Genauigkeit durch einen modifizierten Arrhenius-Ansatz modelliert,

$$k_r\,(T) = A_r \cdot T^{\beta_r} \cdot \exp\left(\frac{-E_{A,r}}{RT}\right) \qquad . \tag{2.60}$$

In (Gl. 2.60) sind A_r der präexponentielle Faktor, β_r der Temperaturexponent und $E_{A,r}$ die Aktivierungsenenergie für die Reaktion r. Als interessantes Beispiel können hier die drei Gleichungen des Zeldovich-Mechanismus zur Bildung des thermischen NO aufgeführt werden [2], die in Kap. 4 der vorliegenden Arbeit ausführlich behandelt werden:

$$\mathrm{O} + \mathrm{N_2} \xrightarrow{k_1} \mathrm{NO} + \mathrm{N} \tag{2.61}$$

$$\mathrm{N} + \mathrm{O_2} \xrightarrow{k_2} \mathrm{NO} + \mathrm{O} \tag{2.62}$$

$$\mathrm{N} + \mathrm{OH} \xrightarrow{k_3} \mathrm{NO} + \mathrm{H}\ , \tag{2.63}$$

mit den Geschwindigkeitskoeffizienten

$$k_1 = 1,8 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-319\ \mathrm{kJ/mol}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{mol \cdot s}}\right] \qquad , \tag{2.64}$$

$$k_2 = 6,4 \cdot 10^{9} \cdot \exp\left(\frac{-26\ \mathrm{kJ/mol}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{mol \cdot s}}\right] \qquad , \tag{2.65}$$

$$k_3 = 3,0 \cdot 10^{13} \qquad \left[\frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{mol \cdot s}}\right] \qquad . \tag{2.66}$$

Der entsprechende Quellterm für die partielle Dichte des thermischen NO ist

$$\left(\frac{\partial \rho_{\mathrm{NO}}}{\partial t}\right)_{\mathrm{chem}} = M_{\mathrm{NO}} \cdot \left[k_1\,(T)\, c_{\mathrm{O}} c_{\mathrm{N_2}} + k_2\,(T)\, c_{\mathrm{N}} c_{\mathrm{O_2}} + k_3\,(T)\, c_{\mathrm{N}} c_{\mathrm{OH}}\right] \qquad . \tag{2.67}$$

Da für Elementarreaktionen die Reaktionsordnung der Reaktionsmolekularität entspricht, lassen sich leicht die Zeitgesetze dieser Elementarreaktionen ableiten. Umfaßt der Reaktionsmechanismus alle möglichen Elementarreaktionen eines reagierenden Systems (vollständiger Reaktionsmechnismus), so kann man mit Hilfe dieses Mechanismus die Bildungsgeschwindigkeiten aller chemischen Spezies unter allen möglichen Bedingungen von Temperatur und Druck berechnen [2]. Jedoch enthält ein vollständiger Reaktionsmechanismus bereits für die einfachsten Kohlenwasserstoffe (Methan, Propan, Acetylen) bei deren Verbrennung in Luft mehr als vierzig Spezies und hunderte Reaktionen mit Reaktionsgeschwindigkeiten ganz unterschiedlicher Größenordnungen. Dies hat zur Folge, daß das resultierende System partieller Differentialgleichungen eine hohe Steifheit besitzt und nur mit sehr hohem Rechenzeitaufwand zu lösen ist.

Reaktionsmechanismen besitzen jedoch einige wichtige charakteristische Eigenschaften wie „Quasistationarität“ und „Einstellung partieller Gleichgewichte“, deren Erkennung und Ausnutzung zu einer wesentlichen Verringerung des Rechenzeitbedarfs bei der Berechnung der instationären Gemischzusammensetzung in reaktiven Strömungen führen kann. Die Quasistationarität ist in der Regel für Spezies gewährleistet, die durch eine relativ langsame

Reaktion gebildet werden und die selbst Ausgangsstoffe von einer oder mehreren relativ schnellen Reaktionen sind, wie z.B. der atomare Stickstoff N in dem bereits aufgeführten Zeldovich-Mechanismus für das thermische NO. Dabei werden die Stickstoffatome in der sehr langsamen Reaktion (Gl. 2.64) gebildet und in den beiden anderen viel schnelleren Reaktionen verbraucht [2]. Das bedeutet eine kleine Änderung in der Konzentration des Zwischenprodukts N

$$\left(\frac{dc_{\mathrm{N}}}{dt}\right)_{\mathrm{chem}} = \left[k_1\left(T\right)c_{\mathrm{O}}c_{\mathrm{N_2}} - k_2\left(T\right)c_{\mathrm{N}}c_{\mathrm{O_2}} - k_3\left(T\right)c_{\mathrm{N}}c_{\mathrm{OH}}\right] \approx 0 \qquad , \tag{2.68}$$

und deshalb kann die NO-Bildungsgeschwindigkeit (der chemische Quelltem der Tranportgleichung für NO) vereinfacht berechnet werden zu

$$s_{m,\mathrm{NO}} = \left(\frac{\partial \rho_{\mathrm{NO}}}{\partial t}\right)_{\mathrm{chem}} = M_{\mathrm{NO}} \cdot 2k_1\left(T\right)c_{\mathrm{O}}c_{\mathrm{N_2}} \qquad . \tag{2.69}$$

Gemäß dem Prinzip der mikrochemischen Reversibilität existiert zu jeder Elementarreaktion eine Rückreaktion, deren Geschwindigkeitskoeffizient aus dem Geschwindigkeitskoeffizient dieser Elementarreaktion und der Gleichgewichtskonstanten dieser Reaktion berechnet werden kann,

$$\frac{k_1\left(T,p\right)}{k_{-1}\left(T,p\right)} = K_{Gl}\left(T,p\right) = \exp\left[-\frac{\Delta_R G^0}{RT}\right] \qquad , \tag{2.70}$$

wobei $\Delta_R G^0$ die Änderung der freien Enthalpie bei dieser Reaktion darstellt.

Ein partielles Gleichgewicht stellt sich in der Regel dann ein, wenn die Reaktionsgeschwindigkeiten von Hin- und Rückreaktion einer oder mehrerer Elementarreaktionen so groß sind, daß Produktion und Verbrauch eines jeden an diesen Reaktionen beteiligten Stoffes gleich schnell ablaufen [2]. Ein für Verbrennungsprozesse sehr wichtiges Beispiel sind die Reaktionen:

$$\mathrm{H_2 + OH} \overset{k_1(t),k_2(t)}{\longleftrightarrow} \mathrm{H_2O + H} \tag{2.71}$$

$$\mathrm{H + O_2} \overset{k_3(t),k_4(t)}{\longleftrightarrow} \mathrm{OH + O} \tag{2.72}$$

$$\mathrm{H_2 + O} \overset{k_5(t),k_6(t)}{\longleftrightarrow} \mathrm{OH + H}\ , \tag{2.73}$$

mit den Geschwindigkeitskoeffizienten k_1 bis k_6 :

$$k_1\left(T\right) = 1,0 \cdot 10^8 \cdot T^{1,6} \exp\left(\frac{-E_{A,1}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{m^3}}{\mathrm{kmol \cdot s}}\right], \qquad E_{A,1} = 1,38 \cdot 10^7 \mathrm{J/kmol} \tag{2.74}$$

$$k_2\left(T\right) = 4,31 \cdot 10^9 \cdot T^{1,6} \exp\left(\frac{-E_{A,2}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{m^3}}{\mathrm{kmol \cdot s}}\right], \qquad E_{A,2} = 7,65 \cdot 10^7 \mathrm{J/kmol} \tag{2.75}$$

$$k_3\left(T\right) = 2,2 \cdot 10^{14} \cdot \exp\left(\frac{-E_{A,3}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{m^3}}{\mathrm{kmol \cdot s}}\right], \qquad E_{A,3} = 7,03 \cdot 10^7 \mathrm{J/kmol} \tag{2.76}$$

$$k_4\left(T\right) = 1,57 \cdot 10^{13} \cdot \exp\left(\frac{-E_{A,4}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{m^3}}{\mathrm{kmol \cdot s}}\right], \qquad E_{A,4} = 3,523 \cdot 10^7 \mathrm{J/kmol} \tag{2.77}$$

$$k_5\left(T\right) = 5,06 \cdot 10^7 \cdot T^{2,67} \exp\left(\frac{-E_{A,5}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{m^3}}{\mathrm{kmol \cdot s}}\right], \qquad E_{A,5} = 2,63 \cdot 10^7 \mathrm{J/kmol} \tag{2.78}$$

$$k_6\left(T\right) = 2,22{\cdot}10^7{\cdot}T^{2,67}\exp\left(\frac{-E_{A,6}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{m}^3}{\mathrm{kmol}\cdot\mathrm{s}}\right], \qquad E_{A,6} = 1,829{\cdot}10^7\mathrm{J/kmol}\,. \quad (2.79)$$

Das partielle Gleichgewicht dieses Systems von Elementarreaktionen stellt sich erst bei Temperaturen über 1600 K ein; diese Voraussetzung ist jedoch unter den Bedingungen, unter welchen das thermische NO im Brennraum entstehen kann, erfüllt. Damit läßt sich die Konzentration des atomaren Sauerstoffs berechnen, wenn die Konzentrationen der relativ stabilen Spezies O_2, H_2 und H_2O bekannt sind:

$$c_{\mathrm{O}} = \frac{K_1\left(T\right) K_3\left(T\right) \cdot c_{\mathrm{O_2}} \cdot c_{\mathrm{H_2}}}{K_3\left(T\right) K_3\left(T\right) \cdot c_{\mathrm{H_2O}}} \qquad . \quad (2.80)$$

In Kap. 4 („Schadstoffbildung“) wird das oben angeführte partielle Gleichgewicht (Gln. 1.71 - 1.73) und seine Bedeutung bei der Berechnung der NO-Bildung behandelt. Unter Ausnutzung der identifizierten Quasistationaritäten und der sich einstellenden partiellen Gleichgewichte ist (für einen meistens relativ engen Zustandsbereich) eine Reduktion eines vollständigen Reaktionsmechanismus auf relativ wenige Reaktionen möglich, so daß die Vorhersagefähigkeit des entstandenen reduzierten Mechanismus bzgl. Zündungs- und Verlöschungsvorgängen oder Schadstoffbildung nicht wesentlich beeinträchtigt ist und der dabei notwendige Rechenaufwand von leistungsfähigen Computern bewältigt werden kann. Beispiele solcher reduzierten Mechanismen für die Verbrennung von Methan in Luft (vorgemischte Verbrennung und Diffusionsflamme) sind in [11] gegeben.

Bei motorischen Verbrennungsprozessen ist die globale Reaktionsgeschwindigkeit in entscheidendem Maße von der Turbulenz der Zylinderinnenströmung geprägt. Da die charakteristischen Längen- und Zeitskalen der Chemie und der Turbulenz eine zentrale Rolle bei der Modellierung der chemischen Quellterme für die turbulenten Verbrennungsprozesse spielen, wird das im Rahmen dieser Arbeit angewendete Verbrennungsmodell mit den dazugehörenden chemischen Quelltermen in Kap. 3, nach dem Kapitel zur Turbulenz, behandelt.

Durch eine geeignete Modellierung der chemischen Quellterme in den Navier-Stokes-Gleichungen werden die letzten unbekannten Glieder der Navier-Stokes-Gleichungen als Funktionen der abhängigen Strömungsvariablen Geschwindigkeit $\vec{v}$, Druck p, Temperatur T bzw. spezifische Enthalpie h, und Massenbrüche der chemischen Spezies w_i ausgedrückt. Das System der Erhaltungsgleichungen kann in dieser geschlossenen deterministischen Form gelöst werden, wenn die Anfangs- und Randbedingungen des Problems genau bekannt sind. Das ist jedoch nur für laminare Strömungen mit ausreichender Genauigkeit möglich, weil im Falle turbulenter Strömungen, wie sie in motorischen Anwendungen auftreten, sehr kleine Änderungen in den Anfangs- und Randbedingungen zu völlig unterschiedlichen Ergebnissen führen. Die Navier-Stokes-Gleichungen sind in diesem Sinne nichtlineare deterministische Erhaltungsgleichungen, die bei großen Reynolds-Zahlen ein chaotisches Verhalten besitzen. Man spricht von einer hohen parametrischen Sensitivität der Navier-Stokes-Gleichungen, deren Ursache die hohe Nichtlinearität der physikalisch-chemischen Gesetze ist (z.B. die exponentielle Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten von der Temperatur). Für die Modellierung turbulenter Strömungen werden deshalb nicht die Erhaltungsgleichungen in der deterministischen Form verwendet (Ausnahme sind direkte numerische Simulationen und zum Teil Large-Eddy-Simulationen, auf die an dieser Stelle nicht näher eingegangen wird), sondern es werden Erhaltungsgleichungen in einer gemittelten Form angewendet: die Reynolds-Gleichungen. Diese werden im folgenden Kapitel behandelt.

Kapitel 3

Turbulenz

Die als Turbulenz bezeichnete Bewegung eines Fluids ist eine äußerst verbreitete Erscheinung. Sie tritt in den meisten geophysikalischen Strömungen (Strömungen in der Atmosphäre, in Flüssen, Gezeitenströmungen, usw.) und auch in den meisten technischen Strömungen (Strömungen in und um technische Apparaturen) auf.

Die Turbulenzbewegung bewirkt, daß der Reibungswiderstand beströmter Flächen wesentlich größer ist als bei einer laminaren Strömung, der Reibungswiderstand anderen Gesetzen folgt und die Durchmischung des Fluids und der Wärmeübergang bei einer turbulenten Strömung viel intensiver sind als bei einer laminaren Strömung [12].

Nach J. Rotta [12] besitzen turbulente Strömungen folgende kennzeichnende Eigenschaften:

1. Turbulente Strömungen verlaufen unregelmäßig. Es treten komplizierte Variationen der Geschwindigkeit und der restlichen Zustandsgrößen des Fluids auf, so daß eine Einzelmessung niemals zu einem reproduzierbaren Ergebnis führt, sondern ein Zufallsergebnis liefert. Turbulente Strömungen sind prinzipiell instationäre und räumlich dreidimensionale Strömungen. Ihre Modellierung muß ausgehend von der Wahrscheinlichkeitstheorie erfolgen.

2. Turbulente Strömungen sind Wirbelströmungen ($\mathrm{rot}\,(\vec{v}) \neq 0$). Nach dem Satz von Thompson (Erhaltungssatz für die Zirkulation) kann in reibungslosen, isentropen Strömungen keine Drehung entstehen [6]. Daraus folgt, daß die Zähigkeitskräfte im Fluid bei der Turbulenz eine wesentliche Rolle spielen. Turbulente Strömungen finden nur statt, wenn die Zähigkeit einen bestimmten Wert nicht überschreitet. Reynolds fand anhand von Wasserströmungsversuchen in Rohren heraus, daß eine laminare Strömung eines erzwungen strömenden Stoffes in eine turbulente Strömung umschlägt, wenn die nach ihm benannte Kenngröße, die „Reynolds-Zahl“

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot D}{\mu} \quad , \tag{3.1}$$

einen kritischen Wert $Re_{krit} = 2320$ überschreitet; anderenfalls verhindern die dämpfenden Reibungskräfte die Turbulenzbewegung. Unter besonders sorgfältigen Versuchsbedingungen (glatter Zustrom, glatte Oberflächen, kleine Strömungsquerschnitte) kann die kritische Reynolds-Zahl bis etwa 10000 ansteigen. Unter praktischen Bedingungen liegt die kritische Reynolds-Zahl etwa bei $Re_{krit} = 3000$. Eine turbulente Strömung wird jedoch erst dann wieder laminar, wenn die Reynolds-Zahl den Wert 2320 unterschreitet. Ist die Reynolds-Zahl

viel höher als der kritische Wert, wird die Turbulenzbewegung als ausgebildetete Turbulenz bezeichnet.

Aus dem irreversiblen Charakter der viskosen Kräfte folgt die Tatsache, daß turbulente Strömungen nichtkonservative Vorgänge sind; es wird dauernd mechanische Energie in Wärme umgewandelt, auch wenn die Zähigkeit beliebig klein ist [12].

3.1 Die Reynolds-Gleichungen

Aus den weiter oben angeführten Eigenschaften der turbulenten Strömungen ergibt sich die Notwendigkeit der Modellierung der Turbulenzbewegung als ein stochastischer Prozess. Anstelle der Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen, welche nur einzelne Realisationen der Strömung als Ergebnis liefern, ist es sinnvoller, Transportgleichungen für die statistischen Momente (Mittelwert, Varianz, usw.) der einzelnen Strömungsvariablen zu formulieren. Diese Transportgleichungen können aus den Navier-Stokes-Gleichungen abgeleitet werden, wenn man den Momentanwert einer Strömungsvariablen Φ in den Mittelwert und die Schwankung (Abweichung von dem Mittelwert) zerlegt

$$\Phi = \overline{\Phi} + \Phi' \qquad . \tag{3.2}$$

Durch Einsetzen dieses Ausdruckes in die Navier-Stokes-Gleichung und Verwendung der Eigenschaften des Mittelwerts erhält man ein System von Erhaltungsgleichungen, das zusätzlich zu den zu berechneneden Mittelwerten der Strömungsvariablen eine Reihe von Korrelationen der Fluktuationen der Dichte und der Strömungsvariablen (z. B. $\overline{\rho' u_i'}$, $\overline{\rho' u_i' u_j'}$, $\overline{\rho' h'}$) enthält. Im Falle inkompressibler oder quasi inkompressibler Fluide (z. B. Flüssigkeiten) sind diese Terme gleich Null oder vernachlässigbar. Verbrennungsprozesse sind jedoch gekennzeichnet durch das Auftreten von großen Dichteschwankungen. Somit müssen diese zusätzlichen Terme modelliert werden, um ein geschlossenes Differentialgleichungssystem zu erhalten .

Es erweist sich als sinnvoll, neben dem Ensemble-Mittelwert einer Strömungsvariablen einen weiteren Mittelwert, den Favre-Mittelwert (dichtegewichteten Mittelwert) einzuführen, der eine viel kompaktere Schreibweise der Erhaltungsgleichungen ermöglicht. Der Favre-Mittelwert einer Größe Φ wird definiert als

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho\Phi}}{\overline{\rho}} \qquad . \tag{3.3}$$

Die Variable Φ kann, analog zur Ensemble-Mittelung, in einen Favre-Mittelwert und eine Favre-Fluktuation zerlegt werden

$$\Phi\left(\vec{r},t\right) = \tilde{\Phi}\left(\vec{r},t\right) + \Phi''\left(\vec{r},t\right) \qquad . \tag{3.4}$$

Für die Favre-Fluktuation gilt

$$\overline{\rho\Phi''} = 0 \qquad . \tag{3.5}$$

Nach Favre wird dieses Mittelungsverfahren auf alle für Strömungsvariablen außer Dichte und Druck angewendet; die letzteren beiden werden Ensemble-gemittelt.

Zwischen Ensemble-Mittelwert und Favre-Mittelwert einer Größe besteht die Beziehung:

$$\tilde{\Phi} = \overline{\Phi} + \frac{\overline{\rho'\Phi'}}{\overline{\rho}} \qquad . \tag{3.6}$$

Durch Einsetzen der (Gl. 3.4) in die Transportgleichungen für die Momentanwerte der Erhaltungsgrößen (Navier-Stokes-Gleichungen) und Verwendung der Eigenschaften von Favre-Mittelwert und Favre-Schwankung erhält man das System der Favre-gemittelten Erhaltungsgleichungen:

1) Bilanz der Gesamtmasse

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial \left(\sqrt{g} \cdot \overline{\rho}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho} \cdot \tilde{u_j}\right)}{\partial x_j} = \overline{s_m} \qquad , \tag{3.7}$$

2) Bilanz des Impulses

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \overline{\rho} \cdot \tilde{u_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho} \cdot \tilde{u_i} \cdot \tilde{u_j} - \overline{\tau'_{ij}} + \overline{\rho} \cdot \widetilde{u''_i u''_j})}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} = \overline{s_i} \qquad , \; i = 1, 2, 3 \; , \tag{3.8}$$

3) Energiebilanz

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \overline{\rho} \cdot \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho} \cdot \tilde{u_j} \cdot \tilde{h} - \overline{F_{h,j}} + \overline{\rho} \cdot \widetilde{u''_j h''})}{\partial x_j} = \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \overline{p})}{\partial t} + \tilde{u_j} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + \overline{\tau'_{ij}} \cdot \frac{\partial \tilde{u_i}}{\partial x_j} + \Phi_t + \overline{s_h} \qquad , \end{aligned} \tag{3.9}$$

4) Bilanz der Teilchenmassen (für jede der chemischen Spezies $i = \overline{1, N_S}$)

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \overline{\rho} \cdot \tilde{w_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho} \cdot \tilde{u_j} \cdot \tilde{w_i} - \overline{F_{m_i,j}} + \overline{\rho} \cdot \widetilde{u''_j w''_i})}{\partial x_j} = \overline{s_{m,i}} \qquad . \tag{3.10}$$

Die Mittelwerte der Komponenten des Tensors der Newtonschen Schubspannung, der Komponenten des molekularen Wärmestromdichte und bzw. molekularen Massenstromdichte sind

$$\overline{\tau'_{ij}} = \overline{\mu \cdot (2 \cdot D_{ij} - \frac{2}{3} \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \cdot \delta_{ij}) + \kappa \cdot \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \cdot \delta_{ij}} \cong \overline{\nu} \cdot \overline{\rho} \cdot \left(\frac{\partial \tilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \cdot \frac{\partial \tilde{u_l}}{\partial x_l} \cdot \delta_{ij} \right) \; , \tag{3.11}$$

$$\overline{F}_{h,j} = \overline{-\lambda_h \frac{\partial T}{\partial x_j} + \sum_{n=1}^{N_S} H_n^0 \cdot \rho D_{n,M} \frac{\partial w_n}{\partial x_j} + ...} \cong -\overline{\lambda_h} \cdot \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \overline{\rho} \sum_n H_n^0 \overline{D}_{n,M} \cdot \frac{\partial \tilde{w}_n}{\partial x_j} \; , \tag{3.12}$$

$$\overline{F}_{m_i,j} = \overline{\frac{\rho M_i}{\overline{M}^2} \sum_{k \neq i} D_{ik} M_k \frac{\partial c_k}{\partial x_j} + ...} \cong -\overline{\rho} \cdot \overline{D}_{i,M} \cdot \frac{\partial \tilde{w}_i}{\partial x_j} \qquad . \tag{3.13}$$

Die Transportgleichungen für die drei Komponenten des gemittelten Impulses enthalten zusätzlich zu dem gemittelten Wert der Komponenten des Newtonschen Spannungstensors jeweils einen neuen Term, der die Favre-Korrelation der Fluktuation zweier Komponenten des Geschwindigkeitsvektors darstellt:

$$\tau_{ij}^R = -\overline{\rho} \cdot \widetilde{u''_i u''_j} \qquad . \tag{3.14}$$

Diese Zusatzterme können als die Komponenten eines Tensors der virtuellen Spannungen aufgefaßt werden, die die Folge des durch die Turbulenzbewegung bewirkten Impulstransportes

sind. Sie werden Reynolds-Spannungen genannt [12]. Der Tensor der Reynolds-Spannungen wird auch Ein-Punkt-Korrelationstensor genannt, weil er jeweils in nur einem Punkt des Raumes definiert ist und zunächst einmal keine offensichtliche Beziehung zu den benachbarten Punkten im Strömungsfeld existiert [16]. Es wird somit deutlich, daß durch den Mittelungsprozeß die Impulsgleichung keine geschlossene Gleichung mehr ist. Die Gleichungen für diese unbekannten Korrelationen enthalten ihrerseits Korrelationen der nächsthöheren Ordnung, also neue unbekannte Terme. Diese Tatsache ist als das Schließungsproblem der statistischen Turbulenztheorie bekannt.

Die Transportgleichung für den Mittelwert der Enthalpie enthält die Korrelationsterme

$$F_{h,j}^{R} = -\overline{\rho} \cdot \widetilde{u_j'' h''} \qquad , \tag{3.15}$$

die die Komponenten eines turbulenten Wärmeflusses sind, der den Beitrag der Turbulenzbewegung zur Wärmeübertragung darstellt. In Strömungen hoher Reynolds-Zahlen übersteigt er den Beitrag der molekularen Wärmeübertragungsmechanismen (Wärmeleitung, Dufour-Effekt, molekulare Diffusionsflüsse) um Größenordnungen. Der Term Φ_t in der Energiegleichung, die Korrelation des Tensors der viskosen Spannungen mit dem Geschwindigkeitsgradienten,

$$\Phi_t = \overline{\tau_{ij}' \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} \cong \overline{\rho \cdot \nu \cdot \left(\frac{\partial u_i'}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j'}{\partial x_i} \right) \cdot \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}} \cong \overline{\rho} \cdot \overline{\nu} \cdot \left[\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \widetilde{\frac{\partial u_j''}{\partial x_i}} \right) \cdot \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \right] = \overline{\rho} \cdot \tilde{\epsilon} \tag{3.16}$$

bezeichnet die Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie je Volumeneinheit, welche durch die Schwankungen der Geschwindigkeitsgradienten verursacht wird. Die turbulente Dissipation ist die Leistung schwankender Reibungsspannungen deren Mittelwert gleich Null ist. Sie übersteigt in Strömungen hoher Reynolds-Zahlen die direkte Dissipation je Volumeneinheit (Dissipation an mechanischer Energie bewirkt durch Gradienten der mittleren Strömungsgeschwindigkeit)

$$E = \overline{\rho} \cdot \overline{\tau_{ij}} \cdot \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \tag{3.17}$$

um mehrere Größenordnungen (mit Ausnahme der Zonen in der unmittelbaren Nähe fester Wände). Obwohl die Geschwindigkeitsschwankungen gewöhnlich klein sind gegen die mittleren Geschwindigkeiten, gilt für die Geschwindigkeitsgradienten das Umgekehrte. Die Mittelwerte der Geschwindigkeitsgradienten sind im Vergleich zu den Fluktuationen der Geschwindigkeitsgradienten sehr klein und meistens vernachlässigbar [12]. Die Dissipation der kinetischen Energie spielt in der Bilanz der mechanischen Energie eine wichtige Rolle, doch die Eigenerwärmung des Fluids aufgrund dieser Energieumwandlung ist in der Regel vernachlässigbar klein. Die turbulente Dissipation je Masseneinheit

$$\tilde{\epsilon} = \overline{\nu} \cdot \left[\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j} + \widetilde{\frac{\partial u_j''}{\partial x_i}} \right) \cdot \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \right] \tag{3.18}$$

ist in vielen Turbulenzmodellen eine fundamentale Größe.

Die Transportgleichung für die gemittelten Teilchenmassen enthält ihrerseits drei zusätzliche Glieder, die Komponenten eines turbulenten Massenflusses („Reynolds-Flusses“) der Spezies i:

$$\overrightarrow{F_{m_i}^{R}} = -\overline{\rho} \cdot \widetilde{\overrightarrow{u''} w_i''} \qquad . \tag{3.19}$$

Der Beitrag der turbulenten Schwankungen zu der Massenstromdichte („turbulente Diffusion“) übersteigt in turbulenten Strömungen hoher Reynolds-Zahlen den Beitrag der molekularen Diffusion um Größenordnungen. Dies erklärt die intensive Durchmischung, die turbulente Strömungen kennzeichnet [12].

Die Formulierung der gemittelten Erhaltungsgleichungen, so wie sie im Programmpaket Star-CD verwendet werden, ist gemäß dem Star-CD Handbuch [7] folgende:

1) Bilanz der Gesamtmasse

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial \left(\sqrt{g} \cdot \overline{\rho}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho} \cdot \overline{u_j}\right)}{\partial x_j} = \overline{s_m} \qquad , \tag{3.20}$$

2) Impulsbilanz

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \overline{\rho} \cdot \overline{u_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho} \cdot \overline{u_i} \cdot \overline{u_j} - \overline{\tau'_{ij}} + \overline{\rho} \cdot \overline{u'_i u'_j})}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} = \overline{s_i} \qquad , \; i = 1, 2, 3 \; , \tag{3.21}$$

3) Energiebilanz

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \overline{\rho} \cdot \overline{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho} \cdot \overline{u_j} \cdot \overline{h} - \overline{F_{h,j}} + \overline{\rho} \cdot \overline{u'_j h'})}{\partial x_j} = \\ &\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \overline{p})}{\partial t} + \overline{u_j} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + \overline{\tau'_{ij}} \cdot \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} + \Phi_t + \overline{s_h} \qquad , \end{aligned} \tag{3.22}$$

4) Bilanz der Teilchenmassen (für jede der chemischen Spezies $i = 1, N_S$)

$$\frac{1}{\sqrt{g}} \cdot \frac{\partial(\sqrt{g} \cdot \overline{\rho} \cdot \overline{w_i})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho} \cdot \overline{u_j} \cdot \overline{w_i} - \overline{F_{m_i,j}} + \overline{\rho} \cdot \overline{u'_j w'_i})}{\partial x_j} = \overline{s_{m,i}} \qquad . \tag{3.23}$$

Ein Vergleich beider Differentialgleichungssysteme (der Favre-gemittelten Erhaltungsgleichungen, Gln. 2.7 - 2.10, und der Ensemble-gemittelten Erhaltungsgleichungen in der in Star-CD verwendeten Formulierung, Gln. 2.20 - 2.23) zeigt, daß die beiden Gleichungssysteme formal (Glied für Glied) identisch sind. Die exakten Ensemble-gemittelten Erhaltungsgleichungen enthalten jedoch zusätzliche Glieder (z.B. $\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho' u'_i}\right)$, $\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho' u'_j}\right)$, $\frac{\partial}{\partial t}\left(\overline{\rho' h'}\right)$), die in der Formulierung der Erhaltungsgleichungen in Star-CD nicht vorhanden sind. Bei gegebenen Anfangs- und Randwertbedingungen ist die Lösung des in Star-CD implementierten Gleichungsystems gleichzeitig die Lösung des Gleichungssystems der exakten Favre-gemittelten Transportgleichungen, und die berechneten Größen können somit als Favre-gemittelte Strömungsgrößen angesehen werden. Deshalb wird im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit einfachheitshalber nur noch eine Art von Mittelung verwendet: die Favre-Mittelung. Gleichzeitig soll aber auch auf die damit verbundenen Interpretationsprobleme der berechneten Ergebnisse beim Vergleich mit experimentellen Daten hingewiesen werden. Dabei ist nicht immer eindeutig, ob bei einem bestimmten Meßverfahren Ensemble- oder dichtegemittelte Meßwerte erzielt werden. So sind z.B. die dichtegemittelten Geschwindigkeitskomponenten $\tilde{u}_i$ mit den Meßergebnissen von Hitzdrahtanemometern zu vergleichen, aber die Ergebnisse von LDA-Messungen (i.e. Laser-Doppler-Anemometrie) sind wegen des

Messungsprinzips eher Ensemble-gemittelte Geschwindigkeitskomponenten. Ähnliche Überlegungen müssen für die verfahrensabhängige Interpretation für Messergebnisse von Konzentrationsverteilungen oder von Wärmeflüssen gemacht werden [15].

Analog zu den Erhaltungsgleichungen kann man auch mit der Zustandsgleichung des Fluids verfahren. Man erhält durch die Mittelung

$$\overline{p} = \overline{\rho} \cdot R \cdot \sum_{i=1}^{N_S} \frac{1}{M_i} \left(\tilde{T} \cdot \tilde{w}_i + \widetilde{T'' w_i''} \right) \cong \frac{\overline{\rho} \cdot R \cdot \tilde{T}}{\overline{M}} \quad . \tag{3.24}$$

Diese Näherung ist bei Verbrennungsprozessen nur dann zulässig, wenn die molaren Massen der Spezies annähernd gleich sind (z.B. im Falle der Verbrennung von Methan oder Propan in Luft) und somit die Fluktuation der mittleren molaren Masse des Gasgemisches vernachlässigt werden kann.

3.2 Turbulenz-Modelle

Das System der Favre-gemittelten Transportgleichungen enthält Korrelationsterme, die bisher nicht als Funktionen der Mittelwerte der Strömungsvariablen ausgedrückt werden konnten. Prinzipiell ist es möglich, die Erhaltungsgleichungen in der deterministischen Form zu lösen, wobei die Lösungen vieler solcher „numerischer Experimente“, die sich nur durch kleine Änderungen der Rand- und/oder Anfangsbedingungen unterscheiden, gemittelt werden. Auf diese Weise können die Gesetzmäßigkeiten der Turbulenzbewegung erkannt werden, ohne daß irgendeine Form von Modellierung oder empirischen Beobachtungen in die Rechnung einfließt. Dafür ist es erforderlich, das gesamte Spektrum der Wirbel der Turbulenzbewegung numerisch aufzulösen. Diese Vorgehensweise trägt den Namen „Direkte numerische Simulation“ (DNS).

Die Ressourcen an Rechenzeit und Hauptspeicherbedarf der heutigen Höchstleistungsrechner für jede dieser „numerischen Experimente“ werden aufgrund der großen Unterschiede in den Ausmaßen der größten und der kleinsten Wirbel, die alle numerisch aufgelöst werden müssen, schon für die einfachsten technischen Strömungen sehr schnell aufgebraucht. Deshalb werden direkte numerische Simulationen hauptsächlich zur Untersuchung von Phänomenen in kleineren, schwer zugänglichen Teilbereichen der Strömung angewendet (z.B. Verlöschung turbulenter Flammen in der Nähe einer festen Wand). Die erkannten Gesetzmäßigkeiten können dann in Form von Hypothesen auf komplexere Strömungsfelder extrapoliert werden und eventuell in Turbulenzmodelle einfließen.

Eine zweite Vorgehensweise ist die „Large-Eddy-Simulation“ (LES), wobei das Turbulenzspektrum durch einen Filter in zwei Bereiche eingeteilt wird: die großen, anisotropen Wirbelstrukturen werden analog zur DNS numerisch aufgelöst und direkt simuliert, während die kleinen, isotropen Wirbelstrukturen mit Hilfe eines Turbulenzmodells berechnet werden. Die Unterteilung in große und kleine Wirbelstrukturen wird durch den Vergleich des Wirbeldurchmessers mit der Maschenweite des verwendeten Rechennetzes durchgeführt. Diese Vorgehensweise konnte sich bis heute für motorische Anwendungen noch nicht durchsetzen, weil einerseits Modellierungschwierigkeiten noch nicht ausgeräumt sind (z.B. der kontinuierliche Übergang zwischen den beiden Längenskalenbereichen oder der Wandeinfluß auf die groben Wirbelstrukturen) und weil andereseits der notwendige Aufwand zur Berechnung,

Speicherung und anschließenden Mittelung der Ergebnisse der einzelnen LES-Rechnungen bis heute ein großes Hindernis darstellt.

Die Vorgehensweise, die sich bei der 3D-Simulation industrieller Anwendungen durchgesetzt hat, ist die Einbindung eines Turbulenzmodells, wobei zur Berechnung der Korrelationsterme und somit zur Schließung des Differentialgleichungssystems zusätzliche Annahmen gemacht werden müssen.

Die ersten erfolgreichen Ansätze zur Modellierung der Korrelationsterme beruhen auf der Analogie zwischen zähen Spannungen und Reynolds-Spannungen. Boussinesq nahm eine lineare Beziehung zwischen den Reynolds-Spannungen und den Komponenten des gemittelten Geschwindigkeitsgradienten, und so entstand in Anagolie zum Newtonschen Schubspannungsgesetz folgende Gleichung :

$$\tau_{ij}^R = -\overline{\rho} \cdot \widetilde{u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l} \cdot \delta_{ij} \right) - \frac{2}{3} \overline{\rho} \cdot \tilde{k} \cdot \delta_{ij} \qquad . \tag{3.25}$$

Darin werden ein „turbulenter Zähigkeitskoeffizient“ (oder „Wirbelviskosität“) μ_t und die „turbulente kinetische Energie“

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \cdot \widetilde{u_i'' u_i''} \tag{3.26}$$

eingeführt. Das letzte Glied in der Beziehung für die Reynoldsspannung spielt dieselbe Rolle wie der Druck in der kinetische Gastheorie, und zwar als Mittelwert der (turbulenten) Normalspannungen. Die Analogie der turbulenten Flüsse zu den molekularen Stromdichten ergibt für die Komponente j des turbulenten Diffusionsflußes der Teilchenart i,

$$F_{m_i,j} = -\overline{\rho} \cdot \widetilde{u_j'' w_i''} = -\frac{\mu_t}{Sch_t} \frac{\partial \tilde{w}_i}{\partial x_j} \qquad , \tag{3.27}$$

und für die Komponente j des turbulenten Wärmeflußes,

$$F_{h,j} = -\overline{\rho} \cdot \widetilde{u_j'' h''} = -\frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_j} \qquad , \tag{3.28}$$

wobei Sch_t die „turbulente Schmidt-Zahl“ und Pr_t die „turbulente Prandtl-Zahl“ darstellen (in Analogie zu den in Kap. 1 definierten molekularen Ähnlichkeitszahlen). Sowohl für die turbulente Schmidt-Zahl als auch für die turbulente Prandtl-Zahl wurde, wenn nicht ausdrücklich anders angegeben, der Voreinstellungswert 0,9 angenommen.

Die Ansätze zur Modellierung der beiden neuen Turbulenzgrößen (μ_t und $\tilde{k}$) lassen sich im allgemeinen in zwei große Klassen einteilen:

1.) algebraische Turbulenzmodelle,

2.) Turbulenzmodelle basierend auf Transportgleichungen für Turbulenzgrößen.

Die beiden Klassen von Turbulenz-Modellen werden in den folgenden Abschnitten kurz beschrieben.

3.2.1 Algebraische Turbulenzmodelle

Die algebraischen Turbulenzmodelle gehen in der Regel von einem lokalen Gleichgewicht zwischen Produktion und Dissipation der turbulenten kinetischen Energie (TKE) aus und sind bestrebt, auf dieser Grundlage die Wirbelviskosität als Funktion von Mittelwerten der Strömungsvariablen und/oder anderer Parameter wie z.B. Wandabstand auszudrücken [15]. So ist z. B. in Prandtls Mischungslängenmodell die Wirbelviskosität μ_t in der wandnahen Grenzschichtströmung gegeben durch

$$\mu_t = \overline{\rho} \cdot l_m^2 \cdot \left[\frac{\partial u_i}{\partial x_j} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad , \tag{3.29}$$

wobei der Mischungsweg l_m noch zu bestimmen ist. Für Wandscherströmungen hat von Karman die Beziehung

$$\mu_t = \overline{\rho} \cdot \kappa_K^2 \cdot \frac{\left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial y} \right)^3}{\frac{\partial^2 \overline{u}}{\partial y^2}} \quad , \tag{3.30}$$

vorgeschlagen, worin $\kappa_K \cong 0,41$ die von Karman-Konstante ist. Nachteil dieser Formulierung ist, daß sie in den Wendepunkten des Profils von $\overline{u}$ singulär wird [2, 15].

Die algebraischen Turbulenzmodelle sind besonders erfolgreich bei der Berechnung dünner Scherströmungen, in welchen sich Produktion und Dissipation der TKE näherungsweise in lokalem Gleichgewicht befinden. Der Versuch, die charakteristischen Größen der Turbulenz (Fluktuationen) ausschließlich aus den Mittelwerten der Strömungsvariablen und einigen Parameter (z.B. Modellkonstanten oder geometrische Größen) zu berechnen, erscheint jedoch als unrealistisch, zumindest für den Fall komplexer Strömungen, wie sie in motorischen Anwendungen auftreten [15].

3.2.2 Turbulenzmodelle basierend auf Transportgleichungen für Turbulenzgrößen; das k-ϵ-Modell

Die andere Klasse der Turbulenz-Modelle beruht auf der Lösung von Transportgleichungen für eine oder mehrere charakteristische Größen der Turbulenz. Dabei stehen die Anforderungen an die Genauigkeit und einen möglichst weitreichenden Gültigkeitsbereich des Turbulezmodells im Widerspruch mit dem Wunsch des Anwenders nach einfachen, robusten und wenig Rechenzeit-intensiven Turbulenzmodellen. Für komplexe Strömungen erweist es sich als notwendig, einen vertretbaren Kompromiß zwischen der Komplexität des Turbulenzmodells (d.h. Anzahl der zu lösenden Transportgleichungen und die Anzahl der empirischen Konstanten, die das Modell ergänzen) und dem damit verbundenen Aufwand an Resourcen (Rechenzeit- und Hauptspeicherbedarf) zu finden, so daß die Wirtschaftlichkeit des Einsatzes der 3D-Simulation gewährleistet wird. Die wichtigsten und heute am weitesten verbreiteten Turbulenzmodelle sind die Zwei-Gleichungs-Modelle und die Reynolds-Spannungsmodelle.

Reynolds-Spannungsmodelle

Prinzipiell kann für jeden der sechs unabhängigen Korrelationsterme $\widetilde{u_i'' u_j''}$ eine Transportgleichung gelöst werden:

$$\frac{1}{\sqrt{g}}\frac{\partial(\sqrt{g}\cdot\overline{\rho}\cdot\widetilde{u_i''u_j''})}{\partial t}+\frac{\partial\left[\overline{\rho}\cdot\widetilde{u_i''u_j''}\cdot\tilde{u}_k\ +\overline{\rho}\cdot\widetilde{u_i''u_j''}u_k''+\delta_{ik}\overline{u_j''p'}+\delta_{jk}\overline{u_i''p'}-\overline{\mu}(\ \overline{\tau_{ik}'u_j''}+\overline{\tau_{jk}'u_i''})\right]}{\partial x_k}=$$

$$-\overline{\rho}\left[\widetilde{u_i''u_k''}\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_k}+\widetilde{u_j''u_k''}\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}\right]+\overline{p'\left(\frac{\partial u_i''}{\partial x_j}+\frac{\partial u_j''}{\partial x_i}\right)}-\overline{\mu}\left[\overline{\tau_{ik}'\frac{\partial u_j''}{\partial x_k}}+\overline{\tau_{jk}'\frac{\partial u_i''}{\partial x_k}}\right]-\overline{u_i''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_j}-\overline{u_j''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}\ . \quad (3.31)$$

Darin muß der zusätzliche Term höherer Ordnung, die Tripelkorrelation $\widetilde{u_i''u_j''u_k''}$ modelliert werden. Nach Hanjalic und Launder ist der Term folgendermaßen zu berechnen [15]:

$$\overline{\rho}\cdot\widetilde{u_i''u_j''u_k''}=C_s\cdot\overline{\rho}\cdot\frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}}\cdot\left(\widetilde{u_i''u_n''}\frac{\partial\widetilde{u_j''u_k''}}{\partial x_n}+\widetilde{u_j''u_n''}\frac{\partial\widetilde{u_i''u_k''}}{\partial x_n}+\widetilde{u_k''u_n''}\frac{\partial\widetilde{u_i''u_j''}}{\partial x_n}\right)\quad . \quad (3.32)$$

Die sechs unabhängigen Gleichungen aus (Gl. 3.31) zusammen mit einer Transportgleichung für $\tilde{\epsilon}$, der Dissipationsgeschwindigkeit der TKE, bilden das System der sieben zu lösenden Differentialgleichungen eines Reynolds-Spannungs-Modells.

Dieser Lösungsansatz setzt sich aufgrund seiner relativ zu allen anderen Turbulenzmodellen sehr viel genaueren Ergebnisse in immer größerem Maße durch, und trotz des viel höheren Rechenzeitaufwands scheint er sich als das Standard-Turbulenz-Modell des nächsten Jahrzehnts zu entwickeln.

Zweigleichungsmodelle; das k-ϵ-Modell

Für die Beschreibung der Turbulenzbewegung reichen meistens die Informationen, die in der turbulenten kinetischen Energie (der Spur des Tensors der Reynoldsspannungen $\tilde{k}=\frac{1}{2}\widetilde{u_i''u_i''}$) und einer zweiten Turbulenzgröße (z.B. der Dissipationsgeschwindigkeit der TKE oder dem integralen Längenmaß) enthalten sind. Durch Kontraktion der Indizes i und j in (Gl. 3.31) erhält man die Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie:

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{k})}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\overline{\rho}\tilde{u}_j\tilde{k}+\overline{\rho}\widetilde{u_j''k}+\overline{u_j''p'}-\overline{u_i''\tau_{ij}'}\right)\ =$$

$$-\overline{\rho}\cdot\widetilde{u_i''u_j''}\cdot\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}+\overline{p'\frac{\partial u_i''}{\partial x_i}}-\overline{u_i''}\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_i}-\overline{\tau_{ij}'\frac{\partial u_i''}{\partial x_j}}\quad . \quad (3.33)$$

Gemäß dem Modellierungsansatz von Boussinesq (Gl. 3.25) gilt

$$-\overline{\rho}\cdot\widetilde{u_i''u_j''}\cdot\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_l}=\left[\mu_t\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}-\frac{2}{3}\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_l}\cdot\delta_{ij}\right)-\frac{2}{3}\overline{\rho}\cdot k\cdot\delta_{ij}\right]\cdot\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_l}\quad , \quad (3.34)$$

und analog zu dem turbulenten Diffusionsfluß (Gl. 3.27) kann für die Korrelation der Geschwindigkeitskomponenten mit der TKE der Gradientenansatz angewendet werden,

$$\overline{\rho}\cdot\widetilde{u_j''k}=-\frac{\mu_t}{\mathrm{Pr}_k}\cdot\frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j}\quad . \quad (3.35)$$

Das letzte Glied auf der rechten Seite (Gl. 3.33) ist die Dissipationsgeschwindigkeit der TKE je Volumeneinheit, die durch die Schwankungen der Geschwindigkeitsgradienten verursacht wird:

$$\overline{\tau'_{ij}\frac{\partial u'_i}{\partial x_j}} \cong \overline{\mu}\cdot\left[\left(\frac{\partial u''_i}{\partial x_j}+\widetilde{\frac{\partial u''_j}{\partial x_i}}\right)\cdot\frac{\partial u''_i}{\partial x_j}\right] = \overline{\rho}\cdot\tilde{\epsilon} \qquad . \tag{3.36}$$

In inkompressiblen Strömungen sind das zweite und dritte Glied auf der rechten Seite von (Gl. 3.33) gleich Null. Sie werden in der Regel auch in kompressiblen Strömungen vernachlässigt [14, 15]. Es folgt die etwas vereinfachte Form der Transportgleichung für die TKE:

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{k})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho\cdot\tilde{u}_j\cdot\tilde{k})}{\partial x_j}-\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\overline{\mu}+\frac{\mu_t}{\mathrm{Pr}_k}\right)\frac{\partial\tilde{k}}{\partial x_j}\right]=$$

$$\left\{\mu_t\left[\left(\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}+\frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i}\right)-\frac{2}{3}\frac{\partial\tilde{u}_l}{\partial x_l}\right]-\overline{\rho}\tilde{k}\right\}\frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j}-\overline{\rho}\tilde{\epsilon} \qquad . \tag{3.37}$$

Um diese Transportgleichung zu lösen, ist eine Beziehung zwischen der mittleren Dissipationsgeschwindigkeit der TKE $\tilde{\epsilon}$ und anderen (primitiven) Turbulenzgrößen und/oder Strömungsvariablen notwendig. Diese alternativen Turbulenzgrößen werden im folgenden Abschnitt eingeführt, zusammen mit einigen Überlegungen, die zu den in dieser Arbeit verwendeten Beziehungen zwischen Turbulenzgrößen führen.

Der Prozeß der Dissipation der kinetischen Energie der Strömung und deren Umwandlung in Wärme wird folgendermaßen erklärt: An Orten mit hohen Geschwindigkeitsgradienten (der Hauptströmung) entstehen durch die viskosen Kräfte die größten Wirbel des Turbulenzspektrums. Deren Größe und Richtung der Drehachse ist stark von der Geometrie der Strömung den Randbedingungen und den sich abspieleden physikalisch-chemischen Vorgängen abhängig. Die großen Wirbel treten sowohl mit der Hauptströmung als auch untereinander in Wechselwirkung und zerfallen in immer kleinere und gleichzeitig schneller rotierende Wirbel. Die Bewegungsenergie, die sie der Strömung entnehmen, „leiten“ diese größten Wirbel durch ihren Zerfall an die entstandenen kleineren Wirbel weiter (Konzept der Energiekaskade), bis diese Energie schließlich in den kleinsten Wirbeln des Turbulenzspektrums durch viskose Kräfte auf molekularer Ebene (wie bei einer laminaren Strömung) in eine Energie der ungeordneten Bewegung der Moleküle (Wärme) umgewandelt wird [16]. Somit ist die turbulente kinetische Energie der Strömung in einem Punkt $\vec{r}$ zu dem Zeitpunkt t verteilt über ein kontinuierliches Spektrum von Wirbeln mit dem Durchmesser l :

$$k(\vec{r},t)=\frac{1}{2}\sum_i\left\langle u_i^2\right\rangle=\int_0^\infty e\left(\frac{\pi}{l};\vec{r},t\right)d\left(\frac{\pi}{l}\right) \qquad . \tag{3.38}$$

Das Konzept einer Turbulenzbewegung des Fluids in Form einer Vielzahl von Wirbeln veranschaulicht den Zusammenhang, der zwischen der turbulenten Schwankungsbewegung in einem Punkt $\vec{r}$ des Strömungsfeldes und der Korrelation zwischen den gleichzeitig gemessen Momentanwerten der Komponenten der Geschwindigkeitsschwankung in zwei verschiedenen Punkten des Strömungsfeldes $u'_i(\vec{r})$ und $u'_j\left(\vec{r}+\vec{\delta}\right)$ besteht. Diese sogenannte Zwei-Punkt-Korrelation oder Raumkorrelation wird definiert als

$$R_{ij}(\vec{r},\vec{\delta},t)=\overline{u'_i(\vec{r},t)\cdot u'_j(\vec{r}+\vec{\delta},t)} \qquad . \tag{3.39}$$

$R_{ij}(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{\delta}, t)$ sind die Komponenten des Zwei-Punkt-Korrelationstensors. Der Vektor $\overrightarrow{\delta}$ wird als Korrelationsraumvektor bezeichnet. Für $\overrightarrow{\delta} \to 0$ geht der Zwei-Punkt-Korrelationstensor in den Reynolds'schen Spannungstensor über. Ist der Zwei-Punkt-Korrelationstensor für ein Strömungsfeld bekannt, so läßt sich daraus die vollständige Längenmaßinformation der turbulenten Strömung entnehmen [16]. Im Falle der isotropen Turbulenz, wenn

$$\overline{u_i'(\overrightarrow{r}) \cdot u_j'(\overrightarrow{r})} = \frac{1}{3} \cdot \overline{u_k' u_k'} \cdot \delta_{ij} = \overline{u'^2} = \frac{2}{3} \cdot \overline{k} \qquad , \tag{3.40}$$

entartet der Korrelationstensor zu einer Funktion des skalaren Korrelationsabstandes δ, der Korrelationsfunktion:

$$\frac{1}{3} \cdot \overline{u_k'(\overrightarrow{r}, t) \cdot u_k'(\overrightarrow{r} + \overrightarrow{\delta}, t)} = \overline{u'^2} \cdot f(\delta) \qquad . \tag{3.41}$$

Zwei charakteristische Längenmaße des Turbulenzspektrums sind das „integrale Längenmaß“ und das „Taylor-Längenmaß“, deren Definition auf den Zwei-Punkt-Korrelationstensor zurückgeht. Nach Batchelor [16] wird der Längenmaßtensor definiert als

$$L_{int,ij} = \frac{1}{4\pi} \cdot \int_V \frac{R_{ij}(\overrightarrow{r}, \overrightarrow{\delta})}{\delta^2} dV(\overrightarrow{\delta}) \qquad . \tag{3.42}$$

Im Grenzfall isotroper Turbulenz entartet der Längenmaßtensor zu einer skalaren Größe, der in der klassischen Turbulenztheorie eine grundlegende Bedeutung zukommt und zwar das integrale Längenmaß

$$l_{int} = \int_0^\infty f(\delta) = \frac{3}{4\overline{k}} L_{int,ii} \qquad . \tag{3.43}$$

Nach Rotta [12] läßt sich das integrale Längenmaß stark vereinfacht deuten als Abmessung momentan einheitlich bewegter Fluidmassen oder als Abmessung der Durchmesser der größten und energiereichsten Wirbel des Turbulenzspektrums. Etwas kleiner als das integrale Längenmaß ist das Taylor'sche Längenmaß oder Mikromaß. Auch das Taylor'sche Längenmaß wird mit Hilfe der Korrelationsfunktion definiert:

$$\lambda_T = \left(-\frac{\partial^2 f(\delta)}{\partial \delta^2} \right)^{-\frac{1}{2}} \qquad . \tag{3.44}$$

Für den kurzwelligen Bereich des Turbulenzspektrums bei sehr hohen Reynolds-Zahlen, in welchem die Umwandlung der TKE in Wärme stattfindet, postuliert Kolmogorov in seinen Artikeln von 1940-1941 [17–19] die lokale Homogenität und lokale Isotropie der Turbulenzstrukturen (d.h. die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung für das Auftreten eines Momentanwertes der Geschwindigkeit $\vec{u}(\vec{r}, t)$ bei einem Mittelwert $\overline{\vec{u}(\vec{r}, t)}$ ist unabhängig vom Ort $\vec{r}$(lokal homogen) und unabhängig von der Richtung der Abweichung der Geschwindigkeit vom lokalen Mittelwert $\vec{u'} = \vec{u}(\vec{r}, t) - \overline{\vec{u}(\vec{r}, t)}$ (lokal isotrop)). Diese Hypothesen wurden in zahlreichen Experimenten bestätigt [2, 16]. Weiterhin führte Kolmogorov ein charakteristisches Längenmaß und ein charakteristisches Zeitmaß der Turbulenz ein, die beide heute seinen Namen tragen. Das „Kolmogorov-Längenmaß“ l_K ist definiert durch

$$l_K = \left(\frac{\nu^3}{\overline{\epsilon}} \right)^{\frac{1}{4}} \tag{3.45}$$

und das Kolmogorov-Zeitmaß durch

$$t_K = \left(\frac{\nu}{\overline{\epsilon}}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad . \tag{3.46}$$

Kolmogorov stellte folgende Similaritätshypothese auf [17,18]: Für lokal isotrope Turbulenz ist die Korrelationsfunktion durch die molekulare kinematische Zähigkeit ν und den Mittelwert der Dissipationsgeschwindigkeit der TKE $\overline{\epsilon}$ eindeutig bestimmt. Für Abstände im Korrelationsraum, die viel größer sind als das Kolmogorovlängenmaß ($\delta > l_K$), ist die Korrelationsfunktion nur von $\overline{\epsilon}$ und nicht auch von ν abhängig. Daraus leitet Kolmogorov für die Korrelationsfunktion $f(\delta)$ folgenden einfachen Verlauf ab:

$$\overline{u'^2} \cdot f(\delta) = \overline{u'^2} - \frac{1}{30}\frac{\overline{\epsilon} \cdot \delta^2}{\nu} \qquad \text{für} \qquad \delta < l_K \tag{3.47}$$

und

$$\overline{u'^2} \cdot f(\delta) = \overline{u'^2} - \frac{C_K}{2} \cdot (\overline{\epsilon} \cdot \delta)^{\frac{2}{3}} \qquad \text{für} \qquad l_K < \delta < l_{int}, \tag{3.48}$$

wobei die Kolmogorov-Konstante C_K mit einem Wert $1,8$ angenommen wird [16-19].

Wird (Gl. 3.48) eingesetzt in (Gl. 3.44), ergibt sich für das Taylor'sche Längenmaß die Beziehung

$$\lambda_T = \left(-\frac{\partial^2 f\,(\delta)}{\partial \delta^2}\right)^{-\frac{1}{2}} = \left(15\nu \cdot \overline{u_i'^2}/\overline{\epsilon}\right)^{1/2} = \left(10\nu \cdot \overline{k}/\overline{\epsilon}\right)^{1/2} \qquad . \tag{3.49}$$

Das Taylor'sche Längenmaß λ_T läßt sich deuten als die Länge, entlang derer die kleinsten Wirbel (von der Größenordnung des Kolmogorov-Längenmaßes) während ihres Zerfalls mitbewegt (konvektiert) werden [20]. Um die Größenverhältnisse der drei eingeführten Längenmaße vergleichend darzustellen, ist es zweckmäßig die „Turbulenz-Reynolds-Zahl"

$$Re_T = \frac{\sqrt{\overline{u_i'^2}} \cdot l_{int}}{\nu} \tag{3.50}$$

einzuführen. Man kann leicht zeigen, daß

$$\frac{l_{int}}{l_K} \sim {Re_T}^{\frac{3}{4}} \gg 1 \tag{3.51}$$

und

$$\frac{l_{int}}{\lambda_T} \sim {Re_T}^{\frac{1}{2}} \gg 1 \qquad . \tag{3.52}$$

Das Wirbelspektrum turbulenter Strömungen hoher Reynolds-Zahlen ist gekennzeichnet durch die Existenz dreier charakteristischer Bereiche:

1.) Wirbel, deren Ausmaße mit denen der größten Wirbel vergleichbar sind, d.h. annähernd gleich dem integralen Längenmaß sind. Sie sind stark anisotrop und orts- und zeitabhängig (abhängig von der Geometrie der Strömung, den Randbedingungen und den sich abspielenden physikalisch-chemischen Vorgängen). Sie enthalten den größten Anteil der TKE.

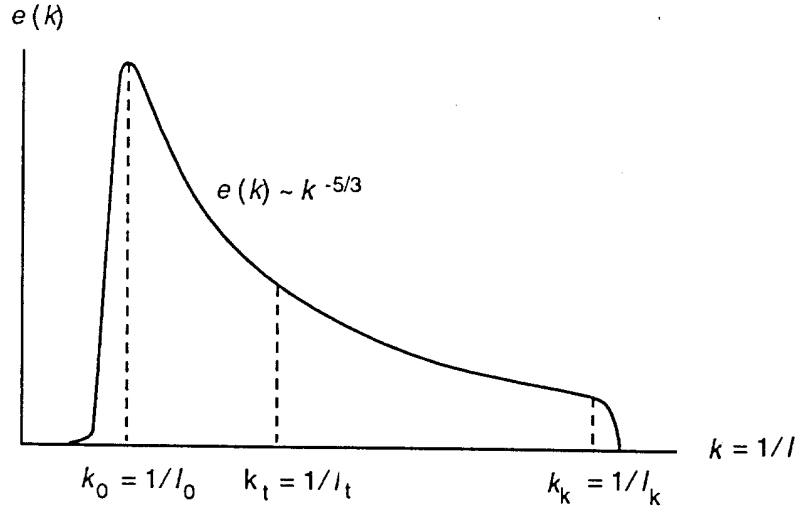

Abbildung 3.1: Turbulentes Energiespektrum

2) Wirbel, deren Ausmaße viel kleiner sind als das integrale Längenmaß und gleichzeitig viel größer als das Kolmogorov-Längenmaß. Sie sind annähernd isotrop und die spektrale Energiedichte der Turbulenzenergie ist durch das Kolmogorov-Energiespektrum gegeben:

$$e\left(\frac{\pi}{l}\right) = C_K \cdot \overline{\epsilon}^{\frac{2}{3}} \cdot \left(\frac{\pi}{l}\right)^{-\frac{5}{3}} \tag{3.53}$$

mit $C_K \cong 1,8$ (zw. 1,3 und 2,3). Diese Wirbel bilden den sogenannten Inertialbereich („inertial range“) des Turbulenzspektrums, in welchem die Trägkeitskräfte die dominierende Rolle spielen. Darin wird die Energie der Turbulenzbewegung fast ausschließlich von den großen, energiereichen Wirbeln den kleinen, schnell rotierenden Wirbeln weitergegeben. Die Proportionalitätskonstante wird durch die mittlere Dissipationsgeschwindigkeit $\overline{\epsilon}$ bestimmt. Deshalb wird $\overline{\epsilon}$ oft auch Energietransfergeschwindigkeit genannt.

3) Wirbel, deren Durchmesser kleiner oder gleich dem Kolmogorov-Längenmaß ist, bilden den Dissipationsbereich, in dem die Bewegungsenergie der Turbulenz in Wärme umgewandelt wird. Hier fällt die spektrale Energiedichte exponentiell mit dem Wirbeldurchmesser ab.

Die spektrale Energiedichte der kinetischen Turbulenzenergie ist in Abb. 3.1 dargestellt.

Im stationären Fall muß die Dissipationsgeschwindigkeit $\overline{\epsilon}$ der TKE für die kleinsten Wirbel gleich groß sein mit der Bildunggeschwindigkeit der TKE durch die Entstehung in den großen Wirbel. Durch eine Dimensionsanalyse ergibt sich somit der folgende Zusammenhang zwischen der Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie und dem integralen Längenmaß:

$$\overline{\epsilon} \sim \frac{\overline{k}^{\frac{3}{2}}}{l_{int}} \quad . \tag{3.54}$$

Das integrale Längenmaß l_{int} kann somit berechnet werden als

$$l_{int} = C_\mu^{\frac{3}{4}} \cdot \frac{\overline{k}^{\frac{3}{2}}}{\overline{\epsilon}} \tag{3.55}$$

und die Wirbelviskosität μ_t als

$$\mu_t = C_\mu \cdot \frac{\overline{k}^2}{\overline{\epsilon}} \qquad , \tag{3.56}$$

wobei $C_\mu \cong 0,09$ gleichfalls Kolmogorov-Konstante genannt wird.

Die Zwei-Gleichungs-Turbulenzmodelle lösen neben der Transportgleichung für die TKE eine weitere Transportgleichung für eine zweite Turbulenzgröße. Diese soll zwecks einfacher physikalischer Interpretation von der Form $Z = \overline{k}^m \cdot {l_{int}}^n$ sein, wobei m und n möglichst ganze Zahlen sein sollten. Folgende drei Größen haben sich als physikalisch sinnvolle Turbulenzgrößen erwiesen [13]:

1) die Dissipationsgeschwindigkeit der TKE $\overline{\epsilon} = C_\mu \cdot \frac{\overline{k}^{\frac{3}{2}}}{l_{int}}$,
2) das Produkt aus TKE und integralem Längenmaß, $\overline{k} \cdot l_{int}$, und
3) die Größe $\omega^2 = \overline{k}/{l_{int}}^2$, die als Dissipation der TKE pro Maßeinheit der TKE angesehen wird.

Die entsprechenden Turbulenzmodelle heißen demnach $\overline{k} - \overline{\epsilon}$-Modell, $\overline{k} - \overline{k}l$-Modell, bzw. $\overline{k} - \overline{\omega}^2$-Modell. Für kompressible turbulente Strömungen, in denen die Dichteschwankungen eine nicht vernachläßigbare Rolle spielen, werden die Transportgleichungen für die entsprechenden Favre-gemittelten Turbulenzgrößen aufgestellt.

Vergleiche haben gezeigt, daß das $\tilde{k} - \tilde{\epsilon}$-Modell die besten Ergebnisse liefert, so daß es heute das Standard-Turbulenzmodell in der 3D-Simulation turbulenter Strömungen geworden ist. In allen Rechnungen, die Bestandteil dieser Arbeit sind, wurde das $\tilde{k} - \tilde{\epsilon}$-Modell verwendet.

Die Herleitung der Transportgleichung für die Dissipationsgeschwindigkeit der TKE $\tilde{\epsilon}$ und die Modellierung der darin auftretenden Korrelationen erweisen sich als relativ langwierig und schwierig. Doch hat sich inzwischen die Auffassung durchgesetzt, daß zwischen der Transportgleichung für die Dissipationsgeschwindigkeit und der Transportgleichung für die TKE eine funktionelle Ähnlichkeit besteht [15]. Sie hat bis auf einen expliziten Skalierungsfaktor $\tilde{\epsilon}/\tilde{k}$ und mehrere anzupassende Parameter dieselbe Form wie die Transportgleichung der TKE:

$$\frac{\partial(\overline{\rho} \cdot \tilde{\epsilon})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot \tilde{u}_j \cdot \tilde{\epsilon})}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\overline{\mu} + \frac{\mu_t}{\mathrm{Pr}_\epsilon}\right)\frac{\partial \tilde{\epsilon}}{\partial x_j}\right] =$$

$$C_{\epsilon 1}\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}\left\{\mu_t\left[\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_l}\right] - \overline{\rho}\tilde{k}\right\}\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - C_{\epsilon 2}\overline{\rho}\frac{\tilde{\epsilon}^2}{\tilde{k}} \tag{3.57}$$

Die Werte der Parameter des $\tilde{k}$-$\tilde{\epsilon}$-Modells sind dem „Star-CD Handbuch“ [7] entnommen.

3.2.3 Voraussetzungen für die Anwendung des k-ϵ-Turbulenzmodells zur Berechnung der Turbulenz in einem Ottomotor

In den vorhergehenden Abschnitten wurde darauf hingewiesen, daß als eine wesentliche Voraussetzung für die Anwendung eines Zweigleichungs-Turbulenzmodells (z.B. des k-ϵ-Turbulenzmodells) die Hypothese der lokalen Homogenität und der lokalen Isotropie der

Turbulenz zumindest näherungsweise erfüllt sein muß. Nur in diesem Fall genügen die Informationen, die aus der TKE (die Spur des Tensors der Reynolds-Spannungen) und der Dissipationsgeschwindigkeit der TKE gewonnen werden können, um die Turbulenz in dem gegebenen Fluid korrekt zu beschreiben. Deshalb werden in diesem Abschnitt die Ergebnisse einiger experimenteller Untersuchungen zur Turbulenz in dem Brennraum eines Ottomotors angeführt. Diese Untersuchungen belegen, unter welchen Bedingungen im Ottomotor diese Hypothese der lokalen Homogenität und der lokalen Isotropie der Turbulenz erfüllt ist. Sie bestimmen damit den Gültigkeitsbereich für eine Berechnung der Turbulenz in einem Ottomotor mit einem Zweigleichungs-Turbulenzmodell.

E. S. Semenov stellte 1958 fest, daß für die Turbulenzbewegung in einem Ottomotor ohne ausgeprägte Quetschspaltströmung und/oder starkem Drall in der Nähe des oberen Totpunkts die Hypothese der lokalen Homogenität und der lokalen Isotropie der Turbulenz näherungsweise erfüllt sind [36]. Seit Semenovs ersten Untersuchungen haben Messungen wiederholt bestätigt, daß der relative Fehler dabei ca $\pm 30\%$ beträgt. Eine Ausnahme stellt jedoch die Grenzschicht in der unmittelbaren Nähe einer materiellen Oberfläche (Zylinderwand, Kolbenboden, usw.) dar. In einer solchen wandnahen Grenzschicht von ca. 2 mm Dicke ist die Turbulenzbewegung stark anisotrop und muß in geeigneter Weise modelliert werden. Die Modellierung der Turbulenz in der wandnahen Grenzschicht wird in dem nächsten Abschnitt besprochen.

3.3 Bestimmung der Randbedingungen für die Turbulenzgrößen

Die Verwendung eines Turbulenzmodells setzt die Angabe von geeigneten Randbedingungen für die Transportgleichungen der Turbulenzgrößen voraus. Dabei ist die Modellierung der Turbulenzbewegung vor allem in der Nähe fester Wände eine besondere Herausforderung. In der Grenzschicht in unmittelbarer Nähe der Wand ist die Strömung laminar. Für die Berechnung von Geschwindigkeitsfeld, Temperaturfeld, der TKE usw. in dem Übergangsbereich zur voll ausgebildeten Turbulenz werden in der 3D-Strömungssimulation sogenannte „Wandgesetze“ oder „Wandfunktionen“ verwendet. Dies ist eine relativ grobe Näherungslösung, doch zur Zeit der einzig mögliche Weg in der 3D-Simulation von Verbrennungsmotoren, weil einerseits die üblichen Turbulenzmodelle in diesem Übergangsbereich ihre Gültigkeit verlieren und andererseits die heute mögliche Netzfeinheit nicht ausreicht, um diesen Übergangsbereich numerisch aufzulösen, um ein Zwei-Schichten-Turbulenzmodell anwenden zu können.

Die Wandgesetze für die verschiedenen Strömungsvariablen beruhen auf folgenden Annahmen [7] :

1) Die Schwankungen der Strömungsvariablen finden hauptsächlich entlang der lokalen Senkrechten zur Wand statt. Dies führt im Prinzip zu einem eindimensionalen Problem (d.h. Änderungen der Variablen nur entlang der Senkrechten zur Wand).

2) Der Einfluß von Druckgradienten und Volumenkräften sind vernachlässigbar, so daß die Scherspannung in der Übergangsschicht gleichförmig ist.

3) Die Scherspannung und die Geschwindigkeit haben in der gesamten Scherschicht gleiche Richtung und gleichen Richtungssinn.

4) Produktion und Dissipation der TKE stehen in einem dynamischen Gleichgewicht.

5) Das integrale Längenmaß verändert sich linear mit dem Wandabstand.

Als dimensionslose Variablen für den Abstand zur festen Wand und für die Tangentialkomponente der Geschwindigkeit (der zur Wand paralellen Komponente) u eignen sich die Größen

$$y^+ = \frac{\rho C_\mu^{1/4} \tilde{k}^{1/2} y}{\mu} \tag{3.58}$$

und

$$u^+ = \frac{u - u_{wall}}{u_{\tau'}} \quad , \tag{3.59}$$

wobei y den absoluten Wandabstand darstellt und $u_{\tau'} = \left(\frac{\tau_{wall}}{\rho}\right)^{\frac{1}{2}}$. Die Wandscherspannung τ_{wall} ist modelliert als

$$\tau_{wall} = (\mu + \mu_t) \cdot \frac{\partial u}{\partial y} \quad . \tag{3.60}$$

Das Profil der Tangentialkomponente der Geschwindigkeit u ist gemäß dem „logarithmischen Wandgesetz“

$$u^+ = y^+ \qquad \text{für} \qquad y^+ \leq y_m^+$$

und

$$u^+ = \frac{1}{\kappa_K} \ln\left(E y^+\right) \qquad \text{für} \qquad y^+ > y_m^+ \quad . \tag{3.61}$$

In (Gl. 3.60) sind κ_K die von Karman-Konstante und $E = 9,0$ eine Modellkonstante, die empirisch bestimmt wurde. Die Bedingung für die Stetigkeit des Geschwindigkeitsprofils in $y^+ = y_m^+$ ist

$$y_m^+ - \frac{1}{\kappa_K} \ln\left(E y_m^+\right) = 0 \quad . \tag{3.62}$$

Der Wert y_m^+ wird anhand von (Gl. 3.62) berechnet.

Das Profil der Turbulenzgrößen $\tilde{k}$ und $\tilde{\epsilon}$ ist, bei Annahme von lokalem Gleichgewicht von Produktion und Dissipation, durch die folgenden Beziehungen widergegeben:

$$\tilde{k} = \frac{C_\mu^{-\frac{1}{2}} \cdot \tau_{wall}}{\rho} \tag{3.63}$$

und

$$\tilde{\epsilon} = \frac{C_\mu^{\frac{3}{4}}}{\kappa_K} \frac{\tilde{k}^{\frac{3}{2}}}{y} \quad . \tag{3.64}$$

Die Wärmestromdichte für den turbulenten Wärmeübergang an der Wand und die Massenstromdichten der chemischen Spezien von der Wand oder zur Wand werden in 3D-Simulationsprogrammen (z.B. in Star-CD) standardmäßig anhand des folgenden Wandgesetzes berechnet [7] :

$$\Phi_h = \frac{\left(\rho \tau_{wall}\right)^{1/2} \cdot \left(T - T_{wall}\right)}{Pr_t \cdot \left(\frac{u - u_{wall}}{u_\tau} + P_h\right) \cdot c_p} \tag{3.65}$$

bzw.

$$\Phi_{w_i} = \frac{\left(\rho \tau_{wall}\right)^{1/2} \cdot \left(w_i - w_{i,wall}\right)}{Sch_t \cdot \left(\frac{u - u_{wall}}{u_\tau} + P_{w_i}\right)} \quad . \tag{3.66}$$

In den (Gln. 2.65 - 2.66) wird der Widerstandsfaktor der wandnahen Grenzschicht P_h bzw. P_{w_i} mit Hilfe der beiden folgenden Beziehungen berechnet [7]:

$$P_h = 9,24 \cdot \left[\left(\frac{Pr}{Pr_t} \right)^{\frac{3}{4}} - 1 \right] \left[1 + 0,28 \cdot \exp\left(\frac{-0,007 Pr}{Pr_t} \right) \right] \quad , \tag{3.67}$$

$$P_{w_i} = 9,24 \cdot \left[\left(\frac{Sch_i}{Sch_t} \right)^{\frac{3}{4}} - 1 \right] \left[1 + 0,28 \cdot \exp\left(\frac{-0,007 Sch_i}{Sch_t} \right) \right] \quad . \tag{3.68}$$

Der Wärmeübergangskoeffizient ergibt sich aus (Gl. 2.65) als

$$\alpha_h = \frac{\left(\rho \tau_{wall} \right)^{1/2}}{Pr_t \cdot \left(\frac{u - u_{wall}}{u_\tau} + P_h \right) \cdot c_p} \quad . \tag{3.69}$$

Der Ausdruck (Gl. 3.67) ist die zweite Beziehung für den Wärmeübergangskoeffizienten α_h (neben der Woschni-Korrelation (Gl. 2.40) , die in der vorliegenden Arbeit verwendet wird. Die Ergebnisse, die mit Hilfe dieser beiden Modellierungsansätzen erzielt wurden, werden in Kap. 6 verglichen.

Nach der Einführung der charakteristischen Größen der Turbulenz kann im nächsten Kapitel das angewendete Modell für die vorgemischte turbulente Verbrennung behandelt werden.

Kapitel 4

Laminare und turbulente Vormischflammen

Um Verbrennungsprozesse zu untersuchen, ist es vorteilhaft, sie anhand ihrer wichtigsten Merkmale (chem. Zusammensetzung des brennbaren Gemisches, Art des Strömungsfeldes, Reaktionsgeschwindigkeit) in Gruppen einzuteilen. So unterscheidet man Vormischflammen und Diffusionsflammen, laminare und turbulente Flammen und schließlich schnelle und langsame Reaktionskinetik.

Vormischflammen sind Flammen, in denen Brennstoff und Oxidationsmittel bei Beginn des Verbrennungsprozesses als ein in seiner chemischen Zusammensetung homogenes Gasgemisch vorliegt, im Gegensatz zu Diffusionsflammen, in denen Brennstoff und Oxidationsmittel getrennt zugeführt werden und sich erst unmittelbar vor der Verbrennung mischen.

Von einer „schnellen Chemie“ eines Verbrennungsprozesses spricht man dann, wenn die charakteristischen Zeitskalen der Reaktionskinetik (sehr) klein sind im Verhältnis zu den Zeitskalen der konvektiven und diffusiven Prozesse in der Verbrennung. Da die charakteristischen Längen- und Zeitskalen der Chemie und der Turbulenz eine zentrale Rolle in dem zu behandelnden Flamelet-Konzept spielen, werden sie innerhalb dieses Kapitels ausführlich behandelt.

Aufgrund der Anforderungen an den Motor bezüglich Leistung und Gewicht soll eine intensive Verbrennung mit einer möglichst großen freigesetzten Energiemenge auf kleinstem Raum stattfinden. Die Verbrennung in Ottomotoren ist durch die relativ frühe Einspritzung und durch den intensiven turbulenten Mischungsprozeß des verdampften Kraftstoffes mit dem Oxidationsmittel (Luft) eine annähernd homogene, turbulente Vormischverbrennung mit schneller Reaktionskinetik.

4.1 Das Flamelet-Konzept

Für die Modellierung der ottomotorischen Verbrennung ist die Beschreibung der Wechselwirkung zwischen Turbulenz und komplexer Reaktionskinetik ein Problem von großer Bedeutung, welches trotz intensiver Bemühungen und einiger bemerkenswerter neuer Erkenntnisse bis heute noch nicht in seiner ganzen Bandbreite gelöst werden konnte. Für bestimmte Teilbereiche (z.B. für das Flamelet-Regime) sind jedoch bereits ausreichend detaillierte Kon-

zepte erstellt worden. Wenn die Zeitskalen der Reaktionskinetik sehr viel kleiner sind als die Zeitskalen des turbulenten Stömungsfeldes, werden sich die chemischen Reaktionen fast ausschließlich in dünnen Schichten abspielen, die „Flamelets“ („Flämmchen“) genannt weden. Die Struktur dieser Flamelets ist grundsätzlich eindimensional (normal zur Schicht) und mit der Struktur gekrümmter und gestreckter laminarer Vormischflammen identisch, so daß unter diesen Voraussetzungen die turbulente Vormischflamme als statistisches Ensemble lokaler gekümmter und getreckter laminarer Vormischflammen angesehen werden kann. Diese Anschauung wird als „Flamelet-Konzept“ bezeichnet. Somit können im Flamelet-Regime Chemie und Turbulenz entkoppelt und getrennt berechnet werden [20]. Alle Informationen über die sehr schnell ablaufenden chemischen Prozesse können mit Hilfe eines vollständigen Reaktionsmechanismus berechnet und in Form von Flamelet-Bibliotheken gestreckter und gekrümmter laminarer Flammen gespeichert werden. Um aus den in den Flamelet-Bibliotheken gespeicherten Massenbrüchen der einzelnen chemischen Spezies die benötigten Mittelwerte der Massenbrüche dieser Spezies zu berechnen, wird während der eigentlichen 3D-Simulation lediglich ein statistischer Mittelungsprozeß durchgeführt. Diese erhebliche Vereinfachung führt zu einigermaßen akzeptablen Rechenzeiten, doch ist ihr Gültigkeitsbereich natürlich auf den Flamelet-Bereich der turbulenten Verbrennung beschränkt.

Während reaktive Strömungen mit schneller Chemie in allen Verbrennungsmotoren und Brennern eingesetzt werden, finden Strömungen mit langsamer Chemie mit einigen sehr wenigen Ausnahmen (z.B. Verbrennung mit hochverdünnten Reaktanden) keine praktische Anwendung. In Simulationen können mit Hilfe der Störungstheorie solche langsam reagierende, turbulente Strömungen als Störungen der chemisch inerten, turbulenten Strömungen behandelt werden unter Hinzunahme von Erhaltungsgleichungen für die reagierenden Spezies.

4.2 Laminare Vormischflammen

4.2.1 Die Struktur laminarer Vormischflammen

Der Mechanismus der Flammenfortpflanzung besteht darin, daß die durch chemische Reaktionen aufgebauten Gradienten (Temperatur- und Konzentrationsgradienten) konvektive und diffusive Prozesse (Wärmeleitung, Diffusion, u.a.) auslösen, die die Erhöhung der örtlichen Temperatur und Radikalkonzentrationen bewirken und somit wiederum die chemischen Reaktionsgeschwindigkeiten exponentiell erhöht werden (siehe §2.5). In Abb. 4.1 ist die Struktur einer flachen, laminaren Vormischflamme dargestellt.

In der Flamme können drei Zonen unterschieden werden: eine chemisch inerte Vorheizzone, eine dünne, innere Reaktionszone und eine Oxidationszone [20]. Das brennbare Gasgemisch in der Vorheizzone wird durch Wärmeleitung aus der Reaktionszone erhitzt. Mit der Temperatur steigt die Reaktionsgeschwindigkeit exponentiell, es kommt zur chemischen Umsetzung in der Reaktionszone, die in der Oxidationszone abgeschlossen wird (die Zwischenprodukte werden weitgehend abgebaut, die Temperatur und die Zusammensetzung nähern sich asymptotisch den charakteristischen Werten des verbrannten Gemisches).

Genauere Angaben zur Struktur einer laminaren Vormischflamme sind möglich, wenn die Gruppe der verwendeten Kraftstoffe etwas eingegrenzt wird. Als Kraftstoff werden in motorischen Anwendungen heute in der Regel höhere Kohlenwasserstoffe verwendet. Die Profile

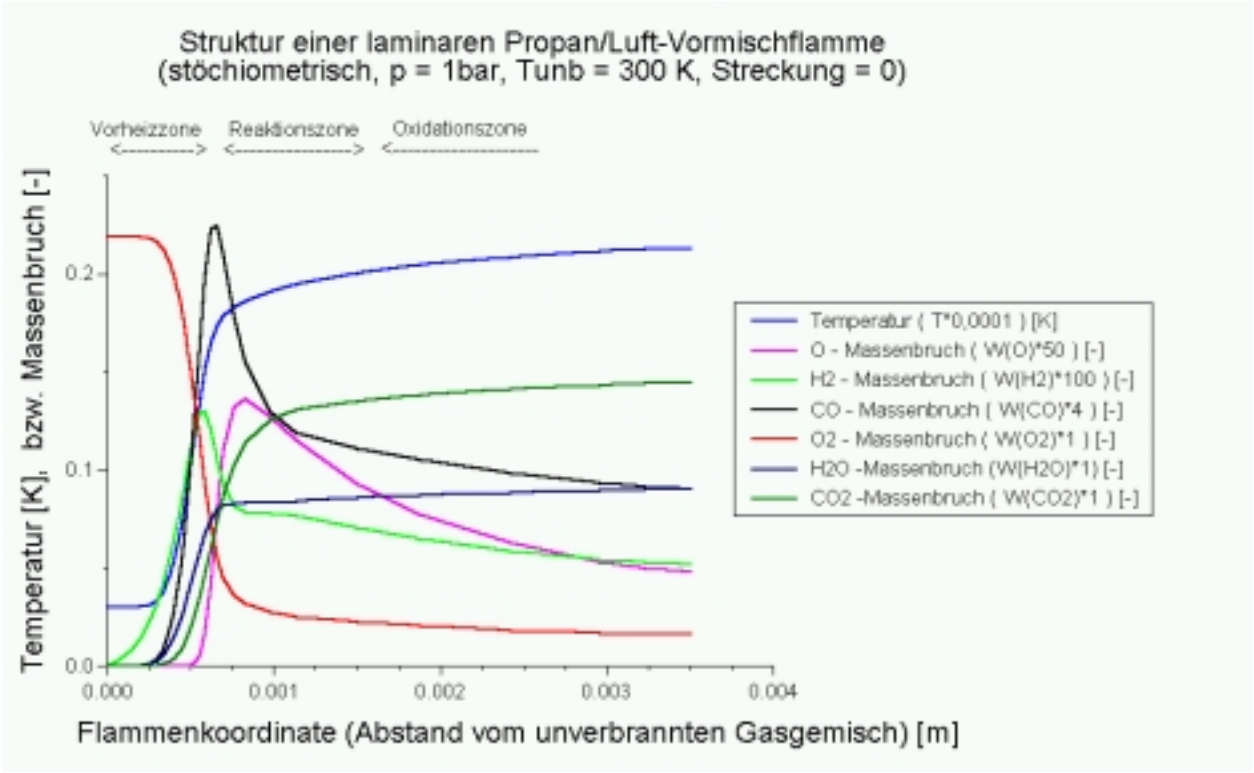

Abbildung 4.1: Struktrur einer laminaren Flamme

von Temperatur und Massenbrüche der wichtigsten chemischen Spezies über der Flammenfront weisen bei Kohlenwasserstoff-Luft-Flammen eine Reihe von Gemeinsamkeiten auf, die in dem herausragenden Einfluß einiger weniger, von dem einzelnen Kraftstoff unabhängigen Elementarreaktionen begründet ist [22]. Als solche Elementarreaktionen sind in erster Reihe die folgenden beiden Reaktionen anzuführen :

$$H + O_2 \rightarrow OH + O \quad , \tag{4.1}$$

$$CO + OH \rightarrow CO_2 + H \quad . \tag{4.2}$$

In mageren bis mäßig kraftstoffreichen Kohlenwasserstoff-Flammen wird der Kraftstoff in einem ersten Reaktionsschritt durch die Radikale O, H und OH angergiffen. Diese Radikale werden durch den H_2-O_2-Radikalkettenmechanismus gebildet:

$$OH + H_2 \rightleftharpoons H_2O + H \quad , \tag{4.3}$$

$$H + O_2 \rightleftharpoons OH + O \quad , \tag{4.4}$$

$$O + H_2 \rightleftharpoons OH + H \quad , \tag{4.5}$$

$$OH + OH \rightleftharpoons H_2O + H \quad . \tag{4.6}$$

Durch den Angriff der Radikale auf den Kraftstoff entstehen Alkylradikale, die schnell zu kleineren Alkylradikalen (hauptsächlich CH_3, C_2H_5) thermisch zerfallen, wobei ein Alken gebildet wird [22]:

$$R \rightarrow Alken + R' \quad . \tag{4.7}$$

Das Alken wird seinerseits von den Radikalen O, H, OH angegriffen. Durch diese Reaktionen entsteht wiederum ein kleineres Alkylradikal. Somit wird deutlich, daß der Verbrennungsprozeß der höheren Alkane, unabhängig von dem jeweiligen Kraftstoff, durch die Reaktionskinetik der kleinsten Alkylradikale (CH_3, C_2H_5) bestimmt wird (die Details dazu sind in den Artikeln von J. Warnatz [22, 23] ausführlich beschrieben). Es zeigt sich, daß dieser Teil des gesamten Reaktionsmechanismus, der die Kinetik der kleinsten Alkylradikale beinhaltet, für den globalen Verbrennungsprozeß geschwindigkeitsbestimmend ist und eine Ursache der sehr ähnlichen Flammenstruktur von Alkan- und Alken-Vormischflammen darstellt.

Der Oxidationsprozeß der Alkylradikale ergibt in einer ersten Stufe CO, welches anschließend durch relativ langsame Reaktionen zu CO_2 umgewandelt wird, wobei das wichtigste Reaktionspaar gegeben ist durch:

$$\mathrm{CO + OH \rightleftharpoons CO_2 + H} \qquad , \tag{4.8}$$

mit den Geschwindigkeitskoeffizienten

$$k_{\rightharpoonup} = 6,0 \cdot 10^6 \cdot T^{1,5} \cdot \exp\left(\frac{-3,1\ \mathrm{kJ/mol}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{mol \cdot s}}\right] \qquad , \tag{4.9}$$

$$k_{\leftharpoondown} = 6,78 \cdot 10^8 \cdot T^{1,5} \cdot \exp\left(\frac{-89,75\ \mathrm{kJ/mol}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\mathrm{cm^3}}{\mathrm{mol \cdot s}}\right] \qquad . \tag{4.10}$$

Wegen der sehr viel größeren Aktivierungsenergie der Umkehrreaktion ist die Gleichgewichtszusammensetzung dieser beiden chemischen Spezies temperaturabhängig. Eine Abkühlung des verbrannten Gemisches führt zu einer Verlagerung des Gleichgewichts zugunsten des Kohlendioxids. Die Umwandlung von CO zu CO_2 ist einer der langsamsten Reaktionspfade zum chemischen Gleichgewicht.

4.2.2 Die laminare Flammengeschwindigkeit

Eine charakteristische Eigenschaft einer laminaren Vormischflamme ist ihre Fähigkeit, sich mit einer charakteristischen Flammenausbreitungsgeschwindigkeit räumlich auszubreiten. Die Ausbreitungsrichtung ist die Normale zur lokalen Flammenoberfläche, der Richtungssinn zeigt zum unverbrannten Gemisch hin. Den Modul der laminaren Flammengeschwindigkeit betreffend können folgende grundsätzliche Überlegungen gemacht werden:

Die chemische Reaktionskinetik liefert durch den langsamsten (geschwindigkeitsbestimmenden) Schritt einen charakteristischen Zeitmaßstab τ_{chem}, welcher ein Maß für die zusammengesetzte Zeit darstellt, die die verschiedenen Elementarreaktionen benötigen, um in der Reaktionszone die Ausgangsstoffe in Reaktionsprodukte umzuwandeln. Der Modul der laminaren Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und das charakteristische Zeitmaß der Reaktionskinetik τ_{chem} sind über den Wärmeleitungsprozeß in der Vorheizzone und den Diffusionsprozeß der reaktiven Spezies aus der Reaktionszone gekoppelt [20]. Geschwindigkeitsgradienten in der Vorheizzone und Ungleichgewichtseffekte von Wärmeleitung und Wärmefreisetzung in der Reaktionszone verändern die Struktur der Flammenfront und die globale Reaktionsgeschwindigkeit. Im Extremfall kann es zur Flammenverlöschung kommen. Die Ursache der Flammenverlöschung ist eine Lewis-Zahl-Instabilität, die durch Konkurrenz von

Wärmeleitung (Transport von Wärme aus der Reaktionszone heraus) und Diffusion (Transport der Ausgangsstoffe in die Reaktionszone und damit Transport von chemischer Energie, die mit einer exponentiell von der Temperatur abhängigen Reaktionsgeschwindigkeit in der Reaktionszone in Wärme umgesetzt wird) zustandekommt. Eine erhöhte Diffusionsgeschwindigkeit wirkt damit stabilisierend auf den Verbrennungsprozeß, während eine erhöhte Wärmeleitung destabilisierend wirkt. [2].

Ist das charakteristische Zeitmaß der chemischen Reaktion vergleichbar mit dem charakteristischen Zeitmaß des Wärmetransportes, kommt es durch Wärmeverluste in der Vorheizone zu einer Abkühlung der Reaktionszone und damit zu einem weiteren Rückgang der Reaktionsgeschwindigkeit bis zum lokalen Erliegen der chemischen Reaktion. Eine lokale Verlöschung einer Vormischflamme führt zu einer Diffusion von Ausgangsstoffen und heißen Reaktionsprodukten und somit zu einer lokalen Verbreiterung der Flammenstruktur. Die erneute Entzündung des Gemisches durch Energietransport aus der heißen Zone des verbrannten Gasgemisches ist eine Funktion der lokalen Strömungsverhältnisse.

Um solche Ungleichgewichtseffekte mathematisch zu beschreiben, muß eine zusätzliche Strömungsvariable eingeführt werden, die den Einfluß des Strömungsfeldes und der lokalen Krümmung der Flammenoberfläche auf die Flammenausbreitung in einer geeigneten Weise beschreibt. Eine solche Variable ist die „Flammenstreckung“ χ, die definiert wird als die relative Änderung des Flächeninhalts der Flammenoberfläche pro Zeiteinheit:

$$\chi = \frac{1}{\delta A} \cdot \frac{\mathrm{d}\,(\delta A)}{\mathrm{d}t} \qquad . \tag{4.11}$$

Der Modul der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit hängt damit nur von Druck, Temperatur, der chemischen Zusammensetzung des unverbrannten Gemisches und der Flammenstreckung ab.

M. Matalon [25] leitete 1983 erstmals einen recht komplizierten Ausdruck für die Flammenstreckung ab, der 1990 von S. Candel und T. J. Poinsot [26] folgendermaßen umgeformt wurde:

$$\chi = -\overrightarrow{n_\mathrm{F}}\overrightarrow{n_\mathrm{F}} : \overrightarrow{\nabla}\,\overrightarrow{v} + \mathrm{div}\,(\overrightarrow{v}) + u_\mathrm{lam} \cdot \mathrm{div}\,(\overrightarrow{n_\mathrm{F}}) \qquad . \tag{4.12}$$

Die ersten beiden Glieder auf der rechten Seite der (Gl. 4.12) beschreiben den Beitrag der Inhomogenität des Strömungsfeldes (Geschwindigkeitsgradienten), während der letzte Term der (Gl. 4.12) den Beitrag der Krümmung der Flamme zur Flammenstreckung beschreibt:

$$\mathrm{div}\,(\overrightarrow{n_\mathrm{F}}) = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right) = \frac{2}{R_\mathrm{F}} \qquad , \tag{4.13}$$

wobei R_1 und R_2 die lokalen Hauptkrümmungsradien der Flammenfront und R_F der mittlere Krümmungsradius der Flammenfront ist.

Eine ebene laminare Flamme besitzt somit eine Streckung $\chi = 0$. Die Flammengeschwindigkeit der flachen (ungestreckten und ungekrümmten), laminaren Flamme ist somit eine Funktion ausschließlich der Variablen Druck, Temperatur und der chemischen Zusammensetzung des unverbrannten Gemisches. Eine Dimensionsanalyse ergibt in dem relativ einfachen Fall der flachen laminaren Flamme (mit der Lewis-Zahl $Le = 1$) folgenden qualitativen Zusammenhang:

$$u_\mathrm{lam} = \left(\frac{\lambda_h}{\rho\ c_p\ \tau_\mathrm{chem}}\right)^{\frac{1}{2}} \qquad . \tag{4.14}$$

Es kann gezeigt werden (J. Warnatz, 1980-81 [21, 22]), daß aufgrund der Kraftstoffunabhängigkeit der wichtigsten Elementarreaktionen die laminare Flammengeschwindigkeit von Alkan-Luft-Gemischen mit einem relativen Fehler kleiner als 2 kraftstoffunabhängig berechnet werden kann, wenn nur der H_2-O_2-CO-Mechanismus angewendet wird und der Angriff der Radikale H, O und OH auf den jeweiligen Kraftstoff berücksichtigt wird. Dabei wird angenommen, daß das entstehende Alkyl-Radikal mit unendlich hoher Reaktionsgeschwindigkeit zu CO und H_2O weiterreagiert.

Ö. Gülder veröffentlichte 1984 [30] folgende empirische Korrelation für die adiabate laminare Flammengeschwindigkeit brennbarer Kohlenwasserstoff-Luft-Gemische:

$$u_{\mathrm{lam},0} = W \cdot \Phi^{\eta} \cdot \exp\left(-\xi \cdot (\Phi - \Phi_{\mathrm{m}})\right) \cdot \left(\frac{T_{\mathrm{unb}}}{T_0}\right)^{\alpha} \cdot \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\beta} \cdot (1.0 - F \cdot X_{\mathrm{exg}}) \quad . \tag{4.15}$$

Für Propan-Luft-Gemische gelten die Konstanten: $W = 0,446$; $\eta = 0,12$; $\xi = 4,95$; $\Phi_{\mathrm{m}} = 1,075$; $\alpha = 1,77$; $\beta = -0,22$; $p_0 = 1$ bar ; $T_0 = 300$ K. Die Konstante $F = 2,3$ gilt für den Bereich $0 \leq X_{exg} \leq 1/F$, sollte jedoch nur für relativ kleine Werte von X_{exg} verwendet werden.

Die Gülder-Korrelation zeigt, daß unter ansonsten gleichen Bedingungen eine Erhöhung des Druckes die laminare Flammenausbreitungsgeschwindigkeit reduziert, während eine Erhöhung der Temperatur des unverbrannten Gasgemisches die laminare Flammenausbreitungsgeschwindigkeit erhöht. Die Steigerung des Abgasgehaltes in dem unverbrannten Gemisch führt zu einer drastische Verringerung der laminaren Flammengeschwindigkeit.

Abbildung 4.2 zeigt die Abhängigkeit der Flammengeschwindigkeit der laminaren, ungestreckten und ungekrümmten Vormischflamme von dem Äquivalentverhältnis Φ für die Verbrennung eines Gemisches von Propan-Luft (Restgasgehalt Null) bei verschiedenen Werten von Druck und Temperatur des unverbrannten Gasgemisches ($p = 1$ bar und $T_{\mathrm{unb}} = 300$ K, $p = 9$ bar und $T_{\mathrm{unb}} = 600$ K, $p = 20$ bar und $T_{\mathrm{unb}} = 800$ K, $p = 50$ bar und $T_{\mathrm{unb}} = 1000$ K).

Die Änderung der Ausbreitungsgeschwindigkeit der gestreckten und gekrümmten laminaren Flamme ist proportional zur Flammenstreckung:

$$u_{\mathrm{lam}} = u_{\mathrm{lam},0} - L \cdot \chi \quad . \tag{4.16}$$

Der Proportionalitätsfaktor L wird „Markstein-Länge“ genannt und wird berechnet als:

$$L = L_M \cdot \frac{\lambda_h}{\rho \cdot c_p \cdot u_{\mathrm{lam}}} \quad . \tag{4.17}$$

Der dimensionslose Proportionalitätsfaktor L_M in (Gl. 4.17) ist die „Markstein-Zahl“. Clavin und Garcia [28] konnten 1983 für die Markstein-Zahl in dem Grenzfall der Einschritts-Reaktion mit sehr hoher Aktivierungsenergie und kleiner Flammenstreckung folgende Beziehung ableiten:

$$L_M = \frac{1}{\gamma_T} \cdot J + \frac{\beta_{E_A} \cdot (Le - 1)}{2} \cdot \left(\frac{1 - \gamma_T}{\gamma_T}\right) D \tag{4.18}$$

mit

$$J = \int_1^{\theta_b} \frac{h\,(\theta)}{\theta} d\theta \quad , \tag{4.19}$$

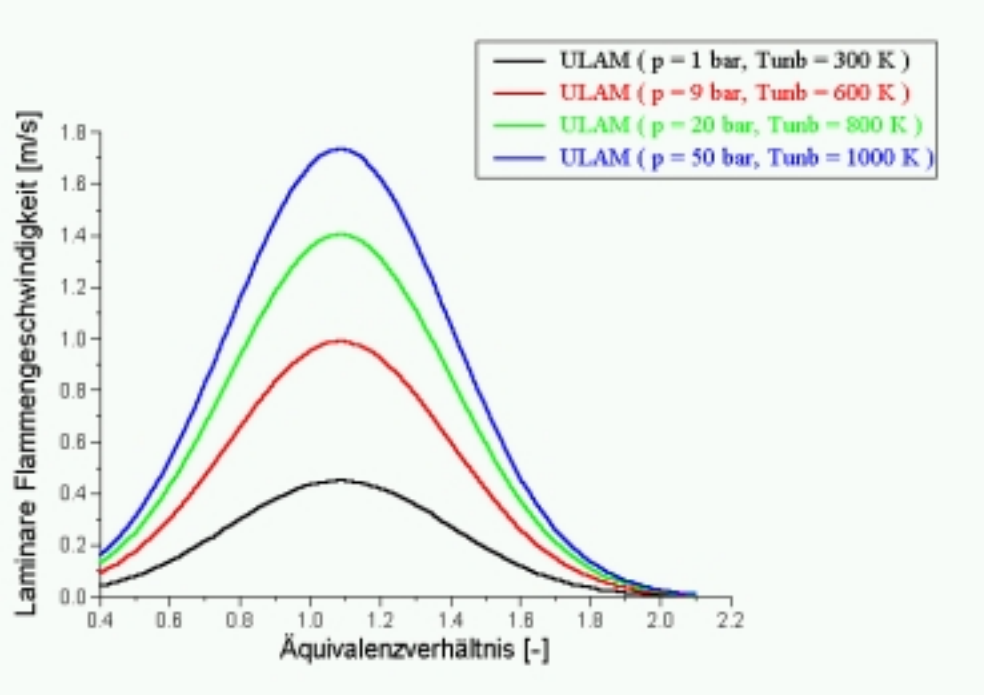

Abbildung 4.2: Abhänggigkeit der laminaren Flammengeschwindigkeit vom Äquivalenzverhältnis für ein reines Propan-Luft-Gemisch bei verschiedenen Werten des Drucks und der Temperatur des unverbrannten Gasgemisches.

$$D = \int_1^{\theta_b} \ln\left(\frac{(\theta_b - 1)}{\theta - 1}\right) \frac{h\,(\theta)}{\theta} d\theta \qquad . \tag{4.20}$$

Somit ist die Markstein-Zahl eine komplizierte Funktion der reduzierten Aktivierungsenergie

$$\beta_{E_A} = \frac{E_A}{R T_\mathrm{b}} \cdot \frac{T_\mathrm{b} - T_\mathrm{unb}}{T_\mathrm{unb}} \qquad ,$$

des reduzierten Gasexpansionsfaktors

$$\gamma_T = \frac{T_\mathrm{b} - T_\mathrm{unb}}{T_\mathrm{b}} \qquad ,$$

der Lewis-Zahl Le des unverbrannten Gemisches, der Temperaturen des unverbrannten Gemisches T_unb und bzw. des verbrannten Gemisches T_b, der reduzierten Temperatur $\theta = \frac{T}{T_\mathrm{unb}}$ und des Verhältnisses der Temperaturleitfähigkeiten bei der Temperatur T bzw. bei der Temperatur des unverbrannten Gemisches T_unb:

$$h\,(\theta) = \frac{\left(\frac{\lambda_h}{\rho c_p D}\right)_T}{\left(\frac{\lambda_h}{\rho c_p D}\right)_{T_\mathrm{unb}}} \qquad .$$

Die Beziehung (Gl. 4.18) kann für atmosphärische Verbrennungsprozese in Luft mit dem Ausdruck

$$L_M = 4,1 + 0,41 \cdot \beta_{E_A}\,(Le - 1) \tag{4.21}$$

angenähert werden. Searby und Quinard führten 1990 [28] direkte und indirekte Messungen der Markstein-Zahl durch und fanden für stöchiometrische Propan-Luft-Gemisch den Wert

$L_M = 3,7 \pm 0,4$, die mit (Gl. 4.21) in relativ guter Übereinstimmung ist. L.-K. Tseng, M. A. Ismail und G.M. Faeth [29] fanden für denselben Fall den Wert $L_M = 3,9$.

Wegen der hohen Empfindlichkeit der Markstein-Zahl L_M bezüglich Ungenauigkeiten in der Bestimmung der Aktivierungsenergie E_A in β_{E_A} und der Lewis-Zahl $Le \cong 1,0$ wurde in den durchgeführten Rechnungen die Marksteinzahl $L_M = 4,0$ festgesetzt.

4.2.3 Die Bibliothek gestreckter und gekrümmter laminarer Flammen

Wie weiter oben gezeigt, hängt die chemische Zusammensetzung der Reaktionsprodukte auf der Abgasseite der laminaren Flamme von Äquivalenzverhältnis, Druck, der Temperatur des unverbrannten Gemisches und der Flammenstreckung ab. Deshalb wurde die Flammen-Bibliothek für Propan-Luft-Gemische, die in der vorliegenden Arbeit verwendet wird, als Funktion der bereits genannten Variablen $\Phi,\ p,\ T_{unb},\ \chi$ gegliedert.

Die 241 Flammen in der Flammen-Bibliothek wurden anhand eines detaillierten Reaktionsmechanismus, der ca. 440 Reaktionen von 44 chemischen Spezies enhält, berechnet. Es wurden als Eckwerte für das Äquivalenzverhältnis die Werte Φ = 0,8; 0,95; 1,0 und 1,21 gewählt, für den Druck die Eckwerte p = 3 bar; 9 bar; 20 bar und 50 bar, für die Temperatur des unverbrannten Gemisches die Eckwerte T_{unb} = 300 K; 600 K; 800 K und 1000 K , für die Streckungsrate jeweils der Wert 0, der einer flachen laminaren Flamme entspricht und jeweils zwischen 2 und 5 weitere Werte in dem Bereich 300 bis 1800 s^{-1}. Die Flammen wurden von Abdul Attia-Shahin,(Φ = 0,8; 0,95 und 1,21, $\chi \neq 0$), Klaus Philip (alle Φ, $\chi = 0$) und dem Verfasser ($\phi = 1,0$, $\chi \neq 0$) am Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart mit Hilfe des Programms von U. Maas, G. Stahl und J. Warnatz berechnet. Eine Beschreibung der Grundlagen und Vorgehensweise bei der Berechnung solcher Flammen ist bei A. Attia-Shahin [27] zu finden.

Als Ergebnis der Berechnung einer solchen gestreckten und gekrümmten, laminaren Flamme werden die Variablen Temperatur, Dichte, die Massenbrüche von 44 chemischen Spezies, der Wärmefreisetzungsrate und die spezifische Wärmekapazität des Gasgemisches über der Flammenfront ausgegeben. Die ausreichende Auflösung der Flammenfront ist durch eine genügend große Anzahl (zwischen 55 und 75) beweglicher Gitterpunkte gewährleistet. Die Massenbrüche folgender chemischen Spezies werden berechnet und formatiert ausgegeben:

H	O	OH	HO_2	H_2O_2
CH	CHO	CH_2	CH_2O	CH_3
C_2H	C_2HO	C_2H_2	CH_2CO	C_2H_3
C_2H_4	CH_3CO	CH_3CHO	C_2H_5	C_2H_6
C_3H_6	C_3H_3	C_3H_4	C_4H	C_4H_2
C_4H_3	$c-2-C_4H_8$	$1-C_4H_8$	$s-C_4H_9$	$n-C_4H_9$
$n-C_4H_{10}$	$n-C_3H_7$	$i-C_3H_7$	CH_4	C_3H_8
N_2	N	H_2	CO	CO_2
NO	H_2O	O_2	.	

Um die Variablen Temperatur, Massenbrüche der Spezies, usw. in einer laminaren Flamme bei einem beliebigen Äquivalenzverhältnis Φ, Druck p und einer beliebigen Frischgastemperatur T_{unb} und bzw. Flammenstreckung χ innnerhalb des vorher angeführten Rahmens zu

berechnen, wird eine lineare Interpolation in diesem vierdimensionalen Feld (mit den Dimensionen Φ, p, T_{unb} und χ) durchgeführt. Diese Vorgehensweise erlaubt eine ausreichend genaue Berechnung des Verlaufs der genannten Variablen über der Flammenfront bei einem für die heutigen Höchstleistungsrechner akzeptablen Aufwand an Rechenzeit und Hauptspeicherbedarf. Jedoch ist die Darstellung der berechneten Variablen als Funktion der räumlichen Koordinate der Flammenstruktur für eine dreidimensionale Strömungssimulation mit beliebiger Orientierung der lokalen Flammenoberfläche sehr unvorteilhaft. Deshalb wird eine zusätzliche, skalare Variable eingeführt, die Reaktionsfortschrittsvariable. Die Reaktionsfortschrittsvariable ist eine adimensionale Größe, die vereinbarungsgemäß im unverbrannten Gemisch den Wert 0 und im vollständig verbrannten Gemisch den Wert 1 annimmt.

Es gibt mehrere Möglichkeiten die Reaktionsfortschrittsvariable zu definieren, z.B. anhand der Temperatur, der Massenbrüche von Ausgangsstoffen oder stabilen Endprodukten wie CO_2 oder H_2O. Die entsprechenden Definitionen wären dann

$$c = \frac{T - T_{\mathrm{unb}}}{T_{\mathrm{b}} - T_{\mathrm{unb}}} \tag{4.22}$$

oder

$$c = \frac{w_{\mathrm{C_3H_8}} - w_{\mathrm{C_3H_8,unb}}}{w_{\mathrm{C_3H_8,b}} - w_{\mathrm{C_3H_8,unb}}} \tag{4.23}$$

oder

$$c = \frac{w_{\mathrm{H_2O}} - w_{\mathrm{H_2O,unb}}}{w_{\mathrm{H_2O,b}} - w_{\mathrm{H_2O,unb}}} \quad . \tag{4.24}$$

Den Ergebnissen der Analyse von R. S. Cant, B. Rogg und K. N. C. Bray [31] folgend, wurde die Definition der Reaktionsfortschrittsvariablen mit Hilfe des Massenbruchs des Wassers (Gl. 4.24) gewählt. Die Verläufe der berechneten Strömungsgrößen in der laminaren Flamme (Temperatur und der Massenbrüche der 44 chemischen Spezies, usw.) wurden als Funktionen der Reaktionsfortschrittsvariablen gespeichert. Dafür wurden 51 äquidistante Werte der Reaktionsfortschrittsvariablen gewählt ($c = 0,00;\ 0,02;\ 0,04; \ldots 0,98;\ 1,0$).

4.2.4 Längen- und Zeitskalen in der laminaren Vormischflamme

Ein wichtiger Parameter der laminaren Vormischflamme ist die Flammendicke δ_{lam}. Die laminare Flammendicke beträgt bei einer stöchiometrischen, atmosphärischen Propan-Luft-Vormischflamme etwa $\delta_{\mathrm{lam}} = 0,2$ mm, sie nimmt jedoch mit steigendem Druck und mit steigender Temperatur des unverbrannten Gases ab, so daß sie für eine stöchiometrische Propan-Luft-Flamme bei $p = 60$ bar und $T_{unb} = 1000$ K den Wert $0,01$ mm unterschreitet. Gleichzeitig nimmt die laminare Flammendicke mit steigendem Äquivalenzverhältnis ab [27]. Die in der vorliegenden Arbeit verwendeten Werte für die laminare Flammendicke wurden durch lineare Interpolation zwischen Werten eines dreidimensionalen Feldes (mit den Variablen Äquivalenzverhältnis, Druck und Temperatur des unverbrannten Gases) berechnet. Die Werte in diesem Feld laminarer Flammendicken wurden für von Dietmar Schmidt an dem Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart berechnet. Dabei wurde die Flammendicke als die Entfernung zwischen den Punkten in der eindimensionalen Flammenstruktur definiert, in welchen die Reaktionsfortschrittsvariable die Werte $c = 0,1$ und bzw. $c = 0,9$ erreicht.

Mit Hilfe von laminarer Flammengeschwindigkeit und laminarer Flammendicke kann der charakteristische Zeitmaßstab der Reaktionskinetik in der laminaren Flamme τ_{chem} definiert werden als die sogenannte Flammenzeit (engl. „flame time“):

$$\tau_{\text{flam}} = \frac{\delta_{\text{lam}}}{u_{\text{lam}}} \quad . \tag{4.25}$$

Die Flammenzeit stellt ein Maß für die Zeit dar, die von der chemische Reaktionskinetik (im Sinne einer Bruttoreaktion) benötigt wird, damit sich die Flamme um die Distanz gleich ihrer eigenen Flammendicke ausbreiten kann.

Das Produkt aus Flammenstreckung und der Flammenzeit ergibt eine dimensionslose Größe, die „Karlovitz-Zahl“ Ka:

$$Ka = \tau_{\text{flam}} \cdot \chi = \frac{\chi \cdot \delta_{\text{lam}}}{u_{\text{lam}}} \quad . \tag{4.26}$$

4.2.5 Flammenverlöschung

Das charakteristische Zeitmaß τ_q für die Verlöschung einer Vormischflamme durch Flammenstreckung, genannt „Verlöschungszeit“ (engl. „quench time“), kann als Kehrwert des Wertes der sog. „kritischen“ Flammenstreckung χ_q, bei dem Verlöschung erstmals eintritt, definiert werden:

$$\tau_q = \frac{1}{\chi_q} \quad . \tag{4.27}$$

Die Berechnung der Verlöschungszeit τ_q, bzw. deren Kehrwert, der kritischen Flammenstreckung χ_q, erweist sich jedoch als ein relativ schwieriges Problem, weil zusätzlich zu den üblichen Variablen Äquivalenzverhältnis Φ, Druck p und Temperatur des unverbrannten Gasgemisches T_{unb} die zeitliche Variation dieser Größen eine wichtige Rolle spielt. Die laminare Flamme folgt den zeitlichen Veränderungen dieser Variablen mit einer zeitlichen Verzögerung. Hochfrequenten Schwankungen dieser Größen (mit Schwankungsperioden derselben Größenordnung wie τ_{chem}, also ca. 1 ms) kann die Flamme nicht folgen [32]. Doch auch die Berechnung von χ_q für stationäre Flammen zeigt eine besondere Empfindlichkeit der Ergebnisse bei Verwendung unterschiedlich komplexer Reaktionsmechanismen (C_1-Chemie, C_1/C_2-Chemie oder $C_1/C_2/C_3$-Chemie). Jedoch zeigen Berechnungen und Messungen [32] übereinstimmend, daß die kritische Flammenstreckung χ_q bei einer stöchiometrischen Flamme maximal ist (eine stöchiometrische Flamme verträgt die höchste Flammenstreckung) und daß mit steigendem Druck und steigender Temperatur des unverbrannten Gasgemisches die kritische Flammenstreckung erheblich steigt [27]. Liegt die kritische Flammenstreckung bei einer stöchiometrischen Propan-Luft-Flamme bei $p = 1$ bar und $T_{unb} = 300$ K bei etwa 2000 s^{-1} [2], so erreicht χ_q unter typischen motorischen Bedingungen ($p = 20$ bar, $T_{\text{unb}} = 800$ K) den Wert 10000 s^{-1} [27]. Wegen fehlender detaillierter Messungen oder Berechnungen über den Verlauf von χ_q als Funktion der Variablen Äquivalenzverhältnis Φ, Druck p und Temperatur des unverbrannten Gasgemisches T_{unb} muß der Wert von χ_q jedoch im allgemeinen anhand der relativ wenigen bekannten Ergebnisse abgeschätzt werden. Zwei Vorschläge zur Vorgehensweise bei der Abschätzung von χ_q sind:

1) Die Berechnungen von Rogg für eine stöchiometrische Methan-Luft-Vormischflamme zeigen, daß die Werte der Verlöschungszeit und der Flammenzeit sehr nahe beieinander

liegen. Nach N. Peters könnte man, verallgemeinernd, die Verlöschungszeit der Flammenzeit näherungsweise gleichsetzen [20].

2) Wenn der Wert der Flammengeschwindigkeit der gestreckten und gekrümmten, laminaren Flamme (berechnet nach (Gl. 4.16) und (Gl. 4.17)) kleiner ist als die Hälfte der adiabaten laminaren Flammengeschwindigkeit (Gl. 4.15), tritt Flammenverlöschung ein. Diese Annahme wurde von H. Wenzel bei der direkten numerischen Simulation der Ausbreitung einer Flamme angewendet [35].

In der vorliegenden Arbeit wurde der Vorschlag von Wenzel als Bedingung zum Eintreten der Flammenverlöschung übernommen. Zusätzlich dazu wurde die Bedingung, daß bei einer Flammenstreckung von $\chi_q = 10000\ \mathrm{s}^{-1}$ ebenfalls Verlöschung eintritt, verwendet. Diese Bedingungen wurden in das Anwenderunterprogramm STRETCH.F (zur Berechnung der Flammengeschwindigkeit der gestreckten und gekrümmten laminaren Flamme) eingebaut.

4.3 Turbulente Vormischflammen

Wie zu Beginn dieses Kapitels (§ 3.1) beschrieben, ist es unter bestimmten Voraussetzungen möglich, die komplexen Phänomene in einer turbulenten Vormischflamme zu simulieren, wenn Turbulenz und Reaktionskinetik entkoppelt und getrennt berechnet werden. Dabei wird die turbulente Flamme als ein statistisches Ensemble gestreckter und gekrümmter laminarer Flammen angesehen. Somit können alle Strömungsvariablen in der turbulenten Flamme durch statistische Mittelung aus den entsprechenden Variablen in der laminaren Flamme bestimmt werden, vorausgesetzt eine entsprechende Flamelet-Bibliothek liegt vor. In den folgenden Abschnitten werden die Voraussetzungen für die Anwendung des Flamelet-Konzeptes bei der ottomotorischen Verbrennung untersucht und der Anwendungsbereich dieses Berechnungsverfahrens abgegrenzt.

4.3.1 Die Regimes der turbulenten Verbrennung

R. Borghi stellte 1984 ein Diagramm der turbulenten Verbrennungsprozesse auf. Anhand dieses Diagramms ist eine Einteilung dieser Prozesse in verschiedene Regimes möglich (s. Abb. 4.3, S. 50).

Im Borghi-Diagramm sind als Koordinatenachsen die Verhältnisse der charakteristischen Größen der Turbulenz zu charakteristischen Größen der chemischen Kinetik jeweils logarithmisch dargestellt. Entlang der Abszisse ist das Verhältnis aus dem integralen Längenmaß und der laminaren Flammendicke $l_{int}/\delta_{\mathrm{lam}}$ und entlang der Ordinate das Verhältnis aus der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit $u' = \sqrt{\frac{2}{3}\tilde{k}}$ zur laminaren Flammengeschwindigkeit u_{lam} aufgetragen.

Das Diagramm wird durch verschiedene Geraden in einzelne Bereiche (Verbrennungsregime) aufgeteilt. Ist die Turbulenz-Reynolds-Zahl $Re_T < 1$, so findet eine laminare Verbrennung statt. Der restliche Bereich der turbulenten Verbrennung wird mit Hilfe zweier weiterer Kennzahlen unterteilt. Die „turbulente Karlovitz-Zahl“ ist gleich dem Quotienten aus Flammenzeit τ_{flam} und dem Kolmogorov-Zeitmaß und beschreibt den Einfluß der Flammenstreckung der Flammenfront durch die kleinsten Wirbel des Turbulenzspektrums (mit

Durchmesser in der Größenordnung des Kolmogorov-Längenmaßes):

$$Ka_T = \frac{\tau_{\text{flam}}}{\sqrt{\frac{\nu}{\tilde{\epsilon}}}} \quad . \tag{4.28}$$

Die „turbulente Damköhler-Zahl“ beschreibt das Verhältnis von integralem Zeitmaß zu charakteristischem Zeitmaß der Reaktionskinetik (Flammenzeit) und liefert somit ein Beurteilungskriterium für die Annahme der „sehr schnellen Chemie“ :

$$Da_T = \frac{\left(\frac{\tilde{k}}{\tilde{\epsilon}}\right)}{\tau_{\text{flam}}} \quad . \tag{4.29}$$

Anhand der Werte dieser beiden Kennzahlen und der turbulenten Reynolds-Zahl ergeben sich folgende Verbrennungs-Regime :

1) In dem Bereich

$$Re_T = \frac{u' \cdot l_{int}}{\nu} \cong \frac{u' \cdot l_{int}}{u_{\text{lam}} \cdot \delta_{\text{lam}}} < 1$$

ist die Bewegung des Fluids durch die überwiegenden viskosen Kräfte gekennzeichnet und es findet eine laminare Verbrennung statt.

Der restliche Bereich des Borghi-Diagramms beschreibt die turbulente Verbrennung. Er wird seinerseits in folgende Bereiche weiter unterteilt:

2) In dem Bereich $u'/u_{\text{lam}} < 1$ ist der Einfluß der Turbulenz auf die Reaktionskinetik gering. Die laminare Flammendicke ist kleiner als der Durchmesser der kleinsten Wirbel des Turbulenzspektrums. Die Flammenfront verhält sich wie eine sehr dünne materielle Oberfläche, die durch die Wirbel gestreckt und gekrümmt wird, aber in ihrer inneren Struktur (identisch mit der Struktur der laminaren Flamme) nicht gestört wird. Die Turbulenzgeschwindigkeit u', interpretiert als Rotationgeschwindigkeit der größten Wirbel des Turbulenzspektrums, ist kleiner als die laminare Flammengeschwindigkeit und reicht nicht aus, um der Flammenfront diese Drehbewegung aufzuprägen. Durch den stochastischen Charakter der Turbulenz liegt somit ein Ensemble zusammenhängender, gewinkelter, laminarer Flammenfronten vor. Dieses Regime wird deshalb als Regime der „gewinkelten, laminaren Flammenfronten“ (engl. „wrinkled flame regime“) oder auch als „single flame sheet“-Regime bezeichnet.

3) Der benachbarte Bereich in Richtung steigender Werte von u'/u_{lam} ist gekennzeichnet durch die Bedingungen $Re_T > 1$ (turbulente Verbrennung), $Da_T > 1$ („schnelle Chemie“), $u'/u_{\text{lam}} > 1$ und $Ka_T < 1$ (ausreichend geringe Flammenstreckung). Die laminaren Flammenfronten werden durch die höhere Rotationsgeschwindigkeit der größten Wirbel mitgeführt und stark gefaltet. Durch die Faltung kommt es lokal zu Berührungen und damit zur gegenseitigen Zerstörung der laminaren Flammenoberfläche. Die Flammenfront wird zum Teil aufgerissen, es entstehen „Inseln“ von unverbranntem Gemisch in der verbrannten Zone und umgekehrt, Inseln verbrannten Gemisches, die ausschließlich von unverbranntem Gemisch umgeben sind. Als charakteristisches Längenmaß für die Größe der Inseln verbrannten Gemisches in dem unverbrannten Gasgemisch wird das „Gibson-Längenmaß“ eingeführt:

$$l_G = \left(\frac{u_{\text{lam}}}{u'}\right)^3 \cdot l_{int} \quad . \tag{4.30}$$

Es entspricht dem Durchmesser jener Wirbel des Turbulenzspektrums, deren Rotationsgeschwindigkeit gleich der laminaren Flammengeschwindigkeit ist. Damit ist auch der Wertebereich des Gibson-Längenmaßes begrenzt: An der Grenze des Regimes der gewinkelten Flammenfronten ($u'/u_{\mathrm{lam}} = 1$) erreicht das Gibson-Längenmaß seinen Maximalwert $l_{G,max} = l_{int}$, während der Grenzwert $Ka_T = 1$ bedeutet, daß die laminare Flammengeschwindigkeit gleich der Rotationsgeschwindigkeit der kleinsten und schnellsten Wirbel ist. Daraus ergibt sich der Minimalwert des Gibson-Längenmaßes $l_{G,min} = l_K$ [20].

Die Wirbel von der Größe des Kolmogorov-Längenmaßes l_K sind größer als die laminare Flammendicke und damit zu groß, um in die Reaktionsschicht einzudringen und die Flammenstruktur zu stören, die weiterhin mit der der laminaren Flamme identisch ist. Dieser Bereich des Borghi-Diagramms stellt das Regime der „aufgerissenen laminaren Flammenfronten“ (engl. „corrugated flame regime“) dar, auch „multiple flame sheet“-Regime genannt.

In den beiden beschriebenen Bereichen des Borghi-Diagramms liegen lokal ungestörte laminare Flammenfronten vor. Sie bilden zusammen den Flamelet-Bereich der turbulenten Verbrennung. Die Gerade, die den Flamelet-Bereich in Richtung höherer Turbulenzintensitäten abgrenzt, ist durch das Klimov-Williams-Kriterium gegeben:

$$Ka_T = \frac{\tau_{\mathrm{flam}}}{t_K} = \frac{\delta_{\mathrm{lam}}^2}{l_K^2} = 1 \qquad . \tag{4.31}$$

Im Flamelet-Bereich, in dem die Zeitskalen der Reaktionskinetik kleiner sind als die kleinsten Zeitskalen der Turbulenzbewegung (Kolmogorov-Zeitmaß) und gleichzeitig viel kleiner als die Zeitskalen der Konvektions- und Diffusionsprozesse, findet die chemische Umsetzung in dünnen Schichten statt, deren Struktur im Prinzip eindimensional ist und mit der Struktur einer laminaren, gestreckten und gekrümmten Vormischflamme identisch ist [20].

Diese dünnen Reaktionsschichten sind jedoch gleichzeitig der Schwankungsbewegung des turbulenten Strömungsfeldes ausgesetzt. Unter diesen Voraussetzungen kann angenommen werden, daß die turbulente Flamme aus einem statistischen Ensemble gewinkelter, laminarer Flammen besteht (Flamelet-Hypothese).

4) In dem darauf folgenden Bereich, gegeben durch die Bedingungen ($Re_T > 1, Da_T > 1$ und $Ka_T > 1$), können die kleinsten Wirbel mit Durchmessern von der Größenordnung des Kolmogorov-Längenmaßes in die Reaktionszone der Dicke $\delta_{\mathrm{lam}} > l_K$ eindringen und die Reaktionszone verbreitern. Die kleinsten Wirbel erzeugen die höchste Flammenstreckung und dies kann lokal zur Flammenverlöschung führen. Diese kleinsten Wirbel sorgen gleichzeitig für eine rapide Durchmischung von verbranntem und unverbranntem Gemisch, d. h. zur Bildung von Zonen eines fast homogenen Gemisches von verbrannten und unverbrannten Gasen. Diese Zonen haben eine Ausdehnung von etwa der Größe der kleinen Wirbel, durch die sie erzeugt werden, und sie stellen lokale ideale Rührreaktoren dar. Die sehr schnelle Chemie (hohe Damköhler-Zahl) führt andererseits lokal zur Entstehung von dünnen Reaktionszonen [20]. Ein dynamisches Gleichgewicht von Produktion und Dissipation der Flammenoberfläche in der zerklüfteten Flammenfront stellt sich ein. Deshalb wird dieses Verbrennungsregime als Regime der „verteilten Reaktionszonen“ (engl. „distributed reaction zones“) genannt. Die Struktur der laminaren Flammenfront in diesem Verbrennungsregime ist zum Teil zerstört.

5) Der verbleibende Bereich im Borghi-Diagramm ist gekennzeichnet durch die Bedingungen ($Re_T > 1,\ Da_T < 1,\ Ka_T > 1$). Darin ist die Reaktionskinetik langsamer als der turbulente Mischungsprozeß und somit der geschwindigkeitsbestimmende Prozeß. Die

Verbrennung findet in einem lokal homogenen, „vorgemischten“ System statt. Eine Wechselwirkung von Turbulenz und Reaktionskinetik findet nicht statt und die Turbulenz liefert auch keinen charakteristischen Längen- oder Zeitmaßstab. Dieser Bereich stellt das Verbrennungsregime des „idealen Rührreaktors“ dar.

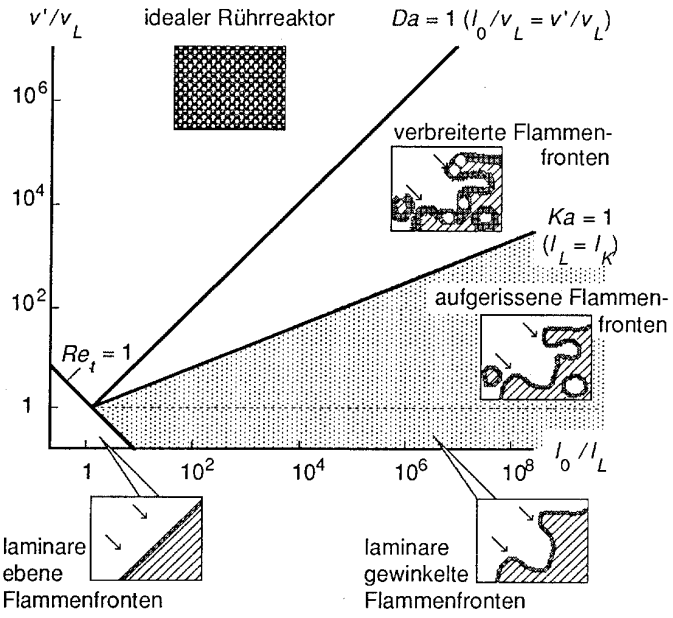

Abbildung 4.3: Darstellung der Verbrennungsregimes im Borghi-Diagramm

In Abb. 4.3 sind die Regimes der turbulenten Verbrennung in dem Borghi-Diagramm graphisch dargestellt.

Die klassische Unterteilung der turbulenten Verbrennungsprozesse anhand der drei Kennzahlen Re_T, Ka_T und Da_T mit den oben angegebenen Grenzwerten wurde in verschiedenen Untersuchungen überprüft und in der Qualität der Aussagen bestätigt. Nach Poinsot, Veynante und Candel [37] sollte der Flamelet-Bereich erweitert werden, und zwar über den Bereich hinaus, welchen das Klimov-Williams-Kriterium vorschreibt. In dem von ihnen definierten „erweiterten“ Flamelet-Bereich ist die Annahme der lokalen laminaren Struktur der lokalen Flammenfront weniger restriktiv gehandhabt, die Annahme der Flammenfront als sehr dünne Reaktionsschicht zwischen unverbranntem und vollständig verbranntem Gasgemisch bleibt unverändert. Nach deren Definition findet eine turbulente vorgemischte Verbrennung in dem „erweiterten“ Flamelet-Regime dann statt, wenn jede Verbindungslinie zwischen einem Punkt im unverbrannten Gasgemisch mit einem Punkt im vollständig verbrannten Gemisch mindestens eine aktive Flammenfront durchquert. Dies bedeutet, daß das Kimov-Williams-Kriterium ein strenges Limit darstellt, das eine Verbrennung in dem „klassischen“ Flamelet-Regime der quasi-laminaren Flammenfronten sicherstellt. Das Flamelet-Konzept ist jedoch auch in dem Grenzgebiet zum benachbarten Bereich der aufgerissenen Flammenfronten eingeschränkt einsetzbar.

4.3.2 Die Regimes der Verbrennung in Ottomotoren

Die Anwendung eines Flamelet-Verbrennungsmodells bei der Simulation der Verbrennung in einem Ottomotor ist mit der Erfüllung der Voraussetzungen des Flamelet-Regimes verbunden. Diese Voraussetzungen (bezüglich der Verhältnisse von Längen- und Zeitskalen von Reaktionskinetik und Turbulenz) wurden im letzten Abschnitt beschrieben. Nun soll die Erfüllung dieser Voraussetzungen in einem Ottomotor anhand von Erkenntnissen behandelt werden, die aus experimentellen Untersuchungen gewonnenen wurden.

Der Verbrennungsprozeß in einem Ottomotor beginnt mit dem Zündvorgang in einer Funkenentladung, gefolgt von der quasi-laminaren Ausbreitung eines kleinen Flammenkerns in dem turbulenten Strömungsfeld in der Umgebung der Zündkerze. Mit dem Wachstum dieses Flammenkerns erfolgt eine gleichzeitige Umwandlung in eine turbulente Flamme, die sich in dem Brennraum des Motors ausbreitet und schließlich an den Wänden oder Spalten des Brennraums verlöscht.

Die Funkenentladung erzeugt in einem Zeitraum von Bruchteilen einer Mikrosekunde einen Flammenkern mit einem Durchmesser von etwa 1 mm zwischen den Elektroden der Zündkerze. Die Größe des Flammenkerns hängt von der Energiemenge ab, die von dem Zündsystem bereitgestellt wird. Die Temperatur im Flammenkern liegt im Bereich von etwa 60000 K, und der sich daraus ergebende Temperaturgradient führt zu einer schnellen Aufheizung des Gasgemisches und der Elektroden der Zündkerze. Die hohe Temperatur führt zu einer schnellen chemischen Umsetzung des brennfähigen Gemisches. Schlieren-Aufnahmen belegen, daß sich innerhalb von ca. 300 μs eine Flamme ausgebildet hat, die sich anfänglich kugelförmig laminar ausbreitet [39]. Dabei spielt die Streckung der Flamme durch die starke Krümmung der Flammenfront und u.U. auch durch die Turbulenzintensität und die Inhomogenität des Strömungsfeldes eine wichtige Rolle. Im ungünstigsten Fall kann der Flammenkern ausgelöscht werden, aber in jedem Fall wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit gemäß (Gl. 4.16) verändert. Selbstverständlich wird diese Flammenausbreitung durch die lokale Flammenverlöschung in der unmittelbaren Nähe fester Wände begrenzt.

Der Flammenkern kann durch Konvektion von der Zündkerze weg bewegt werden. Die Lage des Flammenkerns wird in erster Linie durch die Hauptströmung in der Umgebung der Zündkerze bestimmt. Der Effekt von Drall und Tumble, soweit vorhanden, macht sich an dieser Stelle sowohl über die Hauptströmung in der Umgebung der Zündkerze als auch über die Turbulenz, die beim Zerfall des Tumbles entsteht, bemerkbar. Die Konvektion des Flammenkerns wird jedoch mit zunehmender Größe des Flammenkerns (ab etwa 10 mm Flammenkerndurchmesser) unbedeutend [39].

Mit dem Wachstum des Flammenkerns findet ein kontinuierlicher Übergang von der ursprünglich quasi-laminaren Flammenausbreitung zur voll turbulenten Flammenfortpflanzung statt. Dieser Wandlungsprozeß ist im Regelfall bereits abgeschlossen wenn der Flammenkernradius größer ist als etwa 5 mm. Bei niedrigen bis mittleren Drehzahlen (1500 bis 3000 min^{-1}) beträgt das dafür notwendige Zeitintervall zwischen 5 und 10° KW.

Die turbulente Verbrennung findet, zumindest für den Bereich der niedrigen Drehzahlen ($n \leq 2000$ min^{-1}), im Flamelet-Regime (gemäß dem Klimov-Williams-Kriterium) und im Bereich der mittleren Drehzahlen (2000 bis ca. 3000 min^{-1}) im erweiterten Flamelet-Bereich statt.

Nach Heywood [39] sind folgende Werte typisch für die charakteristischen Längen und

Zeitskalen eines Ottomotors bei einer Drehzahl von 1500 min^{-1} und stöchiometrischer Mischung :

Turbulenzgeschwindigkeit:	$u' = 2$ m/s
turbulente Reynolds-Zahl:	$Re_T = 300$
turbulente Damköhler-Zahl:	$Da_T = 20$
turbulente Karlovitz-Zahl:	$Ka_T = 0{,}2$
integrales Längenmaß:	$l_{int} = 2$ mm
Taylor-Längenmaß:	$l_T = 0{,}7$ mm
Kolmogorov-Längenmaß:	$l_K = 0{,}03$ mm
Gibson-Längenmaß:	$l_G = 0{,}2$ mm
laminare Flammendicke:	$\delta_{\text{lam}} = 0{,}02$ mm
laminare Flammengeschwindigkeit:	$u_{\text{lam}} = 0{,}5$ m/s
mittlerer Krümmungsradius der turbulenten Flamme:	$R_{\text{F}} = 2$ mm

Damit ist zumindest für den genannten Bereich niedriger Drehzahlen sichergestellt, daß der ottomotorische Verbrennungsprozeß im Flamelet-Regime abläuft und daß damit die Voraussetzung für die Anwendbarkeit eines Flamelet-Modells erfüllt ist.

Die vorliegende Arbeit beschränkt sich auf die Berechnung der Verbrennung und Schadstoffbildung im Flamelet-Bereich. Dafür wurden die Betriebspunkte der zu berechnenden Motoren so gewählt, daß eine Verbrennung im Flamelet-Regime gewährleistet ist. Zusätzlich wurden alle relevanten Längen- und Zeitskalen in jedem Punkt des Brennraums und zu jedem Zeitschritt berechnet. Um die Datenmenge zu begrenzen, wurden Längen- und Zeitskalen räumlich gemittelt und in der jeweils geeignet erscheinendenen Form ausgegeben (d.h. Mittelung über den gesamten Brennraum, über die Flammenfront oder über das unverbrannte Gemisch, s. Kap.6 „Ergebnisse“).

Die Mittelwerte dieser Längen- und Zeitskalen, dargestellt als Funktionen der Zeit bzw. des Kurbelwinkels, gewähren einen tieferen Einblick in die Absolutwerte und die Größenverhältnisse dieser charakteristischen Längen- und Zeitskalen der turbulenten Verbrennung, und sie bestätigen gleichzeitig die Verbrennung in dem Flamelet-Regime, die Voraussetzung der korrekten Anwendung des Flamelet-Modells.

4.3.3 Berechnung der Mittelwerte der Massenbrüche der chemischen Spezies

Wie in Kap. 2 beschrieben, ist das Differentialgleichungssystems für die Mittelwerte der Strömungsvariablen (System der Reynolds-Gleichungen) auch nach Erweiterung um ein Turbulenzmodell zur Berechnung der Korrelationen zweier beliebiger Strömungsvariablen nicht in sich geschlossen, wenn die mittlere chemische Zusammensetzung des Gasgemisches nicht bestimmt ist.

In dem Flamelet-Regime jedoch können die Mittelwerte der Massenbrüche sämtlicher chemischen Spezies durch statistische Mittelwertbildung aus den Werten der Massenbrüche derselben Spezies in der laminaren Flamme berechnet werden.

Die Werte der Massenbrüche in der laminaren Flamme sind Funktionen von Reaktionsfortschrittsavariable c, Äquivalenzverhältnis Φ, dem Druck p, der Temperatur des unverbrannten Gases T_{unb} und der Flammenstreckung χ. Somit muß die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. „probability density function“, kurz pdf) des Auftretens eines Zu-

standes charakterisiert durch die Variablen $(c, \Phi, p, T_{\text{unb}}, \chi)$ bei vorgegebenen Mittelwerten $\left(\tilde{c}, \tilde{\Phi}, \overline{p}, \tilde{T}_{\text{unb}}, \tilde{\chi}\right)$ modelliert werden, um den Mittelwert des Massenbruchs einer Spezies i zu berechnen:

$$\tilde{w}_i\left(\tilde{c}, \tilde{\Phi}, \overline{p}, \tilde{T}_{\text{unb}}, \tilde{\chi}\right) = \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty w_i\left(c, \Phi, p, T_{\text{unb}}, \chi\right)$$

$$P\left(c, \Phi, p, T_{unb}, \chi\ ;\ \vec{c}, \vec{\Phi}, \overline{p}, \vec{T}_{\text{unb}}, \vec{\chi}\right) dc\ d\Phi\ dp\ dT_{\text{unb}}\ d\chi \quad . \tag{4.32}$$

Glücklicherweise ist dieses so komplex aussehende Mittelungsverfahren wegen der einfachen Form der pdf und der linearen Interpolation relativ einfach und rechenzeitgünstig durchzuführen:

1) Die Verbrennung im Flamelet-Regime gewährleistet, daß die laminare Flammenfront sehr viel dünner ist als die Ausmaße des Volumenelements (die „Zelle“ des Rechengitters). Dabei ist $\delta_{\text{lam}} \cong 10^{-5}$ m und $\delta_{mesh} \cong 10^{-3}$ m. Das bedeutet, daß ein ganz kleiner, vernachlässigbarer Anteil der Zelle von der Flammenfront eingenommen wird, während der Rest ausschließlich durch verbranntes oder durch unverbranntes Gasgemisch eingenommen wird. Damit ist die Wahrscheinlichkeit für einen beliebigen Punkt im Brennraum, sich zu einem gegebenen Zeitpunkt innerhalb der momentanen quasi-laminaren Flammenfront zu befinden, sehr gering. Die Wahrscheinlichkeit, sich im unverbrannten, bzw. im vollständig verbrannten Gasgemisch zu befinden, ist sehr hoch. Das ergibt mathematisch ausgedrückt

$$w_i\left(c, \Phi, p, T_{\text{unb}}, \chi\right) \cong (1-\tilde{c})\cdot\delta\left(c\right)\cdot w_i\left(0, \Phi, p, T_{\text{unb}}, \chi\right) + \tilde{c}\cdot\delta\left(1-c\right)\cdot w_i\left(1, \Phi, p, T_{\text{unb}}, \chi\right)\ . \tag{4.33}$$

Durch die Eigenschaft der turbulenten Vormischflamme, im Flamelet-Regime sehr dünne Flammenfronten in jeder einzelnen Realisation aufzuweisen, ist der Mittelwert des Massenbruchs einer Spezies von dem exakten Verlauf des Massenbruchs in der laminaren Flammenfront unabhängig. Zur Berechnung des Mittelwertes reichen zwei Werte dieses Massenbruches (der Wert im unverbrannten Gemisch und jener im vollständig verbrannten Gemisch). Das verringert die einzulesende Datenmenge aus der Flamelet-Bibliothek um den Faktor 25, und gleichzeitig wird die Integration über die Doppel-Dirac-Delta-pdf zur einfachen linearen Interpolation über den Mittelwert der Reaktionsfortschrittsvartiablen:

$$\tilde{w}_i\left(\tilde{c}, \Phi, p, T_{\text{unb}}, \chi\right) = (1-\tilde{c})\cdot\delta\left(c\right)\cdot w_i\left(0, \Phi, p, T_{\text{unb}}, \chi\right) + \tilde{c}\cdot\delta\left(1-c\right)\cdot w_i\left(1, \Phi, p, T_{\text{unb}}, \chi\right)\ . \tag{4.34}$$

Zwar ist ein genaueres, wenn auch komplizierteres Mittelungsverfahren denkbar, das den geringen Anteil der quasi-laminaren Flammenfrontdicke an dem Elementarvolumen der Finite-Volumen-Berechnung berücksichtigt (z.B. eine Beta-pdf), doch wäre der damit verbundene bedeutende Mehraufwand an Rechenzeit in kaum einer Weise gerechtfertigt.

2) Die Abweichungen des Äquivalenzverhältnisses, des Drucks und der Temperatur des unverbrannten Gasgemisches von dem jeweiligen Mittelwert sind in erster Reihe durch die zyklischen Schwankungen gegeben und in sehr viel geringerem Ausmaß durch die Turbulenz. Es läßt sich jedoch leicht zeigen, daß der Mittelwert des Massenbruchs einer chemischen Spezies, berechnet durch lineare Interpolation zwischen zwei Werten, die aus der Flamelet-Bibliothek eingelesen werden, unabhängig von der Form der pdf ist und somit unabhängig von der Statistik der auftretenden Schwankungen. Das wird hier für eine der drei Variablen $\Phi,\ p,\ T_{\text{unb}}$ (z.B. für p) bewiesen.

Es seien p und $\overline{p}$ der Momentanwert und der Mittelwert des Drucks, p_{min} und p_{max} zwei nebeneinanderliegende Eckwerte aus der Flameletbibliothek, so daß $p_{min} \leq \overline{p} < p_{max}$. Es gilt

$$w_i\left(c, \Phi, p, T_{\mathrm{unb}}, \chi\right) = \left(1 - \frac{p - p_{min}}{p_{max} - p_{min}}\right) \cdot w_i\left(c, \Phi, p_{min}, T_{\mathrm{unb}}, \chi\right) \; + \\ \frac{p - p_{min}}{p_{max} - p_{min}} \cdot w_i\left(c, \Phi, p_{max}, T_{\mathrm{unb}}, \chi\right) \tag{4.35}$$

Durch Einsetzen von (Gl. 3.35) in (Gl. 3.32) und Verwenden von Normierungsbedingung und der Definition des Mittelwertes folgt

$$\tilde{w}_i\left(c, \Phi, \overline{p}, T_{\mathrm{unb}}, \chi\right) = \left(1 - \frac{\overline{p} - p_{min}}{p_{max} - p_{min}}\right) \cdot w_i\left(c, \Phi, p_{min}, T_{\mathrm{unb}}, \chi\right) \; + \\ \frac{\overline{p} - p_{min}}{p_{max} - p_{min}} \cdot w_i\left(c, \Phi, p_{max}, T_{\mathrm{unb}}, \chi\right) \qquad . \tag{4.36}$$

Für jede der Variablen $\Phi,\ p,\ T_{\mathrm{unb}}$ wird dieses Verfahren der Reihe nach angewendet, und das Ergebnis ist eine lineare Interpolation im dreidimensionalen Raum $(\tilde{\Phi}, \overline{p}, \tilde{T}_{\mathrm{unb}})$ zwischen den benachbarten Eckwerten der Mittelwerte dieser Variablen in der Flamelet-Bibliothek.

3) Die letzte Variable, die Flammenstreckung χ, bereitet durch die komplexen Auswirkungen auf die Reaktionskinetik erhebliche Schwierigkeiten und erfordert einen erhöhten Aufwand an Modellierung und gleichzeitig vereinfachende Annahmen. Dieser beginnt damit, daß im Unterschied zu den anderen Variablen bei der Berechnung des Mittelwerts der Flammenstreckung der Einfluß der unterschiedlich großen und unterschiedlich schnell drehenden Wirbel des Turbulenzspektrums auf die Flammenoberfläche in geeigneter Weise berücksichtigt werden muß. Darüber hinaus muß gleichzeitig der Breitag der Krümmung der gemittelten Flammenoberfläche und der Beitrag der Inhomogenität der Hauptströmung berücksichtigt werden. Bei der Modellierung dieser drei Beiträge wurde der Analyse von Candel et al. [40] weitgehend gefolgt.

Der Momentanwert der Flammenstreckung, ausgehend von dem Ausdruck von Candel und Poinsot (Gl. 3.12), wird Favre-gemittelt und in drei Glieder aufgeteilt, die den drei vorher genannten Beiträgen entsprechen:

$$\tilde{\chi} = \tilde{\chi}_M + \tilde{\chi}_T + \tilde{\chi}_K \qquad . \tag{4.37}$$

Diese Terme werden folgendermaßen modelliert:

a) Der Beitrag der Inhomogenität der Hauptströmung

$$\tilde{\chi}_M = \left(\delta_{ij} - \tilde{n}_{F,i} \cdot \tilde{n}_{F,j} - \widetilde{n''_{F,i} n''_{F,j}}\right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \qquad , \tag{4.38}$$

wobei die Korrelation $\widetilde{n''_{F,i} n''_{F,j}}$ der Komponenten i und j des äußeren Flammenoberflächenversors $\vec{n}_F$ gemäß der Isotropie-Hypothese von Cant et al. [41] modelliert wird:

$$\widetilde{n'_{F,i} n'_{F,j}} = \frac{\delta_{ij}}{3} \cdot \left(1 - \tilde{n}_{F,i} \tilde{n}_{F,j}\right) \qquad . \tag{4.39}$$

b) Der Beitrag der Turbulenz zur mittleren Flammenstreckung ist wegen der unterschiedlichen Beiträge der Wirbel des Turbulenzspektrums zur Flammenstreckung der am schwierigsten abzuschätzende Term. Durch direkte numerische Simulation fand Pope [33] heraus, daß die Streckung einer unendlich dünnen materiellen Oberfläche in relativ schwacher Turbulenz durch die Beziehung

$$\tilde{\chi}_T = 0,28 \cdot \sqrt{\frac{\tilde{\epsilon}}{\nu}} \tag{4.40}$$

beschrieben wird. Dies ist in etwa der Beitrag der kleinsten Wirbel (von der Größe der Kolmogorov-Wirbel) zur Flammenstreckung. Der Ausdruck (Gl. 4.40) überschätzt jedoch die Flammenstreckung deutlich, weil die Wirkung dieser kleinsten Wirbel nicht ausreicht, um die Flammenfront merklich zu falten [37,40]. Eine alternative Beziehung zur Bestimmung des Beitrags der Turbulenz zur mittleren Flammenstreckung ist nach der Modellierung von Candel et al. [40] oder Cheng und Diringer [42] den Beitrag der größten Wirbel des Turbulenzspektrums zu berücksichtigen:

$$\tilde{\chi}_T = C_\chi \cdot \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \quad , \tag{4.41}$$

wobei C_χ eine Modellkonstante der Größenordnung 1 ist. Diese Beziehung liefert eine gute Abschätzung der Flammenstreckung durch die Turbulenz nur im Inneren der Strömung. In der unmittelbaren Nähe fester Wände wird die so berechnete Flammenstreckung unendlich groß ($\tilde{\epsilon}/\tilde{k} \to \infty$; Ursache des Kollaps der Eddy-Break-Up-Modelle in der Nähe einer festen Wand).

Es kann jedoch leicht gezeigt werden, daß die beiden Ausdrücke (Gl. 4.40) und (Gl. 4.41) die Grenzwerte des folgenden Ausdrucks sind:

$$\tilde{\chi}_T = 0,28 \cdot \sqrt{\frac{\tilde{\epsilon}}{\nu + \nu_T}} \quad . \tag{4.42}$$

Wenn im Inneren der Strömung, weit weg von der Wand, die turbulente Zähigkeit viel größer ist als die molekulare Zähigkeit, $\nu_T = C_\mu \cdot \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \gg \nu$, dann gilt

$$\tilde{\chi}_T \to 0,967 \cdot \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \quad ,$$

also (Gl. 4.41) mit $C_\chi = 0,967$. Für den anderen Grenzfall, wenn in der Nähe einer festen Wand $\nu_T \ll \nu$, gilt

$$\tilde{\chi}_T = 0,28 \cdot \sqrt{\frac{\tilde{\epsilon}}{\nu}} \quad ,$$

d.h. genau (Gl. 4.40).

Die Beziehung (Gl. 4.42) wurde in der vorliegenden Arbeit angewendet. Sie stellt eine Notlösung dar und versucht, die Vorteile der beiden in der Literatur gängigen Modellierungsansätze zu vereinen und deren offenkundige Schwächen zu überbrücken. Es wurden im Verlauf der Arbeit, nach kritischer Überprüfung, keine Hinweise gefunden, die diesen Ansatz in Frage stellen oder gar widerlegen. Es ist jedoch mit Sicherheit notwendig, einen aus physikalischen Gesetzmäßigkeiten abgeleiteten Modellierungsansatz anzuwenden, sobald ein

solcher Ansatz in der Fachliteratur zur Verfügung stehen wird, wobei der numerische Aufwand, den ein solcher Ansatz erfordert, eine zentrale Rolle bei der praktischen Anwendung des turbulenten Verbrennungsmodells spielt.

c) Der Beitrag der Krümmung der mittleren Flammenfront ist eher unproblematisch, wenn man davon ausgeht, daß die turbulente Flamme sich lokal mit der Flammengeschwindigkeit der gestreckten und gekrümmten, laminaren Flamme $u_{\mathrm{lam}}\left(\tilde{\Phi}, \overline{p}, \tilde{T}_{\mathrm{unb}}, \tilde{\chi}\right)$ ausbreitet und der erhöhte Umsatz der turbulenten Flamme auf die erhöhte Flammenoberfläche der gewinkelten laminaren Flammenfronten zurückzuführen ist:

$$\tilde{\chi}_K = u_{\mathrm{lam}} \cdot \mathrm{div}\left(\widetilde{\overrightarrow{n}_{\mathrm{F}}}\right) = u_{\mathrm{lam}} \cdot \left(\frac{1}{\tilde{R}_{F,1}} + \frac{1}{\tilde{R}_{F,2}}\right) = u_{\mathrm{lam}} \cdot \frac{2}{\tilde{R}_F} \quad , \tag{4.43}$$

wobei $\tilde{R}_{F,1}$ und $\tilde{R}_{F,2}$ die Hauptkrümmungsradien der mittleren Flammenfront sind bzw. $\tilde{R}_F$ der mittlere Krümmungsradius der gemittelten Flammenfront ist. In der ersten Phase der Verbrennung, ca. 5 °KW nach der Zündung, kann die Flammenfront als eine Kugel angesehen werden, so daß $\tilde{R}_{F,1} = \tilde{R}_{F,2} = \tilde{R}_{F,}$. Die exakte Berechnung des Beitrags der Krümmung aus der Divergenz der Normalenversors zur mittleren Flammenoberfläche erfolgt gemäß

$$\chi_K = u_{\mathrm{lam}} \cdot \mathrm{div}\left(\widetilde{\overrightarrow{n}_F}\right) = -u_{\mathrm{lam}} \cdot \frac{\Delta\left(\tilde{c}\right)}{\left|\mathrm{grad}\left(\tilde{c}\right)\right|} \quad . \tag{4.44}$$

Der Beitrag der Krümmung der mittleren Flammenoberfäche zur Flammenstreckung wird mit wachsendem Flammenkernradius stetig geringer, so daß er sich nach ca. 20 bis 30 °KW nach der Zündung, wenn der Flammenkernradius 10 mm überschritten hat, auf weniger als den 20. Teil des ursprünglichen Wertes verringert und er praktisch jede Bedeutung verliert.

Die exakte Berechnung des Beitrags der Krümmung aus der Divergenz des Normalenversors zur mittleren Flammenoberfläche und des Beitrags der Inhomogenität der Hauptströmung sind jedoch sehr rechenzeitintensiv. Sie erfordern die Berechnung der räumlichen Ableitungen der Komponenten der Normalenversors zur mittleren Flammenfront und damit die Implementierung dreier zusätzlicher Transportgleichungen (für die drei Komponenten der Normalenversors). Dies wurde auch durchgeführt, aber gleichzeitig wurde mit Hinblick auf eine mögliche spätere Nutzung in der Motorenentwicklung außerhalb einer Forschungsstation auch die rechenzeitgünstige Berechnung des Beitrages der Krümmung zur Flammenstreckung ermöglicht. Eine einfache Abschätzung des Krümmungsradius der Flammenfront aus dem Volumen der verbrannten Gase ist möglich, wenn dieses Volumen als Hemisphäre angesehen wird:

$$\tilde{R}_F \cong \left(\frac{3V_b}{2\pi}\right)^{\frac{1}{3}} \quad . \tag{4.45}$$

Der Beitrag der Inhomogenität der Hauptströmung wird vernachlässigt. Beide Varianten der Berechnung des Mittelwerts der Flammenstreckung wurden eingebaut und die Ergebnisse der Berechnungen wurden miteinander verglichen. Programmtechnisch wurde das so ausgeführt, daß zwischen den beiden Varianten leicht umgeschaltet werden kann, indem eine Variable in einer dem Anwender zugänglichen Eingabedatei auf 0 oder 1 gesetzt wird.

Nachdem die Berechnung des Mittelwerts der Flammenstreckung festgelegt ist, muß die pdf dieser Größe modelliert werden. Üblicherweise wird von einer logaritmisch-normalen Verteilung der Flammenstreckung mit konstanter Varianz [27] ausgegangen. Dies bringt jedoch einen gewaltigen numerischen Aufwand für die Berechnung der pdf und die Integration

über der pdf zur Berechnung der Mittelwerte der Massenbrüche der chemischen Spezies mit sich. Gleichzeitig spielt im Flamelet-Bereich die Flammenverlöschung keine nennenswerte Rolle und die Wahrscheinlichkeit des Auftretens einer Realisation mit sehr hoher, kritischer Flammenstreckung ist sehr gering und praktisch vernachlässigbar.

Unter diesen Umständen ist eine Vorgehensweise wie im Falle der drei Variablen Φ, p und T_{unb} bei der Flammenstreckung χ aus theoretischer Sicht zulässig und vom praktischen Standpunkt der Durchführbarkeit der Rechnungen der einzige zur Zeit praktikable Weg. Damit sind die Mittelwerte der Massenbrüche der chemischen Spezies nur von dem Mittelwert der Flammenstreckung abhängig.

Ursprünglich wurden für den Mittelwert der Flammenstreckung $\tilde{\chi}$ die beiden Verlöschungskriterien der laminaren Flamme (s. § 3.2.5) übernommen. Wenn $\tilde{\chi}$ den kritischen Wert χ_q überschreitet, tritt Verlöschung ein. Dieser Ansatz führt jedoch zur Flammenverlöschung in der unmittelbaren Umgebung stark verzerrter Zellen.

Der rein numerische Effekt einer starken Erhöhung der Turbulenzgrößen $\tilde{k}$ und $\tilde{\epsilon}$ in der Umgebung verzerrter Volumenelemente führt zum Überschreiten des kritischen Wertes χ_q. Diese verzerrten Zellen kommen durch Anpassung des Rechennetzes an eine schwierige Geometrieoberfläche zustande. Sie erweisen sich als ein schlecht gelungener Kompromiß des Netzherstellers zwischen numerischen Anforderungen an die Netzqualität und dem Wunsch der exakten Wiedergabe der Brennraumgeometrie. Der Einfluß dieses Effektes auf die Flammenausbreitung wird in Kap. 6 „Ergebnisse“ aufgezeigt.

Um eine von der Numerik verursachte Verlöschung zu unterbinden, wurde der Wert der kritischen Flammenstreckung in der vorliegenden Arbeit auf einen sehr hohen Wert gesetzt. Damit wurde das Modell der Flammenverlöschung außer Kraft gesetzt. Der Einfluß einer unterkritischen Flammenstreckung $\tilde{\chi}$ über die in der Flamelet-Bibliothek gespeicherten Werte der Massenbrüche bleibt erhalten.

4.3.4 Das Eingleichung-Verbrennungsmodell von H. G. Weller

Im letzten Abschnitt wurde die Vorgehensweise bei der Berechnung der Massenbrüche der chemischen Spezies beschrieben. Dabei ist die Angabe eines Modells für den Mittelwert der Reaktionsfortschrittsvariablen $\tilde{c}$ als letzte unbekannte Größe im System der Reynolds-Gleichungen notwendig. Ein Modell, das diesen Zweck erfüllt, also die turbulente Flammenausbreitung und Umsetzung der gebundenen chemischen Energie in Wärme räumlich und zeitlich wiedergibt, ist per Definition ein turbulentes Verbrennungsmodell.

Der übliche Ansatz zur Berechnung der Reaktionsfortschrittsvariablen $\tilde{c}\,(\vec{r},t)$ ist die Lösung einer Transportgleichung, wobei in der Regel von der Transportgleichung einer reaktiven Spezies (meistens ein Ausgangsstoff oder ein Reaktionsprodukt) ausgegangen wird. Durch Einsetzen der Definition der Reaktionsfortschrittsvariablen entsteht die Transportgleichung für $\tilde{c}\,(\vec{r},t)$, in welcher der chemische Quellterme modelliert wird. Die bekanntesten Modellierungsansätze für den chemischen Quellterm sind:

a) „Arrhenius-Ansatz“ mit angepaßten Reaktionsparametern:

$$\left(\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{c})}{\partial t}\right)_{\mathrm{chem}} = \overline{\rho}_{\mathrm{unb}}\cdot A_R\cdot\exp\left(-\frac{E_{A,R}}{R\tilde{T}}\right) \quad . \tag{4.46}$$

b) Eddy-Break-Up-Modelle (nach D. B. Spalding, 1970, 1976) beinhalten die Annahme einer schnellen Chemie und hoher Reynolds-Zahlen, gelten also für den Fall, daß die mittlere Reaktionsgeschwindigkeit ausschließlich durch den turbulenten Mischungsprozeß kontrolliert wird („gemischt ist gleich verbrannt"). Die Geschwindigkeit des Mischungsprozesses wird ihrerseits durch die Dissipation der TKE bestimmt. Das charakteristische Zeitmaß der chemischen Reaktion ist nach dieser Vorstellung die Zerfallszeit der größten Wirbel des Turbulenzspektrums, die dem integralen Zeitmaß $\tau_{int} = \tilde{k}/\tilde{\epsilon}$ gleichgesetzt wird. Dies ergibt

$$\left(\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{c})}{\partial t}\right)_{\text{chem}} = \overline{\rho}_{\text{unb}}\cdot A_{EBU}\cdot\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}\cdot\tilde{c}\cdot(1-\tilde{c}) \qquad . \tag{4.47}$$

c) Flammenflächenmodelle berechnen die Umsatzrate der chemischen Reaktion im turbulenten Strömungsfeld im Flamelet-Regime als Produkt der Umsatzrate der lokal laminar ablaufenden Verbrennung mit der Flammendichte. Die Flammendichte Σ wird definiert als die Oberfläche der gewinkelten, bzw. gefaltenen Flammenfront pro Volumeneinheit. Dies ergibt

$$\left(\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{c})}{\partial t}\right)_{\text{chem}} = \overline{\rho}_{\text{unb}}\cdot u_{\text{lam}}\left(\tilde{\Phi},\overline{p},\tilde{T}_{\text{unb}},\tilde{\chi}\right)\cdot\tilde{\Sigma} \qquad . \tag{4.48}$$

Das einfachste Modell dieser Klasse ist das Modell von Bray, Moss und Libby („BML-Modell") [43–45], welches für die Flammendichte eine algebraische Beziehung vorsieht:

$$\tilde{\Sigma} = g\frac{\tilde{c}\,(1-\tilde{c})}{\sigma_y L_y} \qquad , \tag{4.49}$$

wobei g eine Modell-Konstante der Größenordnung 1 ist, σ_y ein Orientierungsfaktor, der als Universalkonstante innerhalb des Modells gilt, und L_y ein charakteristisches Längenmaß für die Welligkeit der Flammenfront, das konstant über der turbulenten Flammenfront (als Umhüllende aller möglichen Realisationen der momentanen Flammenfront) ist und das üblicherweise gleich dem integralen Längenmaß angenommen wird.

Die Standardmodelle der Klasse der Flammendichtemodelle sind jedoch etwas komplexer. Sie lösen eine zusätzliche Transportgleichung für die Flammendichte $\tilde{\Sigma}$:

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{\Sigma})}{\partial t} + \frac{\partial\left(\overline{\rho}\cdot\tilde{u}_j\cdot\tilde{\Sigma}\right)}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_s}\cdot\frac{\partial\tilde{\Sigma}}{\partial x_j}\right) = \tilde{\chi}\cdot\tilde{\Sigma} - \beta_0\cdot\frac{F\left(u_{\text{lam}},u',Re_T\right)}{1-\tilde{c}}\cdot\tilde{\Sigma}^2 \quad . \tag{4.50}$$

Die bekanntesten Modelle dieser Klasse sind das Modell von Cant, Pope und Bray [41], das „Coherent Flame Model" von Candel et al. (mit drei unterschiedlichen Modellvarianten) [40], das Modell von Mantel und Borghi [46] und das von Cheng und Diringer [42]. Ein vergleichende Analyse dieser Modelle ist bei Poinsot [47] zu finden.

d) PDF-Modelle, in denen eine Transportgleichung für die zusammnegesetzte pdf der Reaktionsfortschrittsvariablen und des Geschwindigkeitsfeldes (engl. „velocity-composition joint pdf") mit Hilfe eines hybriden Finite-Volumen und Monte-Carlo-Verfahrens gelöst wird [48,49]. Durch diesen Ansatz kann der Modellierungsbedarf der turbulenten Austauschterme wesentlich verringert werden. Der große Nachteil dieser Methode ist der enorme numerische Aufwand zur Berechnung der pdf und zur anschließenden Mitelung der Strömungsvariablen in jeder Zelle des Strömungsgebietes. Dieser Aufwand ist für die vorgemischte Verbrennung im Flamelet-Regime nach Ansicht des Verfassers nicht gerechtfertigt. Einerseits, ist

die Form der pdf im Flamelet-Regime bekannt (annähernd Doppel-Dirac-Delta-pdf) und es wird nur der Mittelwert der Reaktionsfortschrittsvariablen benötigt, um den Mittelwert (und die pdf) einer jeden Strömungsvariablen mit guter Genauigkeit zu bestimmen. Andererseits ist der numerische Aufwand (Hauptspeicher und Rechenzeitbedarf) bei diesem Verfahren so gewaltig, daß zur Berechnung der pdf in einer motorischen Anwendung mit ca. 150 000 bis 300 000 Zellen bei der Kapazität der heutigen Höchstleistungsrechnern nur 100 bis 400 stochastische Partikel pro Zelle eingesetzt werden können. Das ist (sehr) viel zu wenig, um eine ausreichend exakte Form der pdf (Fehler in der Größenordnung 1 bis 3 %) zu berechnen, wie sie bei der Annahme einer Doppel-Dirac-Delta-pdf mit minimalem Rechenaufwand erfolgen. Daher erscheint die Anwendung von PDF-Modellen im Flamelet-Regime als (noch) nicht zweckmäßig. In dem „distributed reaction"-Regime jedoch kann dieser Modellierungsansatz vielleicht einen gangbaren Weg darstellen.

Das in der vorliegenden Arbeit angewendete Verbrennungsmodell, das Eingleichungs-Modell von H. Weller, gehört genau genommen keiner der oben angeführten Modell-Klassen an. Es hat jedoch gewisse Gemeinsamkeiten mit den Flammenflächendichte-Modellen und ist daher am ehesten dieser Modell-Klasse zuzurechnen.

Die Vorstellung, auf der das Modell begründet ist, hat mit jener der Flammenflächendichte-Modelle sehr große Ähnlichkeit: Eine sehr dünne (praktisch unendlich dünne) gewinkelte, quasi-laminare Flammenfront ist die Trennungsfläche zwischen verbranntem und unverbranntem Gasgemisch. Diese Flammenfront breitet sich mit laminarer Flammengeschwindigkeit ins unverbrannte Gasgemisch senkrecht zur lokalen Flammenoberfläche aus. Im Unterschied zu den Flammendichtemodellen wird nicht versucht, die Flammenflächendichte zu berechnen, sondern den Welligkeitsfaktor Ξ. Um diese neue Variable zu berechnen, wendet Weller die Technik der bedingungsgebundenen Mittelung nach Dopazo an [50]. Die Technik dieser Mittelung besteht darin, daß jede Strömungsvariable mit einer Indikatorfunktion multipliziert wird, welche im unverbrannten Gasgemisch per Konvention den Wert 0 annimmt und im verbrannten Gasgemisch den Wert 1 (oder auch umgekehrt); erst danach wird Favre-gemittelt.

Ξ stellt das Verhältnis der Flammenflächendichte (des gemittelten Flächeninhaltes der quasi-laminaren Flammenfront pro Volumeneinheit) zur projezierten Flammenfächendichte (der gemittelte Flächeninhalt der Projektion der quasi-laminaren Flammenfront auf die Ebene senkrecht zur mittleren Flammenausbreitungsrichtung pro Volumeneinheit) dar:

$$\Xi = \frac{\tilde{\Sigma}}{\tilde{\Sigma}_{Pr}} = \frac{\tilde{\Sigma}}{|\mathrm{grad}\,(\tilde{c})|} \quad . \tag{4.51}$$

Die Richtung der Projektionsebene in jedem Punkt der turbulenten Flamme ist durch den Mittelwert der Versoren zur quasi-laminaren Flammenfront gegeben:

$$\overrightarrow{\tilde{n}_F} = -\frac{\mathrm{grad}\,(\tilde{c})}{|\mathrm{grad}\,(\tilde{c})|} \quad . \tag{4.52}$$

Weller entwickelt für den Mittelwert der Reaktionsrückschrittsvariablen $\tilde{b} = 1 - \tilde{c}$ und für den Welligkeitsfaktor Ξ ein Paar von Transportgleichungen, das das Zweigleichungs-Verbrennungsmodell von Weller darstellt. Aus diesen Transportgleichungen wird unter Verwendung vereinfachender Annahmen bezüglich eines Gleichgewichts von Produktion und

Zerstörung der Flammenoberfläche, die Transportgleichung für den Mittelwert der Reaktionsrückschrittsvariablen abgeleitet, welche das Eingleichungs-Modell von Weller darstellt. Die Ableitung dieser Transportgleichung ist bei Weller [50] zu finden.

Die endgültige Transportgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariablen nach dem Eingleichungs-Verbrennungsmodell ist

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{c})}{\partial t}+\frac{\partial\left(\overline{\rho}\cdot\tilde{u}_j\cdot\tilde{c}\right)}{\partial x_j}-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_s}\cdot\frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_j}\right)=\overline{\rho}_{\mathrm{unb}}\cdot u_l\cdot\Xi\cdot\left|\mathrm{grad}\left(\tilde{c}\right)\right| \quad . \tag{4.53}$$

Typisch für dieses Verbrennungsmodell ist die Proportionalität des chemischen Quellterms zum Modul des Gradienten des Mittelwerts der Reaktionsfortschrittsvariablen. Das Modell ist noch nicht in sich geschlossen; die Vorgabe einer algebraischen Beziehung für den Welligkeitsfaktor ist nötig, um das Modell in sich zu schließen. Eine solche Beziehung ist nicht schwer zu finden, denn Ξ, das Verhältnis der Flammenfläche $\tilde{\Sigma}$ zur Flächendichte der Projektion der Flammenfront auf die Ebene senkrecht zur mittleren Flammenausbreitungsrichtung $\tilde{\Sigma}_{Pr}$, ist nach Damköhler gleichzeitig das Verhältnis der turbulenten Flammengeschwindigkeit u_T zur laminaren Flammenausbreitungsgeschwindigkeit u_{lam}:

$$\Xi=\frac{\tilde{\Sigma}}{\tilde{\Sigma}_{Pr}}=\frac{u_T}{u_{\mathrm{lam}}} \quad . \tag{4.54}$$

Für die turbulente Flammenausbreitungsgeschwindigkeit gibt es jedoch eine größere Anzahl von Beziehungen und Korrelationen sowohl empirischer und halbempirischer Art als auch theoretischer Natur, die zur Berechnung von Ξ verwendet werden können. Ein Beispiel einer theoretischen Beziehung ist der Ausdruck der turbulenten Flammengeschwindigkeit im „distributed reaction"-Regime von Pope und Anand [52]:

$$u_T=(0,25+\log_{10}\cdot Da_T)\cdot u' \quad . \tag{4.55}$$

Ein Beispiel einer empirischen Korrelation ist der Ansatz von Ö. Gülder, der für jedes der Regimes der turbulenten Verbrennung eine eigene Beziehung bietet, dabei aber die Grenzen der Regimes der turbulenten Verbrennung etwas verändert [51]:

1) für das Regime der gewinkelten Flammenfronten (bestimmt durch $l_K \geq 1,5\cdot\delta_{\mathrm{lam}}$ und $Re_T \leq 3200$) gilt

$$u_T=u_{\mathrm{lam}}\cdot\left(1+0,62\cdot\sqrt{\frac{u'}{u_{\mathrm{lam}}}}\cdot Re_T^{1/4}\right) \quad , \tag{4.56}$$

2) für das Regime der aufgerissenen Flammenfronten (bestimmt durch die Ungleichheiten $0,6\cdot\delta_{\mathrm{lam}} \geq l_K \leq 1,5\cdot\delta_{\mathrm{lam}}$ und $Re_T \leq 3200$) gilt

$$u_T\cong u_{\mathrm{lam}}\cdot\exp\left[0,4\cdot\sqrt{\frac{u'}{u_{\mathrm{lam}}}}\right]\cdot Re_T^{1/4} \quad , \tag{4.57}$$

3) für das Regime der verteilten Reaktionszonen, bestimmt durch die Ungleichheit $Da_T > 1$, gilt

$$u_T\cong u'\cdot\left(\frac{u_{\mathrm{lam}}}{u'}\right)^{\frac{3}{4}} \quad . \tag{4.58}$$

In der vorliegenden Arbeit wurde jedoch eine andere Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit gewählt, welche die gesamte Übergangsphase von der quasi-laminaren Ausbreitung kurz nach der Zündung bis zur sich voll turbulent ausbreitenden Flamme mit guter Genauigkeit beschreibt. Dies ist die Korrelation von R. Herweg; sie wird im folgenden Abschnitt behandelt.

4.3.5 Die Herweg-Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit

Die Flammenausbreitung im Ottomotor ist maßgeblich durch die Entflammungsphase geprägt und damit durch das komplexe Zusammenspiel von elektrischer Funkenzündung, Reaktionskinetik, Hauptströmung und Turbulenz. Die Einflußgrößen, die ein Modell zur Berechnung der Flammenkernbildung beinhalten muß, sind diejenigen Größen, die jedes der vorher genannten Phänomene einzeln beschreiben. In der Korrelation von Herweg sind folgende Einflußgrößen berücksichtigt [54]:

1) Energie, Leistung, Entladungsform und resultierende Temperaturverteilung des Zündfunkens; Elektrodenabstand und Wärmeverluste infolge des Kontakts des Zündfunkens mit den Elektroden und/oder der Brennraumwand,
2) Äquivalenzverhältnis, Druck, Temperatur, Restgasgehalt, Flammenstreckung,
3) die mittlere Strömungsgeschwindigkeit in der Umgebung der Zündkerze,
4) die Turbulenzgeschwindigkeit u' und die charakteristischen Längen- und Zeitskalen der Turbulenz (integrales Längen- und Zeitmaß),
5) Auftreten des Flammhaltereffekts (d.h. die Flamme bleibt an den Elektroden hängen).

Als einen Teil seines Modells zur Flammenkernbildung gibt Herweg folgende Korrelation für die turbulente Flammengeschwindigkeit an:

$$\frac{u_T}{u_{\mathrm{lam}}} = I_0 + I_0^{1/2} \left[\frac{\left(\tilde{u}^2 + u'^2\right)^{1/2}}{\left(\tilde{u}^2 + u'^2\right)^{1/2} + u_{\mathrm{lam}}} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{r_K}{l_{int}} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \cdot$$

$$\left[1 - \exp\left(-\frac{\left(\tilde{u}^2 + u'^2\right)^{1/2} + u_{\mathrm{lam}}}{l_{int}} \cdot (t - t_{ign}) \right) \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left(\frac{u'}{u_{\mathrm{lam}}} \right)^{\frac{5}{6}} \quad . \tag{4.59}$$

Darin ist I_0 der relative Änderung der laminaren Flammengeschwindigkeit durch die Flammenstreckung:

$$I_0 = \frac{u_{\mathrm{lam}}}{u_{\mathrm{lam},\chi=0}} = 1 - \frac{Ka_T}{Le} + \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \cdot \frac{Ka_T \cdot E_A}{2RT_{ad}} \quad . \tag{4.60}$$

Ist der Einfluß der Flammenstreckung bereits in $u_{\mathrm{lam}}\left(\tilde{\Phi}, \overline{p}, \tilde{T}_{\mathrm{unb}}, \tilde{\chi}\right)$ berücksichtigt, so wird $I_0 = 1$. Benutzt man weiter zur Abkürzung

$$T_{OG} = \frac{l_{int}}{\left(\tilde{u}^2 + u'^2\right)^{1/2} + u_{\mathrm{lam}}} \quad ,$$

so läßt sich diese Korrelation übersichtlicher gestalten:

$$\Xi = \frac{u_T}{u_{\text{lam}}} = 1 + \left[\frac{(\tilde{u}^2 + u'^2)^{1/2}}{(\tilde{u}^2 + u'^2)^{1/2} + u_{\text{lam}}}\right]^{\frac{1}{2}} \sqrt{1 - \exp\left(-\frac{r_K}{l_{int}}\right)} \cdot$$

$$\sqrt{1 - \exp\left(-\frac{t - t_{ign}}{T_{OG}}\right)} \cdot \left(\frac{u'}{u_{\text{lam}}}\right)^{\frac{5}{6}} \quad . \tag{4.61}$$

Die Einführung der mittleren Strömungsgeschwindigkeit $\tilde{u}$ gilt nur für die Fälle, in denen die Flamme aufgrund der endlichen Entladungsdauer, bzw. eines Flammenhaltereffektes bei stark gerichteter Strömung an den Elektroden hängen bleibt [54]. Ein solcher Effekt wurde bei den Motoren, die in der vorliegenden Arbeit berechnet werden sollen, nicht beobachtet und damit gilt nach Herweg $\tilde{u} = 0$. Dies vereinfacht die Herweg-Gleichung zu:

$$\Xi = \frac{u_T}{u_{\text{lam}}} = 1 + \sqrt{\frac{u'}{u' + u_{\text{lam}}}} \cdot \sqrt{1 - \exp\left(-\frac{r_K}{l_{int}}\right)} \cdot \sqrt{1 - \exp\left(-\frac{t - t_{ign}}{T_{OG}}\right)} \cdot \left(\frac{u'}{u_{\text{lam}}}\right)^{\frac{5}{6}} \quad . \tag{4.62}$$

Diese Beziehung soll für die Entflammungsphase (Flammenkernradius $r_K \leq 10$ mm) gelten, doch erweist sie sich als ein guter Modellierungsansatz für den Welligkeitsfaktor Ξ über die gesamte Dauer der Verbrennung. Für die erste Phase der Flammenkernbildung, kurz nach der Zündung, gilt $t - t_{ign} \ll T_{OG}$ und $r_K < l_{int}$. Daraus folgt

$$\Xi = \frac{u_T}{u_{\text{lam}}} = 1 + \sqrt{\frac{u'}{u' + u_{\text{lam}}}} \cdot \frac{t - t_{ign}}{T_{OG}} \cdot \left(\frac{u'}{u_{\text{lam}}}\right)^{\frac{5}{6}} \cong 1 \quad , \tag{4.63}$$

also $u_T \cong u_{\text{lam}}$, d.h. die Flamme breitet sich mit annähernd der laminaren Flammengeschwindigkeit aus. Für die voll turbulente Flammenausbreitung nach der Entflammungsphase ($t - t_{ign} \gg T_{OG}$ und $r_K \gg l_{int}$) gilt:

$$\Xi = \frac{u_T}{u_{\text{lam}}} \cong 1 + \sqrt{\frac{u'}{u' + u_{\text{lam}}}} \cdot \left(\frac{u'}{u_{\text{lam}}}\right)^{\frac{5}{6}} \quad . \tag{4.64}$$

Die Abhängigkeit vom integralen Längenmaß in (Gl. 3.64) ist verschwunden. Jedes physikalisch-chemische Phänomen, das eine Verringerung der Turbulenzgeschwindigkeit u' verursacht (z.B. Grenzschicht in unmittelbarer Nähe einer festen Wand), bewirkt lokal eine Verringerung des Welligkeitsfaktors, also eine Annäherung zum Zustand der laminaren Flammenausbreitung („Relaminarisierung“), auch wenn das Volumen der mittleren Flammenfront mit dem Volumen des Brennraums vergleichbar ist und der Radius der mittleren Flammenfront sehr viel größer ist als das integrale Längenmaß.

Mit der Bestimmung der algebraischen Beziehung für den Welligkeitsfaktor Ξ ist das Verbrennungsmodell in sich geschlossen und damit die Berechnung des gesamten Strömungsfeldes (Geschwindigkeitsfeld, Druck- und Temperaturfeld, Turbulenzgrößen und Zusammensetzung des lokalen Gasgemisches) möglich. Eine Ausnahme bilden jene Spezies, deren Bildungsreaktionen die Voraussetzung einer sehr schnellen Reaktionskinetik nicht erfüllen. Dies sind in erster Linie die Stickstoffoxide NO und NO_2. Die Berechnung der Massenbrüche dieser Spezies ist das Thema des folgenden Kapitels.

Kapitel 5

Schadstoffbildung

Verbrennungsmotoren sind heutzutage einer der wichtigsten Verursacher der Luftverschmutzung. Dies wird einerseits durch die Art und Weise der Energieumsetzung in einem Verbrennungsmotor und andererseits durch das Ausmaß ihrer Verbreitung und ihrer maßgeblichen wirtschaftlichen Bedeutung bedingt.

Die Abgase der Verbrennungsmotoren werden zusammen mit den Industrieabgasen verantwortlich gemacht für den steigenden Gehalt an Kohlendioxid CO_2 in der Luft und, damit verbunden, mit der vermuteten zunehmenden Erwärmung der Erdatmosphäre durch den Treibhauseffekt (Schmelzen der Eiskappen an den Polen, steigender Meeresspiegel) und für den immer noch viel zu hohen Ausstoß an Umweltgiften wie Kohlenmonoxid CO, den Stickstoffoxiden NO und NO_2, unverbrannten (oder nur teilweise verbrannten) Kohlenwasserstoffen (engl. „unburned hydrocarbons“, UHC) und Partikelemissionen (Ruß). Speziell für Ottomotoren spielen CO, UHC und NO eine entscheidende Rolle.

Während die CO_2-Emission über den Verbrennungsprozeß näherungsweise linear mit dem Kraftstoffverbrauch verbunden ist, kann bei den restlichen Komponenten eine Reduzierung der Schadstoffemissionen durch motorische Maßnahmen erzielt werden. Die genauen Emissionswerte dieser Abgaskomponenten sind abhängig von dem jeweiligen Motortyp, dem Kraftstoff und dem gefahrenen Betriebspunkt, doch durchschnittlich betragen die Massenbrüche der Schadstoffkomponenten etwa 500 bis 1000 ppm für NO (ppm = parts per million), ca. 10000 bis 20000 ppm für CO und ca. 3000 ppm für UHC [55]. Die heute üblichen Kraftstoffe enthalten kleine Mengen von Schwefel, in der Regel weniger als 600 ppm, welches zu Schwefeldioxid SO_2 oxidiert wird. Ein Teil des Schwefeldioxids wird weiter zu Schwefeltrioxid SO_3 oxidiert, welches in der Atmosphäre mit Wasser zu Schwefelsäure reagiert und eine Ursache des „sauren Regens“ darstellt.

Um die Schadstoffemissionen der Verbrennungsmotoren zu senken, wurden in den letzten zehn Jahren eine ganze Reihe von Maßnahmen durch den Gesetzgeber getroffen, z.B. die Einführung und kontinuierliche Verschärfung der Grenzwerte der Schadstoffkomponenten, deren Erfüllung eine stetig wachsende Herausforderung für die Automobilindustrie wurde. Durch die kontinuierliche Verkürzung der Entwicklungszeiten für neue Motoren ist die früher übliche systematische Motorenentwicklung am Prüfstand zeitmäßig nicht länger durchführbar und der Simulation kommt mehr und mehr an Bedeutung zu, nicht nur in der Forschung, sondern auch in der Vor- und Serienentwicklung.

Zur Reduzierung der Schadstoffemissionen werden heute einerseits motorische Maßnah-

mem zur Reduzierung der Rohemissionen der Schadstoffkomponenten und andererseites Maßnahmen zur Abgasnachbehandlung getroffen. Zur Durchführung der innermotorischen Maßnahmen ist ein detailliertes Verständnis der komplexen Prozesse der Schadstoffbildung von großem Nutzen, und dafür soll die 3D-Simulation in immer größerem Maße eingesetzt werden.

In der vorliegenden Arbeit wurde als Schwerpunkt die Berechnung der Schadstoffkomponenten NO und CO gewählt. Die Mechanismen der Bildung dieser Komponenten werden in den folgenden beiden Abschnitten beschrieben.

5.1 Mechanismen der Stickoxidbildung

Die Stickoxide, hauptsächlich NO und NO_2, aber auch andere Kombinationen wie z.B. N_2O in geringeren Mengen, sind Nebenprodukte eines Verbrennungsprozesses. Es gibt drei relevante Mechanismen zur Stickoxidbildung:

- durch Oxidation des Luftstickstoffs N_2 durch atomaren Sauerstoff O bei hohen Temperaturen (thermisches NO),
- durch Reaktion des CH-Radikals mit Luftstickstoff bei niedrigen Temperaturen (promptes NO),
- über die Reaktion $N_2O + O \longrightarrow N_2O + M$, wobei Stickstoffdioxid N_2O aus der Reaktion $O + N_2 + M \longrightarrow N_2O + M$ bei hohem Druck entsteht,
- durch Reaktion des kraftstoffgebundenen Stickstoffs mit Sauerstoff. Dieser Mechanismus ist z.B. bei der Kohleverbrennung relevant. In der vorliegenden Arbeit wurde als Kraftstoff gasförmiges Propan verwendet; somit liegt kein kraftstoffgebundener Stickstoff vor. Deshalb wird auf diesen Mechanismus nicht weiter eingegangen.

5.1.1 Das thermische NO; der Zeldovich-Mechanismus

Der Mechanismus der NO-Bildung durch Oxidation des Luftstickstoffs bei hohen Temperaturen ist bei ottomotorischen Verbrennung der absolut dominierende Mechanismus (90 bis 95 Prozent des im Motor gebildeten NO sind auf diesen Mechanismus zurückzuführen). Er wurde 1948 von Y. A. Zeldovich erstmals aufgestellt und besteht (in seiner durch Lavoie et al. nachträglich erweiterten Form) aus folgenden Reaktionen:

$$O + N_2 \overset{k_1(t),k_{-1}(t)}{\longleftrightarrow} NO + N \quad , \tag{5.1}$$

$$N + O_2 \overset{k_2(t),k_{-2}(t)}{\longleftrightarrow} NO + O \quad , \tag{5.2}$$

$$N + OH \overset{k_3(t),k_{-3}(t)}{\longleftrightarrow} NO + H \tag{5.3}$$

mit den Geschwindigkeitskoeffizienten k_1, k_2, k_3 nach Warnatz und Maas [2]

$$k_1(T) = 1,8 \cdot 10^{12} \cdot \exp\left(\frac{-319\ \text{kJ/mol}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}}\right] \tag{5.4}$$

$$k_2(T) = 6,4 \cdot 10^9 \cdot \exp\left(\frac{-26 \text{ kJ/mol}}{RT}\right) \qquad \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}}\right] \tag{5.5}$$

$$k_3(T) = 3,0 \cdot 10^{13} \qquad \left[\frac{\text{cm}^3}{\text{mol} \cdot \text{s}}\right] \quad . \tag{5.6}$$

Die Werte der Geschwindigkeitskoeffizienten für die Rückreaktionen werden über die Gleichgewichtskonstanten aus thermodynamischen Daten berechnet (s. Kap. 2, Gl. 2.70).

Der molekulare Stickstoff N_2 wird durch den atomaren Sauerstoff O zu NO oxidiert, unter Bildung eines Stickstoffatoms N, welches sehr schnell zu NO weiterreagiert (Reaktionen 2 und 3 des Zeldovich-Mechanismus) [2]. Wegen der sehr hohen Aktivierungsenergie der Einleitungsreaktion (Spaltung der Dreifachbindung des N_2), ist diese erste Reaktion sehr stark temperaturabhängig. Bei Temperaturen unter 1600 K ist sie bei den Aufenthaltszeiten der Gase im Brennraum eines Motors vernachlässigbar. Das thermische NO entsteht damit fast ausschließlich in der verbrannten Zone, hinter der sich ausbreitenden Flammenfront. Die Zonen verbrannten Gasgemisches, welche thermodynamisch (durch den Druckanstieg im Brennraum) über die adiabate Flammentemperatur hinaus erhitzt werden, sind die Hauptquellen für die Stickoxidemission in einem Ottomotor [55].

Die charakteristische Zeit für diesen Mechanismus ist etwa $\tau_{\text{chem,NO,therm}} \cong 5 \cdot 10^{-3}$ s, also um zwei, drei Größenordnungen größer als die charakteristische Zeit der Verbrennung der Kohlenwasserstoffe bzw. der für die Wärmefreisetzung maßgeblichen Reaktionen und gleichzeitig um eine Ordnung größer als das integrale Zeitmaß der Turbulenz. Diese charakteristische chemische Zeit der Bildung des thermischen NO entspricht etwa der Zeit zwischen Zündung und Öffnung des Auslassventils in einem Verbrennungsmotor bei mittleren Drehzahlen. Damit wird verdeutlicht, daß die Stickoxidbildung extrem langsam ist und reaktionskinetisch kontrolliert wird. Für diesen Mechanismus ist eine Flamelet-Modellierung nicht möglich, die thermische Stickoxidbildung findet in dem Regime des idealen Rührreaktors statt. Gleichzeitig wird offensichtlich, daß die notwendige Zeit zur Einstellung eines chemischen Gleichgewichts nicht vorhanden ist. Die Rückreaktionen spielen bei dem gegebenen Satz von Arrhenius-Parameter eine geringe Rolle. Reaktion (-1) konkurriert mit den sehr schnellen Reaktionen (2) und(3) bezüglich des atomaren Stickstoffs N (s. § 1.6, Quasistationarität), die Rückreaktionen (-2) und (-3) haben bei vergleichbarem präexponentiellen Faktor eine sehr viel höhere Aktivierungsenergie als die jeweiligen direkten Reaktionen.

Ein Vergleich der Werte der Arrhenius-Parameter mit den Angaben anderer Autoren [55, 56] zeigt deutliche Unterschiede. Eine Übersicht zu den unterschiedlichen Sätzen von Arrhenius-Parameter für den Zeldovich-Mechanismus ist bei Raine et al. [57] zu finden. Der Arrhenius-Parametersatz von Ph. Klaus [56] ist wohl der aktuellste Satz und ist sehr sorgfältig überarbeitet; er stand zum Zeitpunk der Durchführung der Arbeit jedoch noch nicht zur Verfügung. In Abhängigkeit der gewählten Pararmetersatzes ergibt sich eine unterschiedliche Gewichtung der um die N-Radikale konkurrierenden Reaktionen 2, 3 und -1 innerhalb des Zeldovich-Mechanismus. Die Rückreaktionen (-1,-2,-3) wurden in der vorliegenden Arbeit vernachlässigt. Damit ergibt sich die folgende Transportgleichung für die Stickoxidbildung nach dem Zeldovich-Mechanismus:

$$\frac{\partial(\overline{\rho} \cdot \tilde{w}_{\text{NO}})}{\partial t} + \frac{\partial\left(\overline{\rho} \cdot \tilde{u}_j \cdot \tilde{w}_{\text{NO}}\right)}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_s} \cdot \frac{\partial \tilde{w}_{\text{NO}}}{\partial x_j}\right) =$$

$$M_{\text{NO}} \cdot \int_0^\infty \left[k_1(T)\, c_{\text{O}} c_{\text{N}_2} + k_2(T)\, c_{\text{N}} c_{\text{O}_2} + k_3(T)\, c_{\text{N}} c_{\text{OH}}\right] \cdot pdf\left(T; \tilde{T}, T''\right) dT \quad . \tag{5.7}$$

Durch die Anwendung der Quasistationaritätshypothese für die Stickstoffatome N (Gl. 1.64) kann die Transportgleichung vereinfacht werden zu

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{w}_{\mathrm{NO}})}{\partial t}+\frac{\partial\left(\overline{\rho}\cdot\tilde{u}_j\cdot\tilde{w}_{\mathrm{NO}}\right)}{\partial x_j}-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_s}\cdot\frac{\partial\tilde{w}_{\mathrm{NO}}}{\partial x_j}\right)=$$

$$M_{\mathrm{NO}}\cdot\int_0^{\infty}2\cdot k_1\left(T\right)c_{\mathrm{O}}c_{\mathrm{N_2}}\cdot pdf\left(T;\tilde{T},T''\right)dT=$$

$$2M_{\mathrm{NO}}\cdot\int_0^{\infty}\rho^2\cdot\left[k_1\left(T\right)\frac{w_{\mathrm{O}}\cdot w_{\mathrm{N_2}}}{M_{\mathrm{O}}\cdot M_{\mathrm{N_2}}}\right]pdf\left(T;\tilde{T},T''\right)dT \qquad . \tag{5.8}$$

Die Konzentrationen der Spezies $\mathrm{O,N,OH}$ und $\mathrm{N_2}$ können gemäß dem in Kap. 3 beschriebenen Interpolationsverfahren aus den Daten der Flamelet-Bibliothek berechnet werden. Die Schwierigkeit besteht in der Berechnung der mittleren Reaktionsgeschwindigkeiten (wegen der extremen Temperaturempfindlichkeit der Geschwindigkeitskoeffizienten). Dazu kann man die Bildung des Stickoxids in der verbrannten Zone mit einer Gauss-pdf annähern und, wenn Mittelwert und Varianz der Temperatur bekannt sind, das Integrationsverfahren zur Mittelwertbildung durchführen. Hierfür muß eine zusätzliche Transportgleichung für die Varianz der Temperatur gelöst werden. Die Modellierung der Terme einer Transportgleichung für diese Größe ist extrem kompliziert, und eine solche Transportgleichung ist in der Fachliteratur nach Wissen des Verfassers noch nicht etabliert. Deshalb wurde der Quelltext für ein entsprechendes Modell in das Anwenderunterprogramm SORSCA.F eingebaut, jedoch konnten mangels einer Transportgleichung für die Varianz der Temperatur damit keine Berechnung durchgeführt werden. Außerdem würde der numerische Aufwand zur Integration der pdf bei den heute üblichen motorischen Anwendungen mit einer Zellenzahl von 100000 bis 350000 Zellen die Rechenkapazität der heute verwendeten Rechner überfordern. Deshalb wurde für die pdf der Temperatur eine Dirac-Delta-pdf angenommen,

$$pdf\left(T;\tilde{T},T''\right)=\delta\left(T-\tilde{T}\right) \qquad , \tag{5.9}$$

die den Grenzfall der Gauss-pdf bei vernachlässigbaren Temperaturschwankungen darstellt (d.h. Varianz der Temperatur im verbrannten Gasgemisch ist gleich Null wie in einer laminaren Flamme). Es folgt die vereinfachte Form der Transportgleichung für den Massenbruch des Stickstoffoxids:

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{w}_{\mathrm{NO}})}{\partial t}+\frac{\partial\left(\overline{\rho}\cdot\tilde{u}_j\cdot\tilde{w}_{\mathrm{NO}}\right)}{\partial x_j}-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_s}\cdot\frac{\partial\tilde{w}_{\mathrm{NO}}}{\partial x_j}\right)=$$

$$M_{\mathrm{NO}}\cdot\left[k_1\left(\tilde{T}\right)\tilde{c}_{\mathrm{O}}\tilde{c}_{\mathrm{N_2}}+k_2\left(\tilde{T}\right)\tilde{c}_{\mathrm{N}}\tilde{c}_{\mathrm{O_2}}+k_3\left(\tilde{T}\right)\tilde{c}_{\mathrm{N}}\tilde{c}_{\mathrm{OH}}\right] \qquad . \tag{5.10}$$

Durch die Anwendung der Quasistationaritätshypothese für den atomaren Stickstoff N gilt

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\cdot\tilde{w}_{\mathrm{NO}})}{\partial t}+\frac{\partial\left(\overline{\rho}\cdot\tilde{u}_j\cdot\tilde{w}_{\mathrm{NO}}\right)}{\partial x_j}-\frac{\partial}{\partial x_j}\left(\frac{\mu_{eff}}{\sigma_s}\cdot\frac{\partial\tilde{w}_{\mathrm{NO}}}{\partial x_j}\right)=2M_{\mathrm{NO}}\cdot k_1\left(\tilde{T}\right)\tilde{c}_{\mathrm{O}}\tilde{c}_{\mathrm{N_2}} \qquad . \tag{5.11}$$

Darin ist die Konzentration des atomaren Sauerstoffs $\tilde{c}_{\mathrm{O}}$ die am schwierigsten zu bestimmende Größe. Als alternative Berechnungsmöglichkeit des atomaren Sauerstoffs, neben der direkten Berechnung aus den Daten der Flammenbibliothek, ist die Berechnung des O-Massenbruchs aus dem partiellen Gleichgewicht möglich, das sich bei hohen Temperaturen

innerhalb des Wasserstoff-Sauerstoff-Mechanismus einstellt (s. §1.5) [2]. Dabei muß wieder auf den Mittelwert der Temperatur zurückgegriffen werden:

$$\tilde{c}_{\mathrm{O}} = \frac{K_1\left(\tilde{T}\right) K_3\left(\tilde{T}\right) \cdot \tilde{c}_{\mathrm{O}_2} \cdot \tilde{c}_{\mathrm{H}_2}}{K_2\left(\tilde{T}\right) K_4\left(\tilde{T}\right) \cdot \tilde{c}_{\mathrm{H}_2\mathrm{O}}} \quad . \tag{5.12}$$

Die chemischen Quellterme der beiden alternativen Formen der Transportgleichung (Gl. 4.10 bzw. 4.11), jeweils mit Wahl der Berechnung der O-Konzentration direkt aus der Flamelet-Bibliothek oder nach (Gl. 4.12), wurden in linearisierter Form in das Anwenderunterprogramm SORSCA.F eingebaut und damit die Bildung des thermischen Stickoxids berechnet.

5.1.2 Das prompte NO; der Fenimore-Mechanismus

Die Existenz des prompten NO und der Mechanismus seiner Entstehung wurden 1971 von C. P. Fenimore entdeckt. Anhand von Brennerversuchen mit unterschiedlichen Kraftstoffen (H_2, CO und verschiedenen Kohlenwasserstoffen) in Luft, fand Fenimore heraus, daß in den Kohlenwasserstofflammen ein beachtlicher Teil der NO-Emission in der Flammenfront selbst oder deren unmittelbaren Umgebung ensteht, im Gegensatz zu H_2- und CO-Flammen. Dieses sogenannte „prompte“ NO nimmt mit steigendem Druck und mit steigendem Äquivalenzverhältnis zu (bis $\Phi \cong 1{,}4$) und weist eine sehr schwache Temperaturabhängigkeit auf [59]. Die Bildung des prompten NO beruht auf der Reaktion von freien Kohlenwasserstoffradikalen (CH) mit dem Luftstickstoff unter Bildung von Blausäure HCN, welche schnell weiterreagiert zu NO [2]:

$$\mathrm{CH} + \mathrm{N}_2 \overset{k_M(t), k_{-M}(t)}{\longleftrightarrow} \mathrm{HCN} + \mathrm{N} \rightarrow \ldots \rightarrow \mathrm{NO} \quad . \tag{5.13}$$

Die geschwindigkeitsbestimmende Reaktion ist die direkte Reaktion in (Gl. 5.13). Der Geschwindigkeitskoeffizient dieser Reaktion beträgt nach Miller und Walch [59]

$$k_M(T) = 3{,}68 \cdot 10^7 \cdot \exp\left(\frac{-20{,}723\ \mathrm{kJ/mol}}{RT}\right) \quad \left[\frac{\mathrm{cm}^3}{\mathrm{mol} \cdot \mathrm{s}}\right] \quad . \tag{5.14}$$

Durch die relativ niedrige Aktivierungsenergie tritt das prompte NO schon bei viel niedrigeren Temperaturen auf als das thermische NO (ca. 1000 K) und macht bei kraftstoffreicher (fetter) Verbrennung und in Diffusionsflammen einen wichtigen, manchmal sogar den dominierenden Anteil der NO-Emission aus. Bei Ottomotoren mit stöchiometrischer Verbrennung beträgt ihr Anteil an der gesamten NO-Emission etwa 5 bis 10 Prozent aus. Die Bestimmung des Massenanteils des prompten NO bei einer ottomotorischen Verbrennung ist mit einem Flamelet-Modell möglich, doch muß dafür der Reaktionsmechanismus, der der Flammenbibliothek zugrundeliegt, um einen Satz von NO-spezifischen Reaktionen erweitert werden, so daß für Propan ein Reaktionsmechanismus mit 70 Spezies verwendet wird. Wegen der sehr personal- und cpu-intensiven Art und Weise der Erstellung einer Flamelet-Bibliothek lag zum Zeitpunkt der Durchführung dieser Arbeit nur ein Teil einer Flamelet-Bibliothek mit promptem NO vor, so daß auf die Berechnung des prompten NO verzichtet werden mußte und allein die Berechnung des thermischen NO (nach dem Zeldovich-Mechanismus) vorliegt.

5.1.3 Die Bildung von Stickstoffdioxid NO_2

Stickstofdioxid NO_2 entsteht im Brennraum eines Ottomotors durch die Reaktion von Stickstoffoxid mit Radikalen in der Flammenfront, hauptsächlich dem HO_2-Radikal gemäß der Reaktionsgleichung

$$NO + HO_2 \rightarrow NO_2 + OH \tag{5.15}$$

und wird zum Großteil sofort mit Radikalen wie O und H reagieren und Stickoxid bilden:

$$NO_2 + H \rightarrow NO + OH \quad , \tag{5.16}$$

$$NO + O \rightarrow NO + O_2 \quad . \tag{5.17}$$

Es tritt somit im Brennraum nur als Zwischenprodukt (in der Flammenfront) auf und ist im Verhältnis zum Stickoxid vernachlässigbar. Nach Heywood [55] beträgt der maximale Wert des Verhältnisses von NO_2 zu NO unter betriebsüblichen Bedingungen (1500 min^{-1}) etwa 2 Prozent. In der vorliegenden Arbeit wurde das Stickstoffdioxid gleichfalls vernachlässigt.

5.2 Mechanismen der Kohlenmonoxidbildung

In §3.2.1 wurden die Grundzüge des kinetischen Mechanismus der Oxidation der Kohlenwasserstoffe beschrieben. Darin wurde gezeigt, daß der Oxidationsprozeß in einer ersten Stufe Kohlenmonoxid CO ergibt, und daß dieses anschließend zu Kohlendioxid oxidiert wird, wobei das geschwindigkeitsbestimmende Reaktionspaar (Gl. 3.8) ist. Bei den hohen Temperaturen des verbrannten Gasgemisches im Brennraum eines Ottomotors (zw. 2000 und 2800 K) sind diese Reaktionen ausreichend schnell, um die Voraussetzung der schnellen Reaktionskinetik zu erfüllen. Die Massenbrüche aller beteiligten Spezies entsprechen den Werten des chemischen Gleichgewichts bei den gegebenen Werten von Temperatur und Druck [55]. Damit sind die Voraussetzungen für die Berechnung der CO-Konzentration im Brennraum eines Ottomotors in der Hochtemperaturphase mit Hilfe des Flamelet-Modells erfüllt.

Jedoch sind diese Voraussetzungen nicht mehr erfüllt, wenn die Werte der Temperatur im Zylinder mit der Abwärtsbewegung des Kolbens kontinuierlich sinken und damit die Reaktiosgeschwindigkeiten in dem $CO - CO_2$-Mechanismus exponentiell fallen. Das chemische Gleichgewicht stellt sich nicht mehr ein, die im Abgas gemessenen CO-Konzentrationen übersteigen bei stöchiometrischer Verbrennung die Gleichgewichtswerte, den Temperatur- und Druckbedingungen des Abgases entsprechen, deutlich [55]. Sie sind gleichzeitig jedoch deutlich niedriger als die Werte die in der Nachverbrennungszone unmittelbar hinter der Flammenfront erreicht werden. Dies erklärt die Unterschiede zwischen den in der Hochtemperaturphase (während und kurz nach Ablauf der Verbrennung) berechneten CO-Konzentrationen und den leider nur im Abgas gemessenen CO-Konzentrationen (s. § 6.1.4). Die genauen Werte der im Abgas gemessenen CO-Massenbrüche sind weiterhin abhängig von der Lage der Meßstelle im Abgastrakt. Messungen in einer motornahen Meßstelle ergeben deutlich höhere CO-Massenbrüche als die Messungen in einer vom Auslaßventil weiter entfernten Meßstelle. Die Zwischenschaltung eines Beruhigungsbehälters führt zu einer weiteren Senkung des CO-Massenbruchs.

Kapitel 6

Numerik

Die in den vorhergehenden Kapiteln beschriebenen Transportgleichungen (Navier-Stokes- bzw. Reynolds-Gleichungen, Gleichungen des $\tilde{k}$-$\tilde{\epsilon}$-Modells, des Verbrennungsmodells, incl. der Ableitungen zweiter Ordnung der Reaktionsfortschrittsvariablen und der Gleichungen des Zeldovich-Mechanismus) bilden ein System gekoppelter, nichtlinearer partieller Differentialgleichungen. Dieses Gleichungssystem liefert zusammen mit den dazugehörenden algebraischen Beziehungen (z.B. dem idealen Gasgesetz, der Herweg-Korrelation) bei Vorgabe von physikalisch sinnvollen Anfangs- und Randbedingungen genau eine Lösung. Das Differentialgleichungssystem ist analytisch nicht lösbar. Deshalb müssen numerische Lösungsmethoden angewendet werden. Dabei werden die zu lösenden Transportgleichungen durch algebraische Beziehungen ersetzt, die eine lokale Näherungslösung der Transportgleichungen ermöglichen. Die Überführung der Transportgleichungen in algebraische Gleichungen wird als „Diskretisierung“ der Transportgleichungen bezeichnet.

6.1 Diskretisierungsfehler und Netzabhängigkeit

Die Diskretisierungsmethode, die in der vorliegenden Arbeit angewendet wird, ist die Methode der Finiten Volumen. Sie besteht darin, daß das gesamte Strömungsgebiet in einzelne Elementarvolumina (sog. „Zellen des Rechengitters“) aufgeteilt wird und daß die Transportgleichungen in ihrer Integralform (Gl. 2.3) unter Annahme lokaler Homogenität der Strömungsvariablen in jedem dieser Elementarvolumina gelöst werden [7, 60].

Dabei müssen Annahmen über den Verlauf der verschiedenen Strömungsgrößen zwischen den Rechenpunkten des Gitters (an den Grenzen eines jeden Elementarvolumens) gemacht werden. Dazu gibt es mehrere etablierte Vorgehensweisen, z.B. durch lineare Interpolation (der sog. „Zentraldifferenzen-Ansatz“, kurz CD-Ansatz) oder durch Gleichsetzung der Werte der zu berechnenden Strömungsvariablen Φ an den Grenzen des Elementarvolumens mit dem Wert dieser Strömungsvariablen in dem nächsten stromaufwärts gelegenen Rechenpunkt (der sog. „UPWIND-Ansatz“). Solche Annahmen werden als „Diskretisierungsansätze“ bezeichnet. Die beiden oben angeführten Ansätze sind mit Sicherheit nur die einfachsten und die bekanntesten aus einer ständig wachsenden Vielzahl von Diskretisierungsansätzen. Sie bringen jedoch spezifische Vor- und Nachteile bezüglich der Genauigkeit der Lösung mit sich (z.B. relativ hohe numerische Diffusion beim UPWIND-Ansatz oder numerische Dispersion beim CD-Ansatz). Auch ist deren Empfindlichkeit bei Verzerrung der Rechenzellen (i.e.

Abweichung der Form der Rechenzelle von der Idealform eines regelmäßigen Hexaeders, Thetraeders, Pyramide oder Prisma über das zuläßige Maß hinaus) sehr unterschiedlich. Diese Einflüsse sind in Kap. 6 „Ergebnisse“ deutlich aufgezeigt.

Diese sogenannten „Disktretisierungsfehler“ können eine gravierende Auswirkung auf die Lösung der Transportgleichungen haben. Details zur Natur und der zu erwartende Größe einiger dieser numerischen Fehler sind bei Noll [60] und bei Klimetzek [62] zu finden. Als Möglichkeiten zur Reduzierung dieser rein numerischen Fehler, die sich den Fehlern aus einer unzureichenden physikalisch-chemischen Modellierung überlagern, bieten sich prinzipiell folgende Maßnahmen an:

1) eine höhere Auflösung des Rechengitters,
2) eine Reduzierung der Verzerrung der Rechenzellen auf ein akzeptables Mindestmaß,
3) Anpassung der Netzstruktur an die veränderliche Geometrie und wenn möglich an die Hauptströmungsrichtung, lokale Netzverfeinerung,
4) die Anwendung von komplexeren, hochauflösenden Diskretisierungsansätzen.

Diese Ideen zur Reduzierung numerischer Fehler sind zwar einfach und fast so alt wie die numerische Strömungsmechanik selbst, deren konsequenten Umsetzung sind jedoch enge Grenzen durch den derzeit möglichen Rechenaufwand eines leistungsfähigen Computers gesetzt (Arbeitspeicher von 256 MB bis 1 GB und Rechenzeiten von mehreren Wochen pro Simulation). Die heute üblichen motorischen Rechennetze bestehen aus ca. 50.000 bis 500.000 Zellen. Davon bleiben für den Brennraum im oberen Totpunkt nur 10 bis 20 Prozent der Zellen übrig. Die durchschnittliche Netzkantenlänge beträgt damit ca. 1 mm.

Bei dieser durch die Rechenkapazität gegebenen Beschränkung ist eine saubere (verzerrungsfreie) Anpassung des Rechennetzes an die reale, aus CAD-Anwendungen importierte Geometrie eines seriennahen Brennraums über den gesamten Bewegungsablauf nur sehr selten möglich. Im Gegenzug sind einfache Geometrien von Forschungsmotoren, für die das kein so großes Problem bedeutet, nur bedingt von praktischem Interesse. Sie stellen jedoch gerade deshalb eine Möglichkeit für die Weiterentwicklung und Validierung der Strömungsberechnung mit allen integrierten physikalisch-chemischen Modellen dar. Bei der Berechnung der Strömung in einer seriennahen Brennraumgeometrie muß allerdings mit numerischen Fehlern gerechnet werden, deren Ursprung in einer übermäßigen Verzerrung einiger weniger Zellen liegt. Eine Einführung in die verschiedenen Typen von Verzerrungen und deren zulässige Größe ist im Star-CD Handbuch [7] gegeben.

Weiterhin zeigt sich, daß zusätzlich zu den bereits genannten Fehlerquellen, die unterschiedlichen Algorithmen zur Beschreibung der Netzbewegung einen eigenen Beitrag zu den insgesamt auftretenden numerischen Fehlern leisten.

6.1.1 Der Einfluß der Algorithmen der Netzbewegung auf die Lösung der Erhaltungsgleichungen

Zur Modellierung der Netzbewegung wird in allen bekannten Strömungsberechnungsprogrammen einer der folgenden Algorithmen (oder eine Kombination hiervon) angewendet:

1) *Einfache Netzbewegung* (z.B. Kompression, Expansion) durch Bewegung der Netzknoten über eine vorgegebene mathematische Funktion oder durch Interpolation zwischen zwei

vorgegebenen Extrempositionen eines Netzes, wobei sich die Netztopologie nicht ändert (jede Zelle ist über den gesamten Bewegungsablauf mit den gleichen Nachbarzellen verbunden).

2) *Topologiewechsel* oder Netzwechsel: Zu einigen wenigen Zeitpunkten wird das berechnete Strömungsfeld von dem ersten Netz auf ein zweites, besser angepasstes Netz interpoliert. Zum Zeitpunkt des Netzwechsels müssen die beiden Geometrien in ihren Außenkonturen identisch sein, davor und danach sind einfache Netzbewegungen erlaubt. Dieser Algorithmus wird als „mesh mapping“ oder als „rezone“ bezeichnet.

3) *Snapping*-Algorithmus: Er besteht in der Angliederung oder der Entfernung jeweils einer Zellschicht, wobei ausschließlich die Knoten dieser Zellschicht bewegt werden, während die restlichen Zellen in einer möglichst unverzerrten, optimalen Form beibehalten werden. Nachteil ist, daß das Netz dabei in Zellschichten eingeteilt werden muß, also eine bestimmte, u. U. einengende Struktur des Netzes unumgänglich ist.

Numerische Untersuchungen (Gildein, 1995, [61]) haben gezeigt, daß der Einfluß der numerischen Fehler, die auf den Algorithmus der Netzbewegung zurückzuführen sind, nicht für alle Strömungsvariablen gleichmäßig bedeutend ist, sondern sich in erster Reihe auf die Turbulenzgrößen $\tilde{k}$ und $\tilde{\epsilon}$ auswirkt. Natürlich sind alle anderen Variablen davon auch betroffen (zumindest über die Wirbelviskosität $\mu_T = C_\mu \cdot \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}}$), doch die relative Größe der Änderung ist deutlich niedriger.

Ein Ergebnis der Untersuchungen ist, daß die einfache Netzbewegung (Kompression und Entspannung) eindeutig die besten Ergebnisse hinsichtlich der Netzabhängigkeit sowohl der Turbulenzgrößen als auch des Zerfalls einer Tumble-Strömung bringt. Ein „mesh mapping“-Algorithmus bewirkt eine plötzliche, deutliche Veränderung des über den Brennraum gemittelten Werts der TKE, und die Zerfallsgeschwindigkeit einer Tumble-Strömung wird plötzlich erhöht. Dies könnte gegebenenfalls auf eine schlechtere Auflösung der Wirbelstrukturen zurückzuführen sein, wenn zur Einhaltung der gegebenen radialen Auflösung nahe OT auf ein etwas gröber konstruiertes Netz gewechselt werden muß. Der Snapping-Algorithmus erweist sich als ein Zwischenfall der beiden anderen Algorithmen insoweit, als eine relativ kontinuierliche, geringe Veränderung der TKE nachgewiesen wurde.

Gleichzeitig ist mit einer u. U. besseren Lösung zu rechnen, wenn für den Ladungswechsel ein Netz mit der maximalen rechentechnisch vertretbaren Zellenzahl bis ca. 60 °KW v. ZOT mit den Snapping-Algorithmus gerechnet wird und danach eine möglichst gleichförmige Kompression der verbliebenen Zellschichten durchgeführt wird oder wenn zu diesem Zeitpunkt auf ein zweites Netz interpoliert wird, das mit der maximalen Zellenzahl nur den Brennraum abbildet. Dies erfordert zwar einen erhöhten Aufwand seitens der Netzgenerierung; es wurde trotzdem im Rahmen der vorliegenden Arbeit durchgeführt.

6.1.2 Einfluß der Netzfeinheit auf die Lösung der Transportgleichungen

Die Untersuchungen von Gildein über die Abhängigkeit der Lösung der Transportgleichungen von der Feinheit des Rechennetzes zeigen dieselbe erhöhte Sensitivität der Turbulenzgrößen im Vergleich zu allen anderen primitiven Strömungsvariablen. Nach Ansicht des Verfassers gilt diese Aussage gleichermaßen auch für die Diskretisierungsfehler, die aus der Verzerrung

der Zellen stammen. Dies wird durch die Ergebnisse der eigenen Berechnungen dokumentiert (s. Kap. 6), jedoch liegt eine systematische Untersuchung dieser Effekte nicht vor.

Als Objekt der Untersuchungen von Gildein über den Einfluß der Netzfeinheit wurde die Strömung in einem Scheibenbrennraum gewählt, wobei einerseits der Kompressionstakt einer definierten Tumbleströmung und andererseits der Ansaug- und Kompressionstakt einer vereinfachten Einlaßströmung betrachtet wurde [61].

Die Strömung in dem Scheibenbrennraum wurde in unterschiedlich feinen Netzen berechnet. Ausgehend von einem sehr groben Netz mit ca. 8000 Zellen wurden jeweils die Zellen durch Unterteilen mit derselben Zahl (2,3,4) nach allen drei räumlichen Richtungen verfeinert, bis zu ca. 500.000 Zellen für das feinste Netz. Als charakteristische Größen für die Netzfeinheit gilt die mittlere Seitenlänge der Zellen des Rechennetzes und damit implizit die Zellenzahl, die bei gegebenem Volumen dem Kubus der mittleren Kantenlänge der Zellen umgekehrt proportional ist:

$$N_{cells} \cong \frac{1}{\left(\overline{\delta l_{cells}}\right)^3} \quad .$$

Der Mittelwert der turbulenten kinetischen Energie über dem Brennraum wurde als Funktion des Kurbelwinkels für jede der genannten Auflösungsstufen des Rechennetzes aufgetragen. Die räumlich gemittelte TKE in den einzelnen Netzfeinheitsstufen weicht gegen OT deutlich voneinander ab, und mit steigender Netzauflösung ergibt sich jeweils ein höherer Wert der TKE in OT (s. Abb. 6.1).

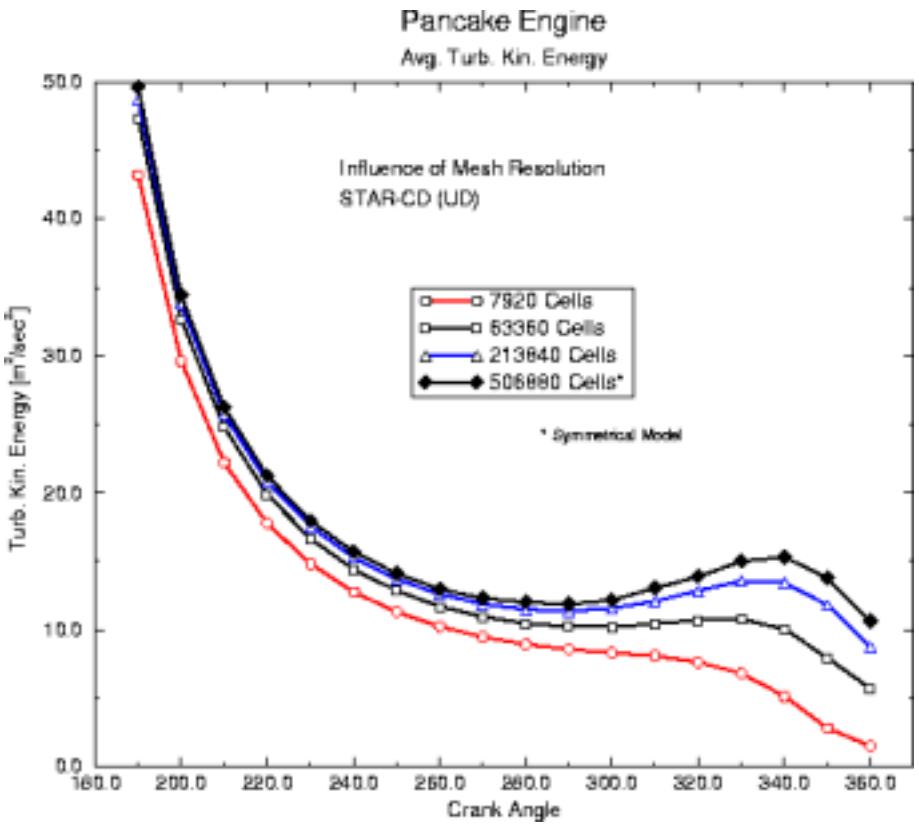

Abbildung 6.1: Einfluß der Netzfeinheit auf die Brennraum-gemittelte turbulente kinetische Energie der Strömung in einem Scheibenbrennraum [61].

Die jeweiligen Werte der TKE nähern sich anscheinend einem asymptotischen Wert, der unendlich feiner Auflösung des Gitters entspricht (s. Abb. 6.2). Gleichzeitig wird festgestellt, daß die Berechnung mit dem Diskretisierungsansatz höherer Ordnung SFCD diesen asymptotischen Wert viel schneller zu erreichen scheint als die Berechnung mit dem einfachen UPWIND-Ansatz.

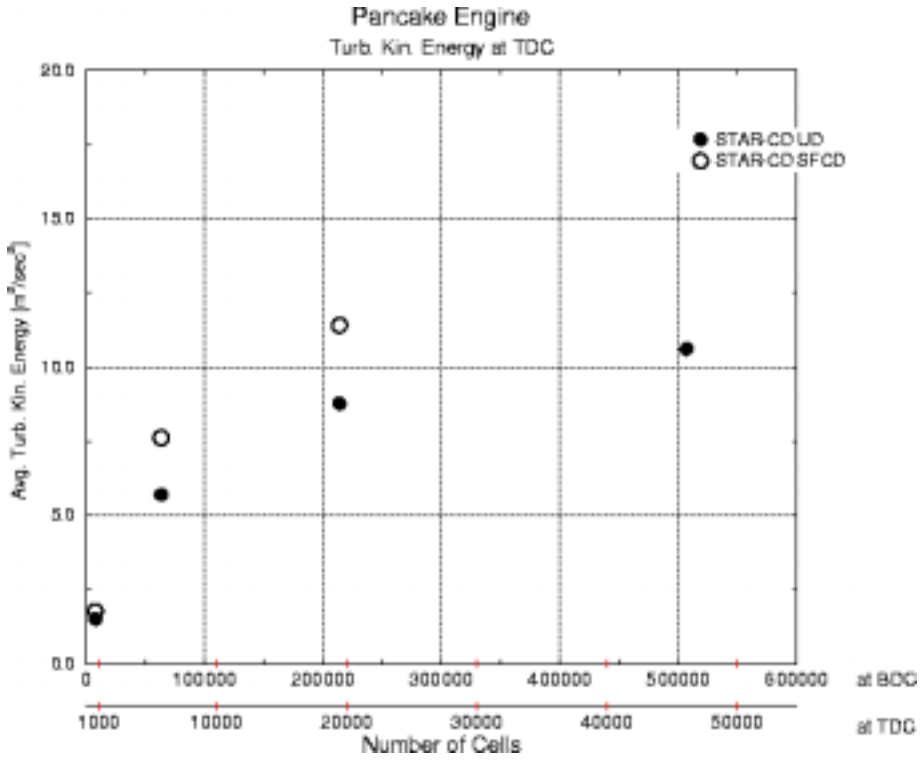

Abbildung 6.2: Netzabhängigkeit: Wert der Brennraum-gemittelten turbulenten kinetischen Energie der Strömung im oberen Totpunkt in einem Scheibenbrennraum als Funktion der Zellenzahl mit dem Snapping-Algorithmus [61].

Der SFCD-Ansatz („Self-Filtered Central Differencing Scheme“) stellt eine Kombination von UPWIND- und Zentraldifferenzen-Ansatz dar:

$$SFCD\left(\Phi\right) = \gamma \cdot CD\left(\Phi\right) + \left(1-\gamma\right) \cdot UD\left(\Phi\right) \qquad ,$$

wobei der Gewichtungsfaktor γ in Abhängigkeit vom Gradienten der Strömungsvariablen Φ berechnet wird.

Gleichzeitig zeigt die Untersuchung jedoch, daß das integrale Zeitmaß $\tau_{int} = \tilde{k}/\tilde{\epsilon}$ ab einer gegebenen Mindestfeinheit des Netzes die starke Netzabhängigkeit der beiden primitiven Turbulenzgrößen $\tilde{k}$ und $\tilde{\epsilon}$ nur in sehr viel geringerem Maße aufweist.

Das heißt, daß der Netzabhängigkeitseinfluß der beiden Turbulenzgrößen eindeutig korreliert. Dies ist in Abb. 6.3 graphisch dargestellt. Das Verhältnis der beiden Turbulenzgrößen ist (in erster Näherung) als netzunabhängig anzusehen. Dieses Verhältnis ist daher auch mit einem relativ groben Netz unter akzeptablen Rechenaufwand ausreichend genau zu berechnen.

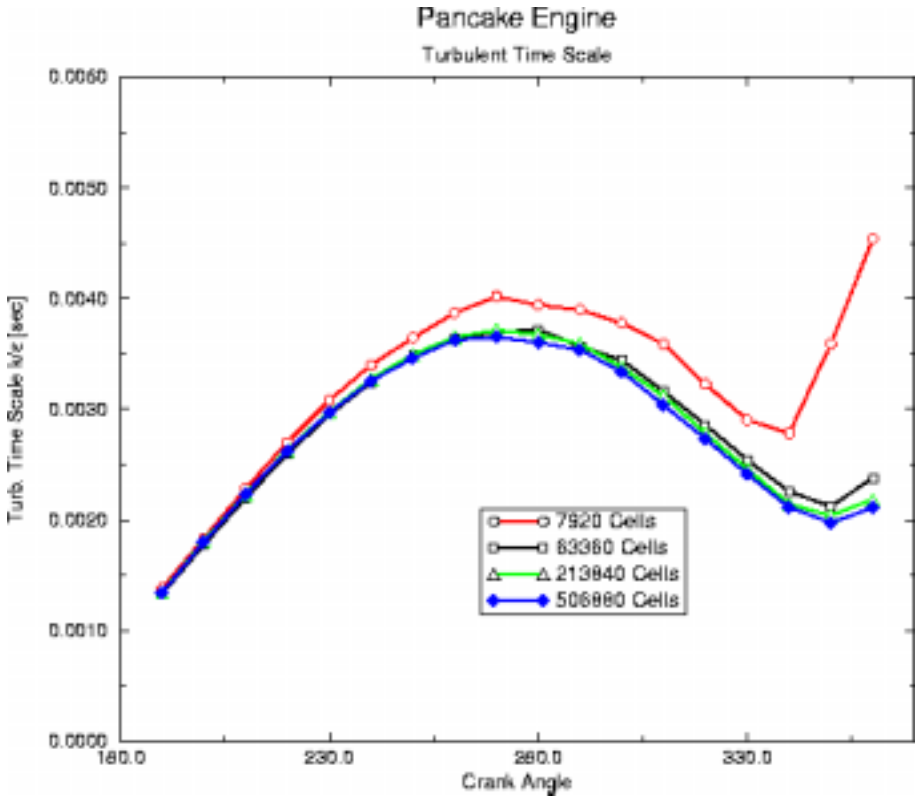

Abbildung 6.3: Einfluß der Netzfeinheit auf das Brennraum-gemittelte integrale Zeitmaß τ_{int} in einem Scheibenbrennraum [61].

Der asymptotische Wert der TKE im Brennraum wird zumindest nahe OT um einen noch unbekannten Korrekturfaktor K_{Netz} der Größenordnung 10 über dem berechneten Wert der TKE liegen. Man kann annehmen, daß dieser Korrekturfaktor gegen 1 streben wird, wenn die durchschnittliche Länge der Seitenkante der Zellen gegen Null strebt. Für jedes einzelne Rechennetz ist dieser Korrekturfaktor jedoch als numerische Konstante anzusehen, die nur durch Abgleich von Berechnung und Experiment ermittelt werden kann.

Um eine möglichst realistische Berechnung der TKE in dem Zylinder zu erreichen, wird angenommen, daß der mit dem $\tilde{k}$-$\tilde{\epsilon}$-Modell berechnete Wert der TKE in jedem Punkt mit einem solchen numerischen Korrekturfaktor multipliziert werden muß. Dieser Faktor ist laut Hypothese in allen Punkten des Zylinders gleich und entspricht damit dem oben genannten Brennraum-gemittelten Korrekturfaktor. Der „reelle“ Wert der TKE wird dann durch einfachste Extrapolation aus dem mit Hilfe des $\tilde{k}$-$\tilde{\epsilon}$-Modells berechneten Wert der TKE ermittelt. Weitaus komplexere und verfeinerte Extrapolationsverfahren sind denkbar.

Analog zur TKE muß selbstverständlich auch mit der Dissipationsgeschwindigkeit der TKE $\tilde{\epsilon}$ verfahren werden, weil deren Verhältnis, das integrale Zeitmaß, netzunabhängig sein muß. Alle anderen abhängigen Turbulenzgrößen, wie z. B. die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit u', das integrale Längenmaß l_{int} oder das Kolmogorov-Längenmaß l_K, die in das Verbrennungsmodell eingehen, müssen dementsprechend neu berechnet werden. B. Heel [53] hat als erster dieses Extrapolationsverfahren zur Korrektur der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit u' in der Herweg-Gleichung angewendet.

6.2 Einfluß der Diskretisierung der Quellterme

Zur Lösung der Transportgleichung für den Massenbruchs des thermischen Stickoxids NO nach dem Zeldovich-Mechanismus (Gl 4.10) muß der chemische Quellterm (Gl 4.8) in linearisierter Form in das Anwenderunterprogramm SORSCA.F eingebaut werden:

$$S(\Phi) = S_1P - S_2P \cdot \Phi \qquad , \tag{6.1}$$

wobei die Bedingung $S_2P > 0$ erfüllt sein muß, um eine Beschleunigung und Stabilisierung der Lösungsprozedur zu erreichen [60].

Da der Massenbruch dieser chemischen Spezies physikalisch durch die Werte 0 und 1 begrenzt ist und in Ottomotoren üblicherweise den Wert 0.01 nicht überschreitet, scheint eine Linearisierung des chemischen Quellterms in der folgenden Form als optimal ($S_1P = S_2P$) :

$$S(w_{\mathrm{NO}}) = \frac{S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots)}{1 - w_{\mathrm{NO}}} - \frac{S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots)}{1 - w_{\mathrm{NO}}} \cdot w_{\mathrm{NO}} \qquad . \tag{6.2}$$

Doch hat sich sehr schnell herausgestellt, daß wegen der extrem starken Temperaturabhängigkeit des chemischen Quellterms in den Zonen mit etwas niedrigerer mittlerer Temperatur im verbrannten Gasgemisch, nahe der Flammenfront, $S1P \cong S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots)$ den „kritischen“ Wert 50 unterschreitet. Dieser kritische Wert ist ausschließlich programmtechnisch bedingt. Er ist durch wiederholte „numerische Versuche“ herausgefunden worden. Beim Unterschreiten dieses Wertes scheint das Programmpaket Star-CD in seiner Version v2.2.10 den chemischen Quellterm zu ignorieren oder als „numerisches Rauschen“ zu filtern. Das Ergebnis ist jedoch identisch mit dem für $S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots) = 0$.

Die einzige Möglichkeit, diese numerische „Hürde“ zu umgehen, ist die, eine andere Form der Linearisierung des chemischen Quellterms auszuprobieren, in welcher sichergestellt ist, daß der Term S_1P den kritischen Wert überschreitet. Folgende linearisierte Form erfüllt diese Bedingung :

$$S(w_{\mathrm{NO}}) = A_{\mathrm{NO}} \cdot S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots) - (A_{\mathrm{NO}} - 1) \cdot \frac{S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots)}{w_{\mathrm{NO}}} \cdot w_{\mathrm{NO}} \qquad . \tag{6.3}$$

Das ergibt

$$S_1P = A_{\mathrm{NO}} \cdot S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots) \gg S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots) \tag{6.4}$$

und

$$S_2P = (A_{\mathrm{NO}} - 1) \cdot \frac{S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots)}{w_{\mathrm{NO}}} \gg S_1P \qquad . \tag{6.5}$$

Weil der NO-Massenbruch im unverbrannten Gasgemisch einer reinen Kraftstoff-Luft-Mischung den Wert Null annimt, muß in dem zweiten Glied (S_2P) eine Modellkonstannte $B_{\mathrm{NO}} > 0$ eingeführt werden, die eine Division durch Null verhindert. Damit hat der Term S_2P die Form

$$S_2P = (A_{\mathrm{NO}} - 1) \cdot \frac{S_{\mathrm{Zeldo}}(T, w_{\mathrm{O}}, \ldots)}{w_{\mathrm{NO}} + B_{\mathrm{NO}}} \qquad . \tag{6.6}$$

Dabei wird A_{NO} einen Wert in der Größenordnung 1000 bis 100000 und B_{NO} einen Wert in der Größenordnung $1,0 \cdot 10^{-10}$ bis $1,0 \cdot 10^{-7}$ annehmen, so daß sichergestellt ist daß $B_{\mathrm{NO}} \ll w_{\mathrm{NO}}$ (um mindestens eine Zehnerpotenz).

Die Einführung dieser rein numerischen Konstanten (ohne irgendwelche physikalisch-chemische Bedeutung) sollte bei korrekter Linearisierung des Quellterms keinen Einfluß auf die Lösung der Transportgleichungen haben. Dies trifft jedoch nur bei der Konstanten A_{NO} mit ausreichender Genauigkeit zu, im Falle von B_{NO} ist eine klare Abhängigkeit festgestellt worden. Die Ursache dieser Abhängigheit ist in der Diskretisierungsmethode (der Finiten Volumen) selbst zu suchen.

Die Folgen dieser Abhängigkeit sind leicht zu verstehen, wenn man bedenkt, daß für eine sehr große, endliche Zahl $GREAT$ (z.B. $GREAT \cong 1,0 \cdot 10^{+25}$) die Lösung einer Transportgleichung erzwungen werden kann. Mit

$$S1P = \alpha \cdot GREAT \quad , \tag{6.7}$$

$$S2P = GREAT \quad , \tag{6.8}$$

gilt in jedem Punkt des Strömungsfeldes für jede beliebige Variable Φ,

$$\Phi = \alpha \quad ,$$

unabhängig von dem Wert, den Φ in dem vorhergehenden Zeitschritt hatte. Der Wert $\Phi = \alpha$ wird erzwungen oder, anders gesagt, die Variable Φ wird einfach überschrieben. Dies ist leicht zu beweisen, wenn man den Ausdruck der Variable Φ nach der FV-Diskretisierungsmethode schreibt (Details bei Noll, 4. Kap., S. 85 [60]) :

$$\Phi = \frac{\sum\limits_{nb} (a_{nb} \cdot \Phi_{nb}) + S_1P \cdot V + \rho_P^0 \Phi_P^0 / \Delta t \cdot V}{\sum\limits_{nb} a_{nb} + S_2P \cdot V + \rho_P / \Delta t \cdot V} \tag{6.9}$$

Das bedeutet, daß für große Werte des Terms S_2P (dessen Größenordnung bei $w_{\mathrm{NO}} \rightarrow 0$ durch die Konstante B_{NO} bestimmt wird) eine teilweise Überschreibung der Lösung der Transportgleichung aus dem letzten Zeitschritt durch den Wert aus dem aktuellen Zeitschritt vorgenommen wird anstatt eine Summierung des Beitrags des aktuellen Zeitschrittes zu dem Beitrag aller vorhergehenden Zeitschritte.

Somit führt ein zu niedriger Wert von B_{NO} durch wiederholtes teilweise Überschreiben der Lösung zu deutlich niedrigeren Werten des NO-Massenbruchs als ein etwas höherer Wert der Modellkonstante B_{NO}, wobei gleichzeitig die Bedingung $B_{\mathrm{NO}} \ll w_{\mathrm{NO}}$ erfüllt sein muß.

Durch wiederholtes Ausprobieren von Werten in einem Betriebspunkt eines Anwendungsfalles am Quadratischen Forschungsmotor wurden der Wert der Modellkonstante $B_{\mathrm{NO}} = 5,0 \cdot 10^{-8}$ festgelegt und $A_{\mathrm{NO}} = 10000$ gewählt. Mit diesen Werten konnte die NO-Bildung für unterschiedliche Zündzeitpunkte berechnet werden.

6.3 Numerisches Lösungsverfahren

Zur numerischen Lösung der Transportgleichungen, die die reaktive Strömung beschreiben, werden in den gängigen Strömungsberechnungsprogrammen zur Zeit eine Vielzahl von Algorithmen zur Verfügung gestellt, die sich in ihrer Geschwindigkeit, Stabilität und ihrem Anwendungsbereich deutlich unterscheiden. Sie sind jeweils für bestimmte Anwendungen

(stationäre oder transiente Strömung, blockstrukturierte oder unstrukturierte Rechennetze) geeignet. In der Regel werden dabei versetzte Gitter benutzt. Üblich sind Druckkorrekturverfahren, z.B. der Simple-Algorithmus ("Semi-Implizit Method for Pressure-Linked Equations"); Details dazu sind bei Noll [60] zu finden.

In dem Strömungsberechnungsprogramm Star-CD wird der Simple-Algorithmus nur für stationäre Strömungen angewendet, für transiente Strömungsberechnungen wird der effizientere PISO-Algorithmus vorgeschrieben, der in der vorliegenden Arbeit ausschließlich verwendet wurde.

PISO ist ein nicht-iteratives Lösungsverfahren [64], das eine Zerlegung der Operationen zur Lösung der diskretisierten Form der Gleichungen für die primitiven Strömungsvariablen (die Komponenten der Geschwindigkeit sowie Druck, Enthalpie, Turbulenzgrößen und Massenbrüche) erlaubt, so daß eine Entkopplung und sequentielle Lösung dieser Gleichungen vorgenommen wird. Der Name des Lösungsverfahrens PISO steht für „Pressure Implicit with Splitting of Operators". Das in jedem Zeitschritt berechnete Strömungsfeld ist eine Näherung der exakten Lösung der Differentialgleichungen, wobei der zeitlichen Diskretisierungsfehler proportional zum Quadrat der Zeitschrittweite δt ist. Dabei wird in einem ersten Schritt („predictor step") das in dem letzten vorhergehenden Zeitschritt berechnete Druckfeld verwendet, um die Impulsgleichung in dem aktuellen Zeitschritt zu lösen. Die Geschwindigkeitskomponenten im aktuellen Zeitschritt u_i^p, die auf diese Weise abgeschätzt werden, erfüllen in der Regel nicht gleichzeitig auch die Kontinuitätsgleichung.

In einem zweiten Scritt, dem ersten „corrector step", werden, ausgehend von den geschätzten Geschwindigkeiten u_i^p, die Impulsgleichung und die Kontinuitätsgleichung erneut gelöst; die erhaltenen Werte u_i^{c1} und p^{c1} sind die Eingangsgrößen in einem folgenden Schritt, dem zweiten „corrector step". Weitere „corrector steps" können eingeführt werden, bis der Fehler ein vorgegebenes Maß unterschreitet. Nach Ansicht der Code-Entwickler sind mehr als zwei Korrektor-Schritte in der Regel nicht notwendig [63]; die maximal zulässige Zahl der Korrektor-Schritte ist vom Anwender selbst zu bestimmen (in diesem Fall waren es 20).

Kapitel 7

Ergebnisse

Ziel der Arbeit ist die Integration in den Star-CD-Code einer auf der Flamelet-Modellierung beruhenden Berechnungsmethode für den ottomotorischen Verbrennungsprozeß in Abhängigkeit von Motorengeometrie und der vorgegebenen Betriebsparameter (Last, Drehzahl, Äquivalenzverhältnis, Zündzeitpunkt) sowie die Anwendung des entwickelten Codes für den Fall des Ottomotors M112-3V/DZ der Daimler Benz AG und des Quadratischen Forschungsmotors (Daimler Benz AG, F1M/T). Damit soll einerseits die Verifikation der numerischen Ergebnisse (3D-Flammenausbreitung, Energiebilanz, Abgaszusammensetzung inkl. CO und NO) anhand der entsprechenden experimentellen Daten vollzogen werden, um die Möglichkeiten und Grenzen der eingebauten Modelle und Konzepte zu bewerten und auszubauen. Gleichzeitig kann den Motorenentwicklern ein detaillierter Einblick in die spezifischen Strömungsverhältnisse des Ottomotors M112-3V/DZ sowie deren Auswirkungen auf Leistung und Abgasemissionen ermöglicht werden. Der Einfluß numerischer Effekte (Netzfeinheit, Diskretisierungsverfahren, Verzerrung der Zellen des Rechengitters) soll untersucht werden. Als zweite Anwendung und Verifikation des Flamelet-Modells soll die Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung am Quadratischen Forschungsmotor erfolgen, für welchen detaillierte experimentelle Daten vorliegen.

7.1 Berechnungen für den M112-3V/DZ (Vierhubtriebwerk)

7.1.1 Versuchsträger

Bei der Simulation der Verbrennung und der Schadstoffbildung eines Serienmotors ist die Genauigkeit der Strömungsberechnung (Hauptströmung, Turbulenz, Gemischbildung) während des Ladungswechsels entscheidend. Dabei spielen eine Reihe von sehr komplexen und in Simulationen zur Zeit noch sehr schwer darstellbaren Phänomene wie Kraftstoff-Spray, Wandfilm, Inhomogenität des Mischungsbruches zum Zündzeitpunkt oder die zyklischen Schwankungen des Drucks und der Verteilung der Restgaszusammensetzung im Brennraum eine wichtige Rolle. Bei der Verifikation eines Modells zur Verbrennung bzw. Schadstoffbildung sind diese Einflußfaktoren unerwünscht.

Zur Untersuchung der Strömung, Gemischbildung und Verbrennung des Ottomotors

M112-3V/DZ unter möglichst vereinfachenden und möglichst genau reproduzierbaren Anfangs- und Randbedingungen wurden Messungen zum Druckverlauf, zu den Flammenankunftszeiten an verschiedenen Punkten im Brennraum und zu den Konzentrationen der Abgaskomponenten nicht an einem Serienmotor, sondern an einem Vierhubtriebwerk (VHT) durchgeführt [65]. Die Geometrien des Brennraums und der Einlaßkanäle sind mit denen des Serienmotors M112-3V/DZ identisch. Der Kraftstoff und die Art der Gemischbildung sind jedoch unterschiedlich. Das Auslaßventil bleibt während des Betriebs am VHT permanent geschlossen. Deshalb müssen Auslaßventil und Auslaßkanal bei der 3D-Simulation nicht mitmodelliert werden. Die Geometrie des Zylinders mit dem Einlaßkanal ist in Abb. 7.1 dargestellt. Aufgrund der Symmetrie ist es ausreichend, bei der Berechnung nur eine der beiden Hälften als bewegtes dreidimensionales Rechengitter aufzubauen.

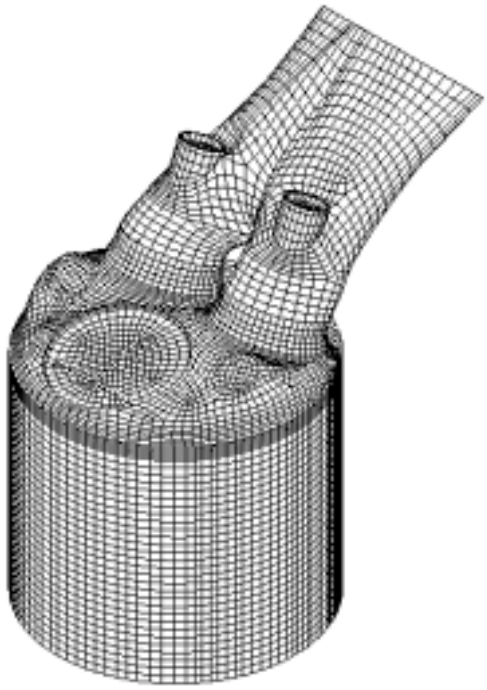

Abbildung 7.1: Geometrie des M112-3V/DZ.

Die technischen Daten des Motors M112-3V/DZ sind:

Bohrung:	$D = 95$ mm
Hub:	$H = 82$ mm
Pleuellänge:	$l = 154$ mm
Schubstangenverhältnis:	$\lambda_S = 0,266$
Hubvolumen:	$V_H = 581\text{cm}^3$
Verdichtungsverhältnis	$\epsilon = 10$
Durchmesser Einlaßventil:	$D_E = 35$ mm
Durchmesser Auslaßventil:	$D_A = 38$ mm

7.1.2 Anfangs- und Randbedingungen

Der Einfluß der zyklischen Schwankungen auf die Anfangsbedingungen im Strömungsgebiet wird durch die Begrenzung der Kolbenbewegung auf vier Takte ausgeschlossen. Die Reihen-

folge der aufeinanderfolgenden Takte am VHT ist:

1) Ausschieben
2) Ansaugen
3) Verdichten
4) Expansion.

Um den Einfluß der Zweiphasenströmungen auszuschließen, wird ein stöchiometrisches Gemisch aus Propan und synthetischer Luft angesaugt. Die Anfangsbedingungen für die Simulation (Druck und Temperatur im Zylinder und Einlaßkanal, Wandtemperaturen bei 345 °KW) sind durch das Spülen mit dem stöchiometrischen Gasgemisch und Absaugen des Zylinders im unteren Totpunkt auf den Befülldruck $p_A = 50$ mbar bei Umgebungstemperatur und die anschließende Kompression auf Abgasgegendruck ($p_{0,B} = 1.0$ bar) mit hoher Genauigkeit bestimmt [65]. Die Temperatur des Gasgemisches im Brennraum beträgt $T_{0,B} = 531$ K (durch Berechnung mit dem Ladungswechsel-Programm PROMO vorgegeben). Das komprimierte Gas im Brennraum wird als ruhend betrachtet ($\vec{v}_{0,B}\,(\vec{r}) = 0$).

Zum gleichen Zeitpunkt (345 °KW) wird im Einlaßkanal ein ruhendes, stöchiometrisches Gasgemisch bei Umgebungsdruck und -temperatur angenommen ($\vec{v}_{0,E}\,(\vec{r}) = 0$, $p_{0,E} = 1,00$ bar, $T_{0,E} = 293$ K).

Zum Vergleich wurden auch Berechnungen durchgeführt mit der Annahme, daß sich im Brennraum zu Beginn der Berechnung Luft unter gleichen Bedingungen (Temperatur und Druck) befindet bzw. ein Gasgemisch entsprechend der Zusammensetzung des stöchiometrischen, vollständig verbrannten Propan-Luft-Gemisches (mit den Massenbrüchen $w_{\mathrm{CO_2}} = 0.1799$, $w_{\mathrm{H_2O}} = 0.0985$, $w_{\mathrm{N_2}} = 0.7216$). Weil die Darstellung all dieser Ergebnisse den Rahmen in dieser Arbeit zu sehr vergrößern würde, muß auf diese Vergleichsrechnungen (bis auf einige wenige Abbildungen in § 6.1.4) verzichtet werden.

Die Randbedingungen im Eintrittsquerschnitt des Einlaßkanals (Geschwindigkeit, Druck Temperatur, Dichte des einströmenden Gasgemisches) wurden von Berechnungen mit PROMO übernommen, die Turbulenzgrößen $\tilde{k} = 3,2\ \mathrm{m^2/s^2}$ und $\tilde{\epsilon} = 500\ \mathrm{m^2/s^3}$ wurden geschätzt.

Um den Einfluß der Netzfeinheit auf die Ergebnisse der Verbrennungsrechnung zu untersuchen, wurden 3 unterschiedlich fein aufgelöste Rechennetze verwendet:

- das „grobe“ Netz, mit ca. 59000 Zellen, von denen 7000 Zellen den Einlaßkanal, ca. 52000 den Brennraum in UT, ca. 9000 Zellen den Brennraum in OT abbilden (Snapping-Algorithmus, s. § 5.1),

- das „feine“ Netz, mit ca. 340000 Zellen, von denen 20000 den Einlaßkanal und ca. 305000 den Brennraum in UT, ca. 80000 Zellen den Brennraum in OT abbilden (ebenfalls Snapping-Algorithmus),

- das „verfeinerte“ Netz, mit ca. 134000 Zellen, die ausschließlich den Brennraum in der Nähe des oberen Totpunkts (55 °KW v. OT bis 100 °KW n. OT) abbilden. Es wird eine über ein Unterprogramm gesteuerte Knotenbewegung ausgeführt (d.h. einfache Netzbewegung ohne Topologiewechsel). Das Netz wurde so aufgebaut, daß die numerischen Fehler bei der Berechnung des Tumble-Zerfalls minimiert werden. Die Anfangsbedingungen (bei 55 °KW v. OT) werden durch Interpolation der Ergebnisse des groben Netzes zum entsprechenden Zeitpunkt berechnet.

7.1.3 Berechnung des Ladungswechsels mit dem „groben“ Netz

Mit den im vorherigen Abschnitt beschriebenen Anfangs- und Randbedingungen wurden für den Betriebspunkt $n = 1500$ min^{-1}, Vollast, Berechnungen der „kalten“ Strömung durchgeführt, beginnend mit einem Zeitpunkt kurz vor Öffnen des Einlaßventils (345 °KW) bis zum Zündzeitpunkt (705 °KW bzw. bis 708 °KW).

Die Berechnung zeigt im Zeitintervall zwischen Öffnen des Einlaßventils und GOT eine kurzzeitige Rückströmung des Gasgemisches aus dem Zylinder in den Zwillingseinlaßkanal, welche durch die Aufwärtsbewegung des Kolbens bestimmt wird. Im Ventilspalt treten dabei Geschwindigkeiten von ca. 100 m/s auf. Der dadurch resultierende Massenfluß ist jedoch wegen des kleinen Ventilhubs nur gering. Bei ca. 360 °KW ist die Rückströmung in den Einlaßkanal beendet, der Richtungssinn der Hauptströmung kehrt sich um. Frischgas von stöchiometrischer Zusammensetzung strömt nun durch den Einlaßkanal in den Zylinder und der turbulente Mischungsprozeß mit dem im Zylinder vorhandenen Restgas findet statt. Es bilden sich komplexe dreidimensionale großskalige Wirbelstrukturen aus, die in erster Linie durch die Geometrie des Zwillingseinlaßkanals und des Brennraums bestimmt werden.

Die dominanten Wirbelstrukturen besitzen ein Drehachse senkrecht zur Zylinderachse (Tumble). Kleinere Wirbelstrukturen sind in der Nähe des Kolbenbodens zu finden. In den Abb. 6.2 bis 6.7 ist das Geschwindigkeitsfeld zu verschiedenen Zeitpunkten in einer senkrechten, zur Symmetrieebene des Zylinders parallelen Schnittebene durch das Einlaßventil dargestellt.

Darauffolgend, in Abb. 6.8 bis 6.11, sind die berechneten Felder der turbulenten kinetischen Energie der Strömung und des Massenbruchs des Frischgases während des Ladungswechsels abgebildet (gleiche Schnittebene).

Bei der Berechnung wurde der UPWIND-Diskretisierungsansatz angewendet. Die turbulente Prandtl-Zahl und die turbulente Schmidt-Zahl für jede der chemischen Spezies und für den Mischungsbruch wurden mit den vom Star-CD Handbuch empfohlenen Werten ($Pr_{turb} = Sch_{turb} = 0,9$) angenommen. In die Berechnung gehen während des Ladungswechsels keinerlei sonstige Modellkonstanten oder Parameter ein.

Zum Vergleich zwischen Messung und Berechnung stehen während des Ladungswechsels relativ wenige Daten zur Verfügung. Dies ist in erster Linie der indizierte Druckverlauf (s. Abb. 6.12). Man stellt eine sehr gute Übereinstimmung von Messung und Star-CD-Rechnung fest: Bis 600 °KW beträgt die Abweichung des berechneten Druckverlaufs von dem Mittelwert der gemessenen Druckkurven max. 3 %. Dies bedeutet, daß die gesetzten Randbedingungen am Einlaßkanal während des Ladungswechsels mit sehr guter Genauigkeit bestimmt wurden. Ab der Kurbelwinkelstellung 600 °KW stellt man eine kontinuierliche Abweichung des berechneten Druckverlaufs zu höheren Werten fest. Bei 640 °KW erreicht der berechnete Druck den maximalen (in 10 Zyklen) gemessenen Druck und folgt diesem etwa bis 690 °KW (relativer Fehler zw. 5 und 8 %). Ab diesem Zeitpunkt verläßt der berechnete Druckverlauf den durch Messungen bestimmten Druckbereich. Zum Zündzeitpunkt (708 °KW) beträgt der berechnete Wert des Zylinderdrucks 17,9 bar, der arithmetische Mittelwert der Messungen 17,05 bar, der Maximalwert aller Messungen 17,2 bar. Dies entspricht einem relativen Fehler von ca. 5 % in Richtung höherer Werte.

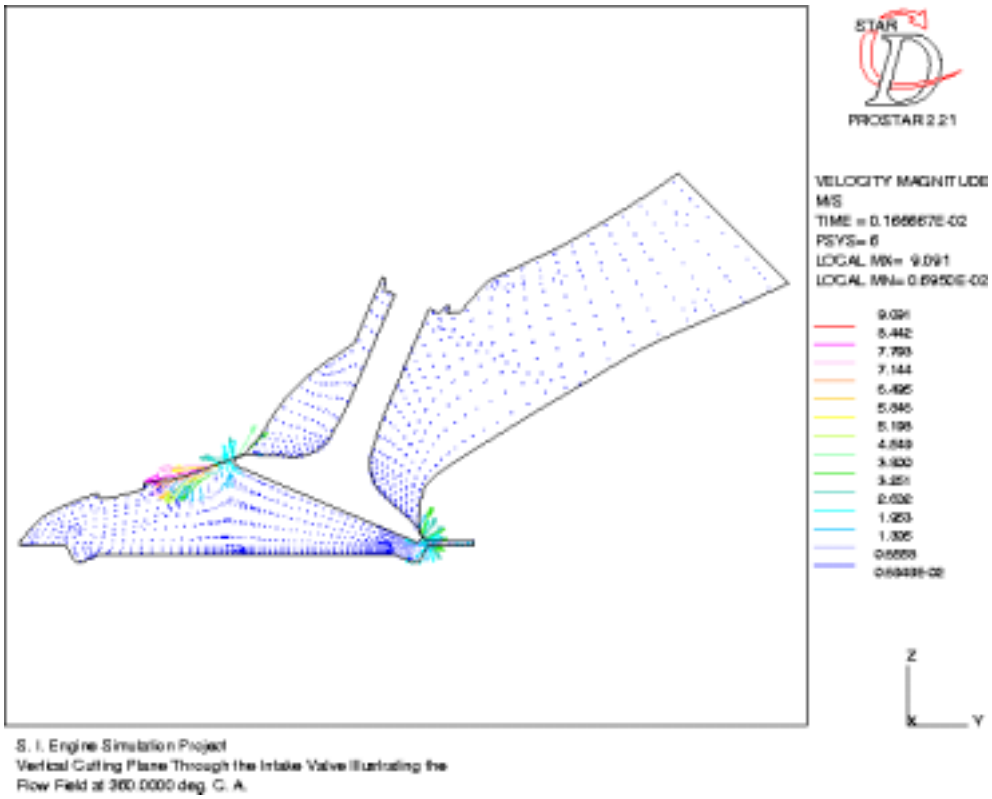

Abbildung 7.2: Geschwindigkeitsfeld bei 360 °KW (Gaswechsel-OT) in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

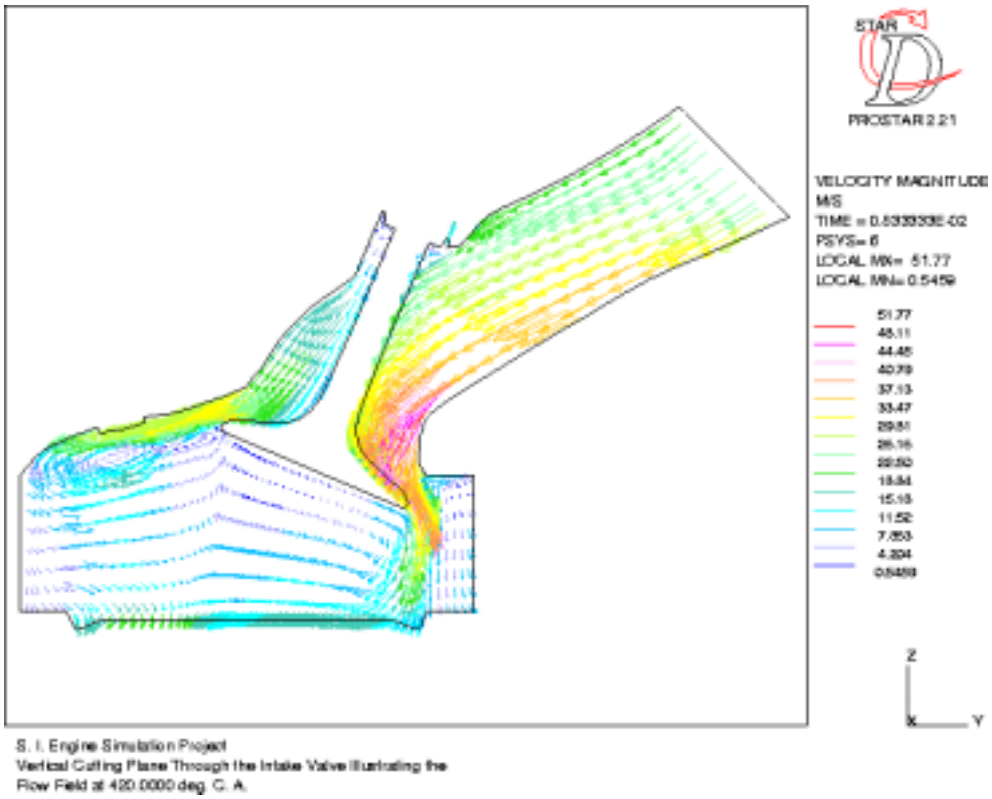

Abbildung 7.3: Geschwindigkeitsfeld bei 420 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

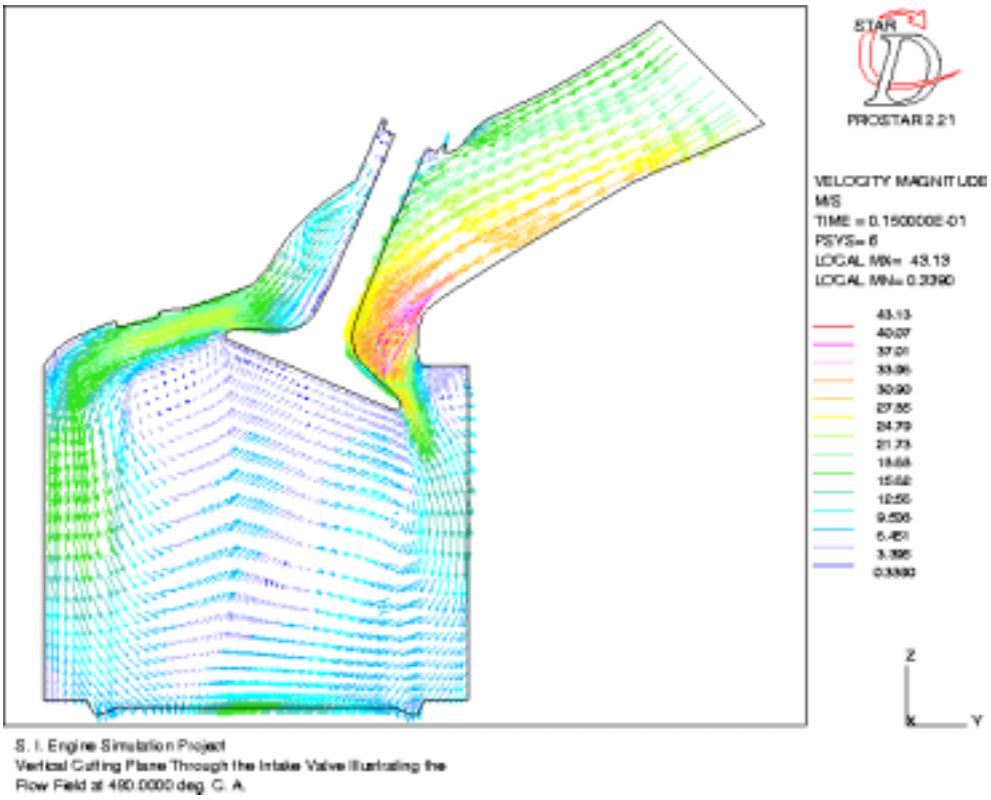

Abbildung 7.4: Geschwindigkeitsfeld bei 480 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

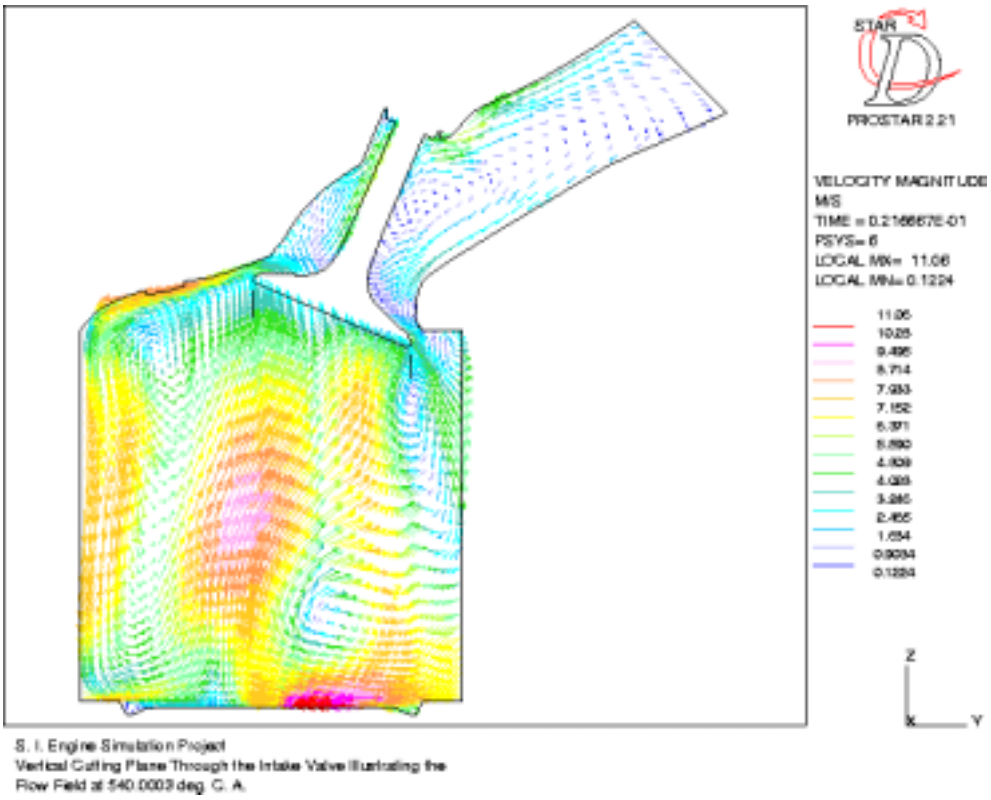

Abbildung 7.5: Geschwindigkeitsfeld bei 540 °KW (Gaswechsel-UT) in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

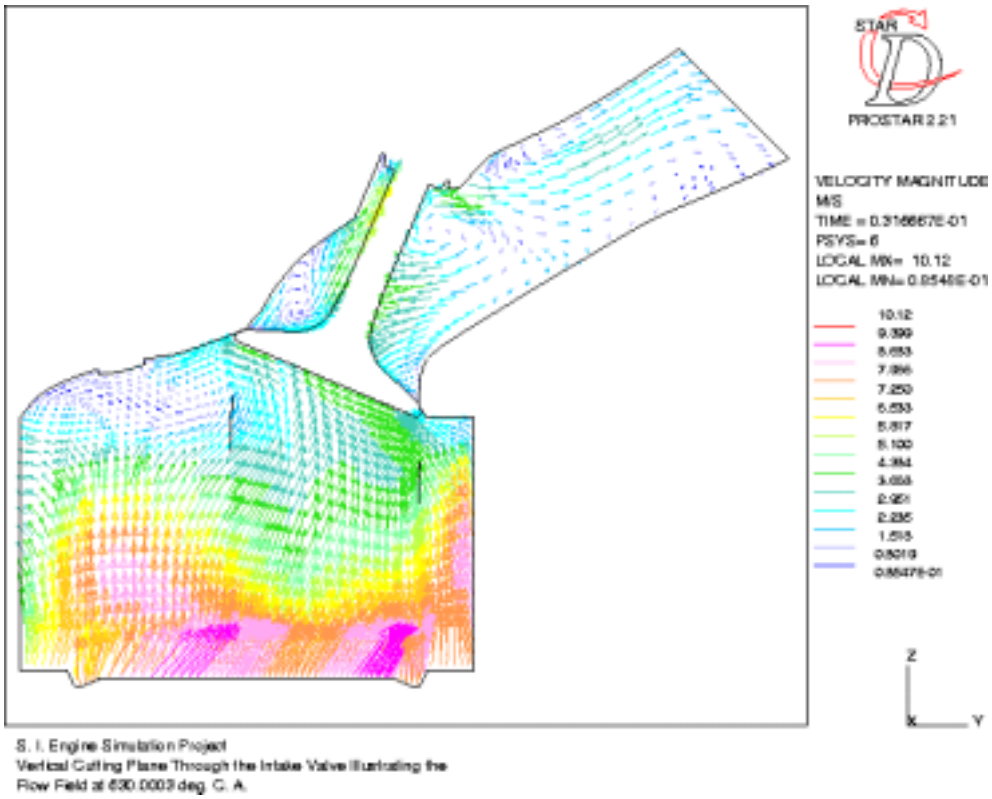

Abbildung 7.6: Geschwindigkeitsfeld bei 630 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

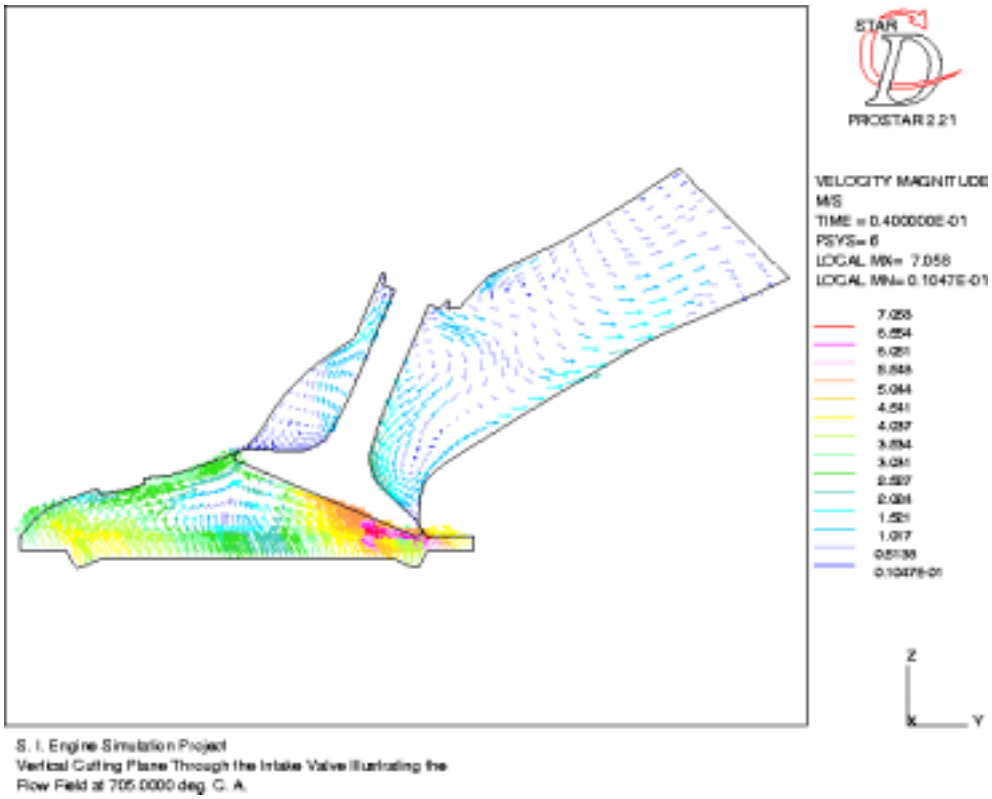

Abbildung 7.7: Geschwindigkeitsfeld bei 705 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

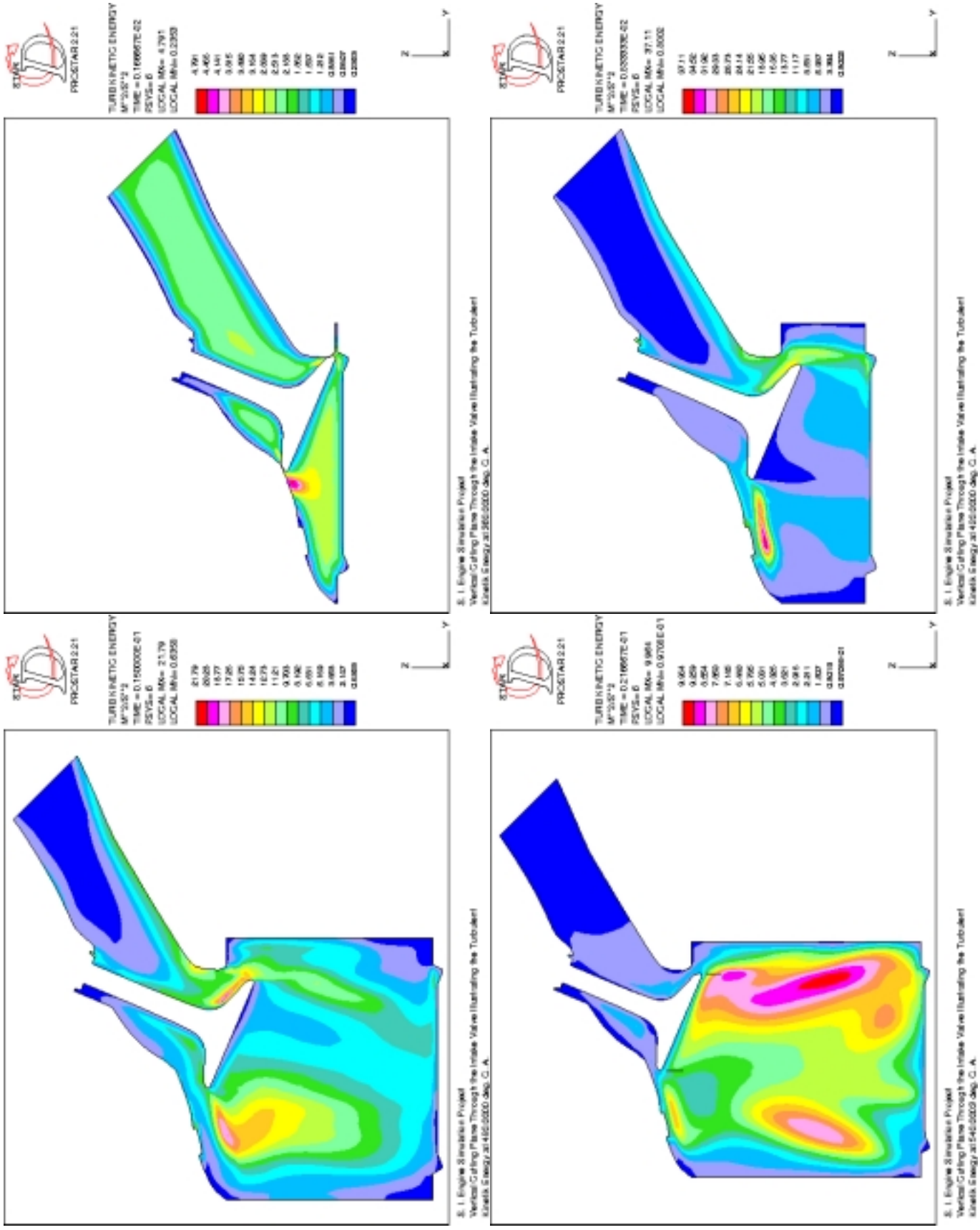

Abbildung 7.8: Turbulente kinetische Energie bei 360 °KW (GOT), 420 °, 480 ° und 540 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

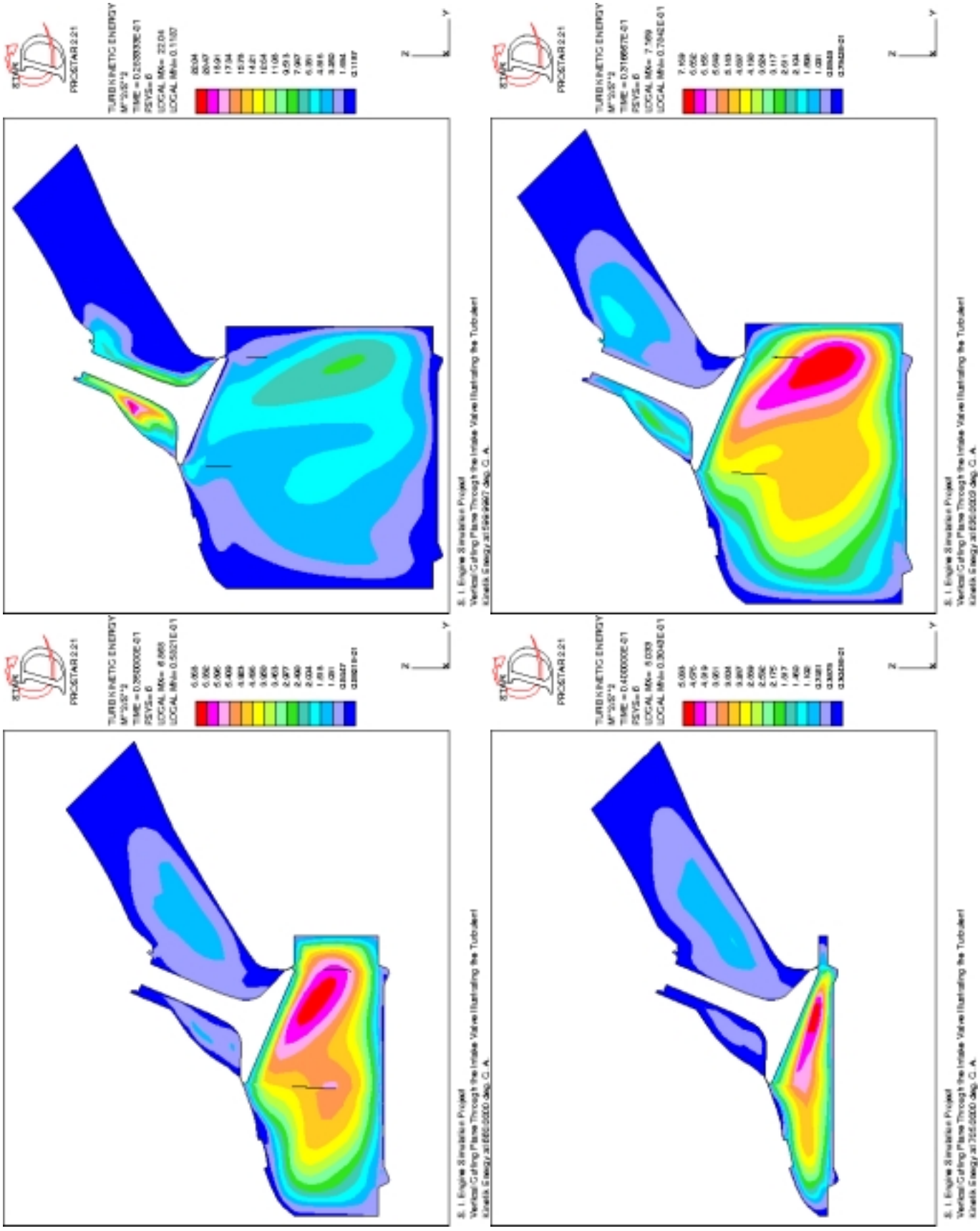

Abbildung 7.9: Turbulente kinetische Energie bei 600 °, 630 °, 660 ° und 705 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

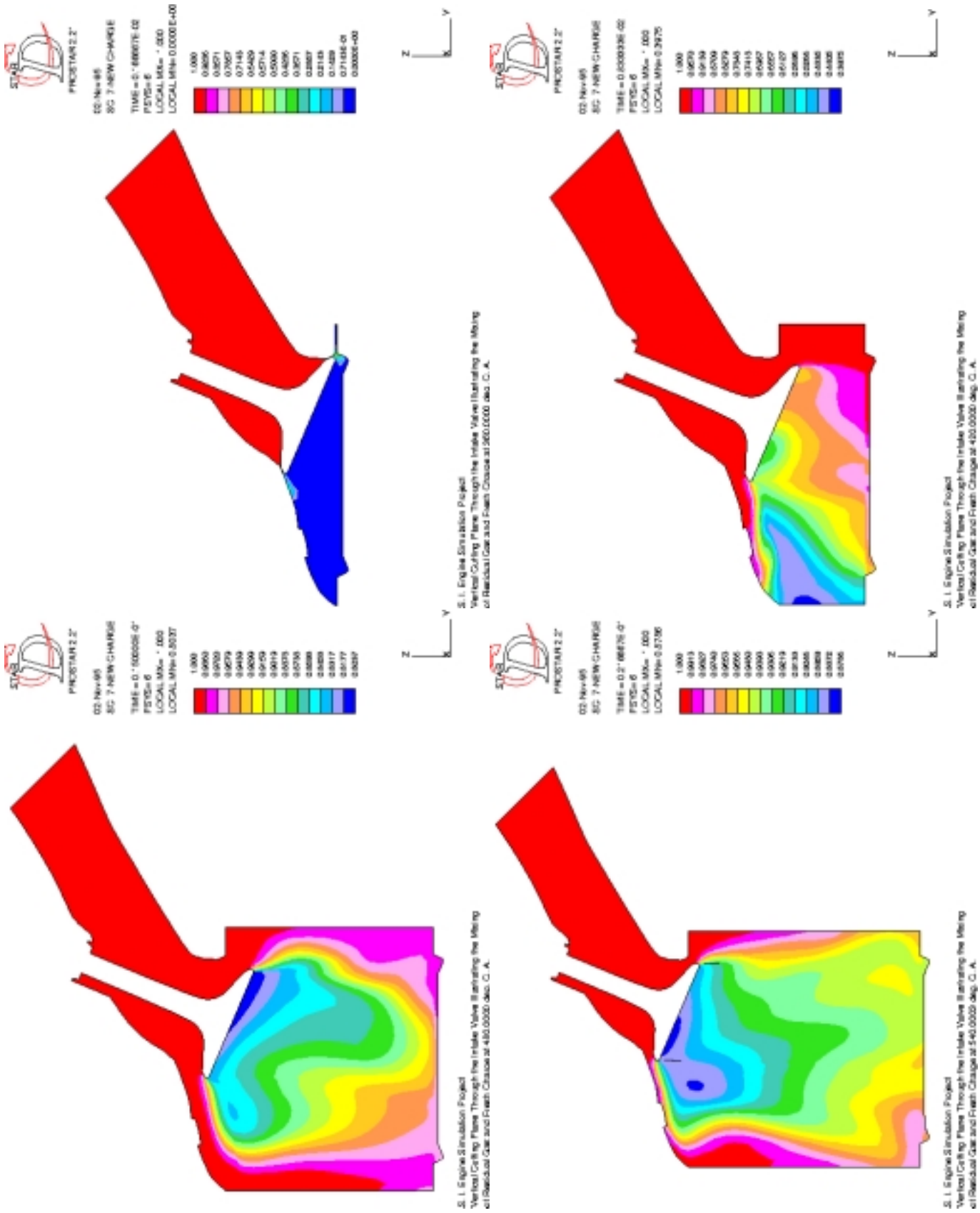

Abbildung 7.10: Massenbruch des Frischgases bei 360 °KW (GOT), 420 °, 480 ° und 540 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

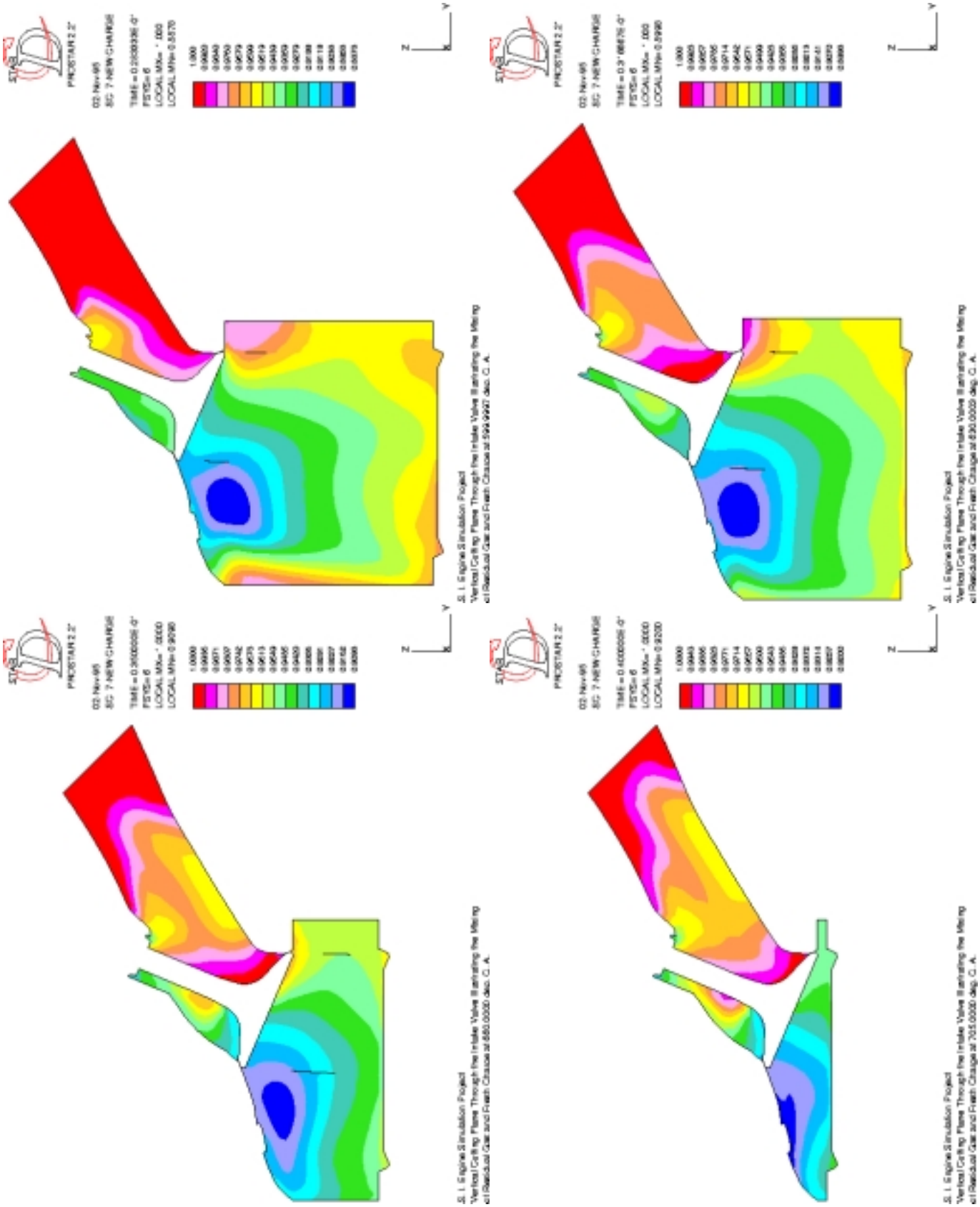

Abbildung 7.11: Massenbruch des Frischgases bei 600 °, 630 °, 660 ° und 705 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

Der Fehler wird nach Ansicht der Prüfstandsleitung auf eine konstruktionsbedingt am Vierhubtriebwerk unregelmäßig auftretende Leckage zurückgeführt. Diese wurde in der Berechnung vernachlässigt. Zusätzlich muß man von einer Abweichung der Brennraumgeometrie in der Nähe des Zünd-OT von der ursprünglichen Form ausgehen, weil der hohe Druck eine Verformung der Motorkomponenten verursacht, so daß das reale Verdichtungsverhältnis nur $\epsilon \approx 9.5$ anstelle des theoretischen Verdichtungsverhältnisses von $\epsilon = 10$ beträgt. Eine solche Verformung der Brennraumgeometrie wurde ebenfalls nicht berücksichtigt. Jeder der beiden Effekte führt zu niedrigeren Werten des gemessenen Brennraumdrucks im Vergleich zur Berechnung.

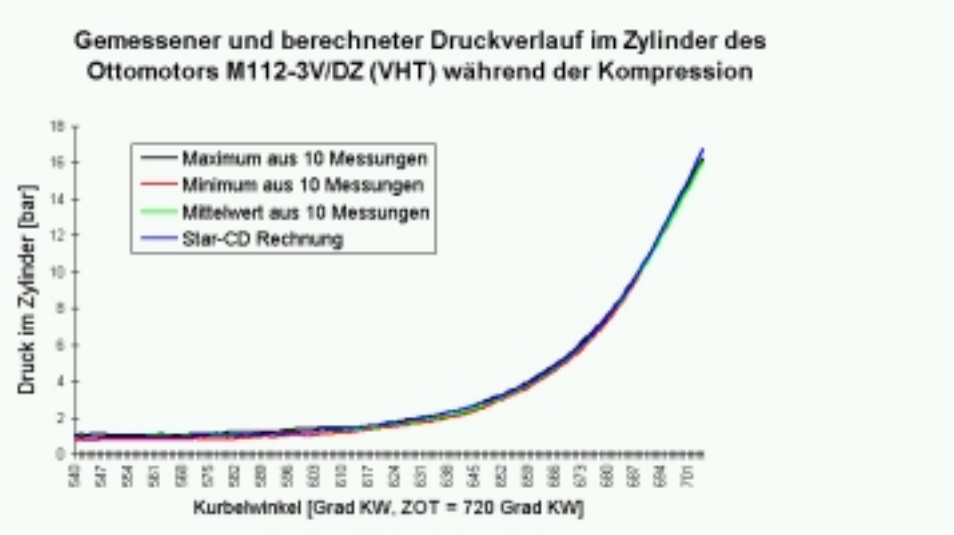

Abbildung 7.12: Vergleich des gemessenen und berechneten Druckverlaufs beim Ottomotor M112-3V/DZ (VHT) bis zum Zündzeitpunkt.

Des weiteren liegt eine Bestimmung des Geschwindigkeitsfeldes mittels der Teilchenspur-Anemometrie (engl.: Particle Image Velocimetry“, PIV) in Verbindung mit Laserlichtschnitt für bestimmte Kurbelwinkelstellungen vor. Der Vergleich von PIV-Messung und Star-CD-Rechnung in der Symmetrieebene des Zylinders ergibt eine gute Übereinstimmung der groben Strukturen des Geschwindigkeitsfeldes (W. Rumez, [61]).

7.1.4 Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung mit dem „groben“ Netz

Ausgehend von der Berechnung des Strömungsfeldes zum Zündzeitpunkt wurde die Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung für den M112-3V/DZ (VHT) mit dem „groben“ Netz durchgeführt. Als erstes muß der noch unbekannte Korrekturfaktor für die Netzabhängigkeit der Turbulenzgrößen $K_{Netz} = A^2_{Netz} \approx 10$ bestimmt werden (s. § 5.1.2). Dies kann durch Abgleich des Wertes des Spitzendrucks in Messung und Rechnung erfolgen. Zu diesem Zweck wurde der numerische Parameter A_{Netz} ausgehend von dem Wert $A_{Netz} = 2,0$ schrittweise erhöht bis zur bestmöglichsten Übereinstimmung des Druckverlaufs zwischen Rechnung und Messung. In Abb. 7.13 sind die so berechneten Druckverläufe zusammen mit

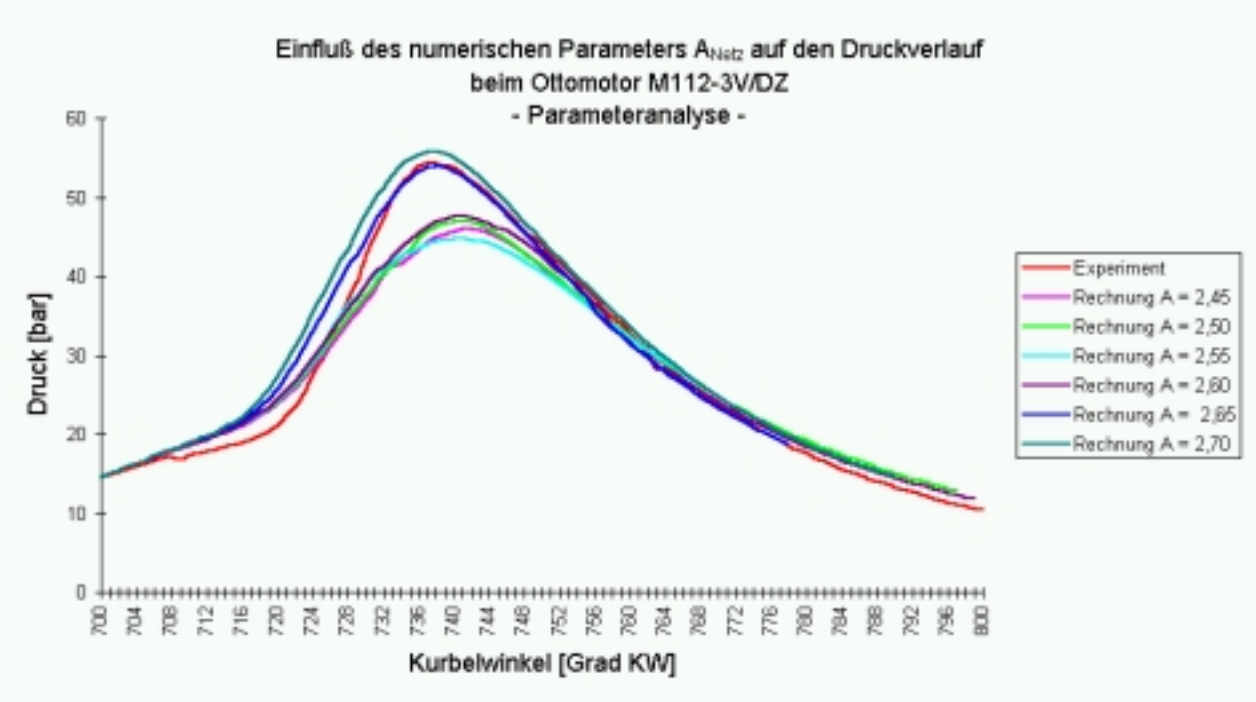

Abbildung 7.13: Parameterstudie zur Abhängigkeit des Druckverlaufs von dem numerischen Parameter A_{Netz} (Netzfeinheit) bei der Verbrennung.

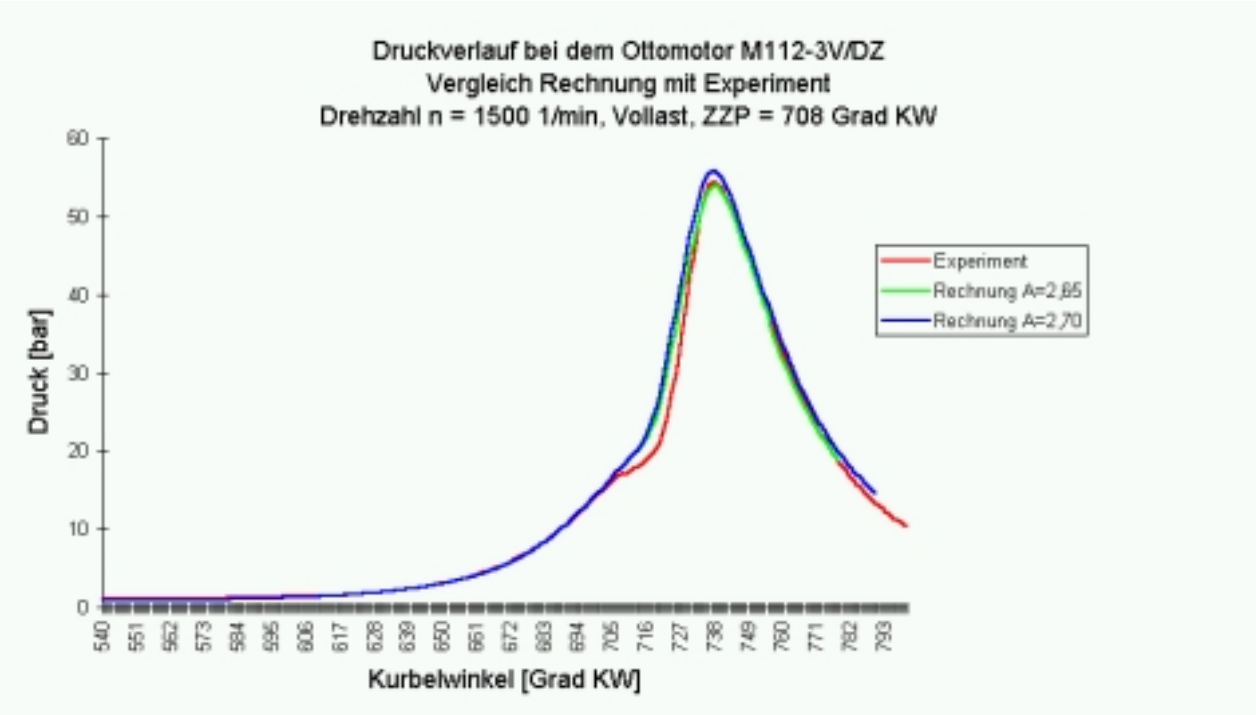

Abbildung 7.14: Berechneter Druckverlauf für den Ottomotor M112-3V/DZ bei bestmöglicher Übereinstimmung mit dem Experiment ($A_{Netz} = 2,65$ und $A_{Netz} = 2,70$).

der Messung dargestellt. Darin ist die Sensitivität des Wertes und der Kurbelwinkelposition des Spitzendrucks bezüglich A_{Netz} zu sehen. Abb. 7.14 zeigt den Druckverlauf in den beiden Fällen mit der besten Übereinstimmung. Dabei erreichen Höhe und Kurbelwinkellage des berechneten Spitzendrucks die experimentellen Werte $\bar{p}_{max} = 54,4$ bar bzw. $\bar{\theta}_{max} = 738\,°$KW gleichzeitig. Der somit bestimmte Wert des numerischen Parameters ist $A_{Netz} = 2,65$.

Die folgenden Abbildungen beziehen sich alle auf Berechnungen mit dem feststehenden Parameter A_{Netz} bei der bestmöglichen Übereinstimmung ($A_{Netz} = 2,65$). Die Berechnungen wurden für die Zündzeitpunkte ZZP = 705 °KW und 708 °KW durchgeführt.

Abbildung 7.15 zeigt den Volumen-gemittelten Temperaturverlauf im Brennraum während der Verbrennung. Der Maximalwert der mittleren Temperatur im Brennraum liegt bei 2550 K und wird bei 743 °KW erreicht.

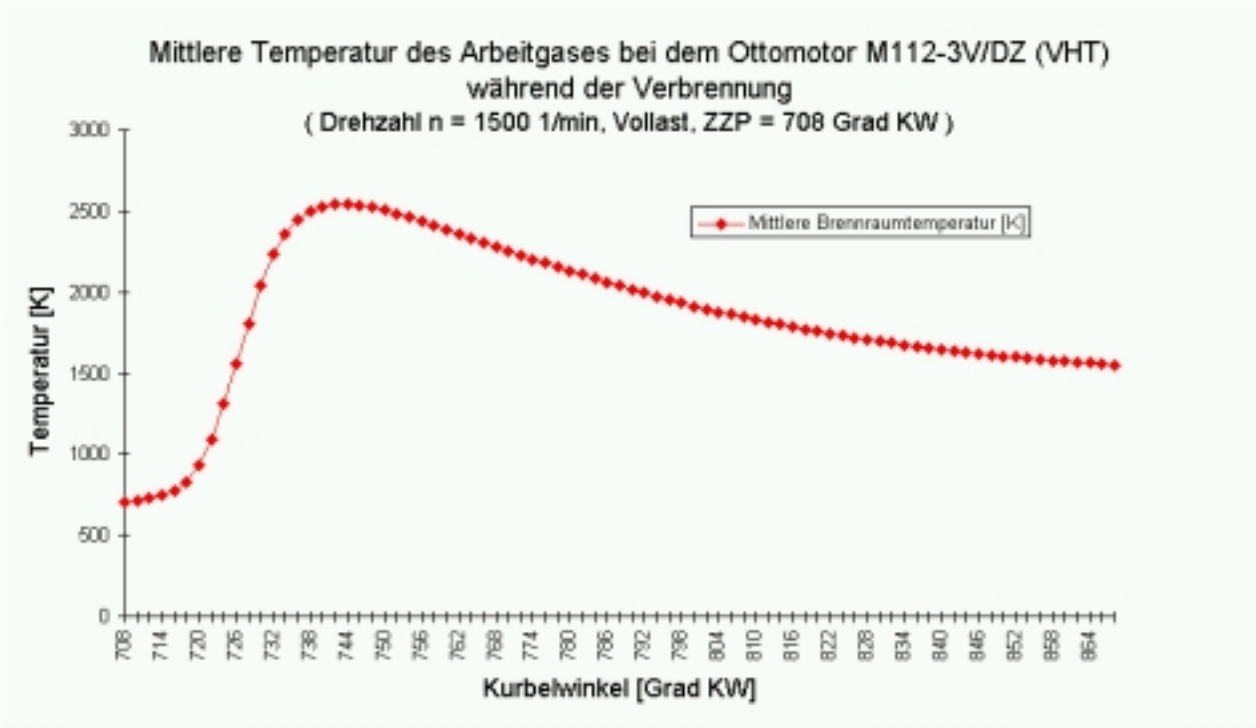

Abbildung 7.15: Mittlere Brennraumtemperatur während der Verbrennung.

Darauf folgen in Abb. 7.16 bis 7.27 die Ergebnisse aus der Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung (3D-Flammenausbreitung im Brennraum, Temperatur, turbulente kinetische Energie und Massenbrüche der verschiedenen Spezies) bei unterschiedlichen Kurbelwinkelstellungen (710 °, 720 °, 730 °, 740 °,750 °, 760 °, 778 °, 803 ° und 848 °KW).

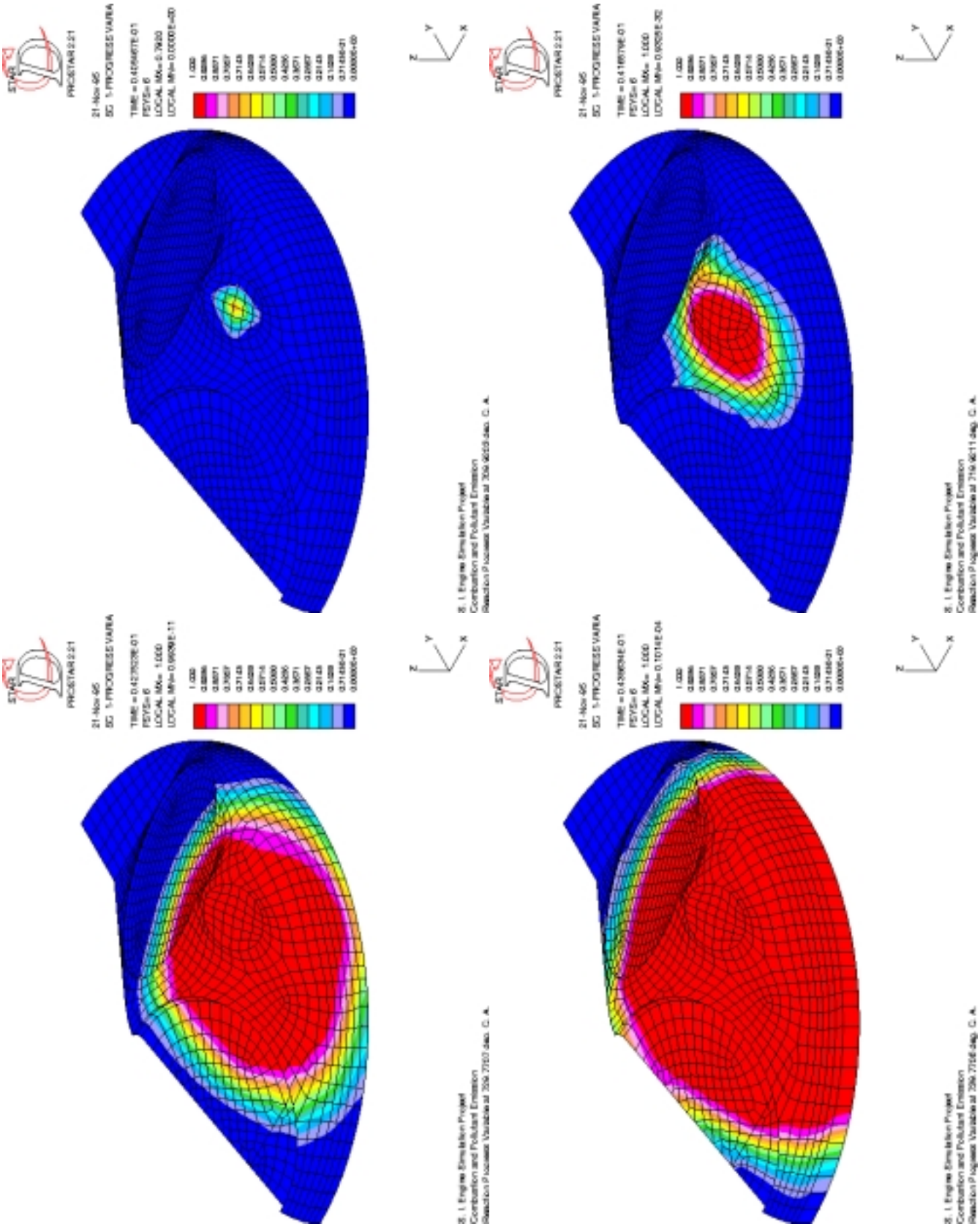

Abbildung 7.16: Flammenausbreitung im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT): Reaktionsfortschrittsvariable bei 710 °, 720 °, 730 ° und 740 °KW (ZZP = 708 °KW).

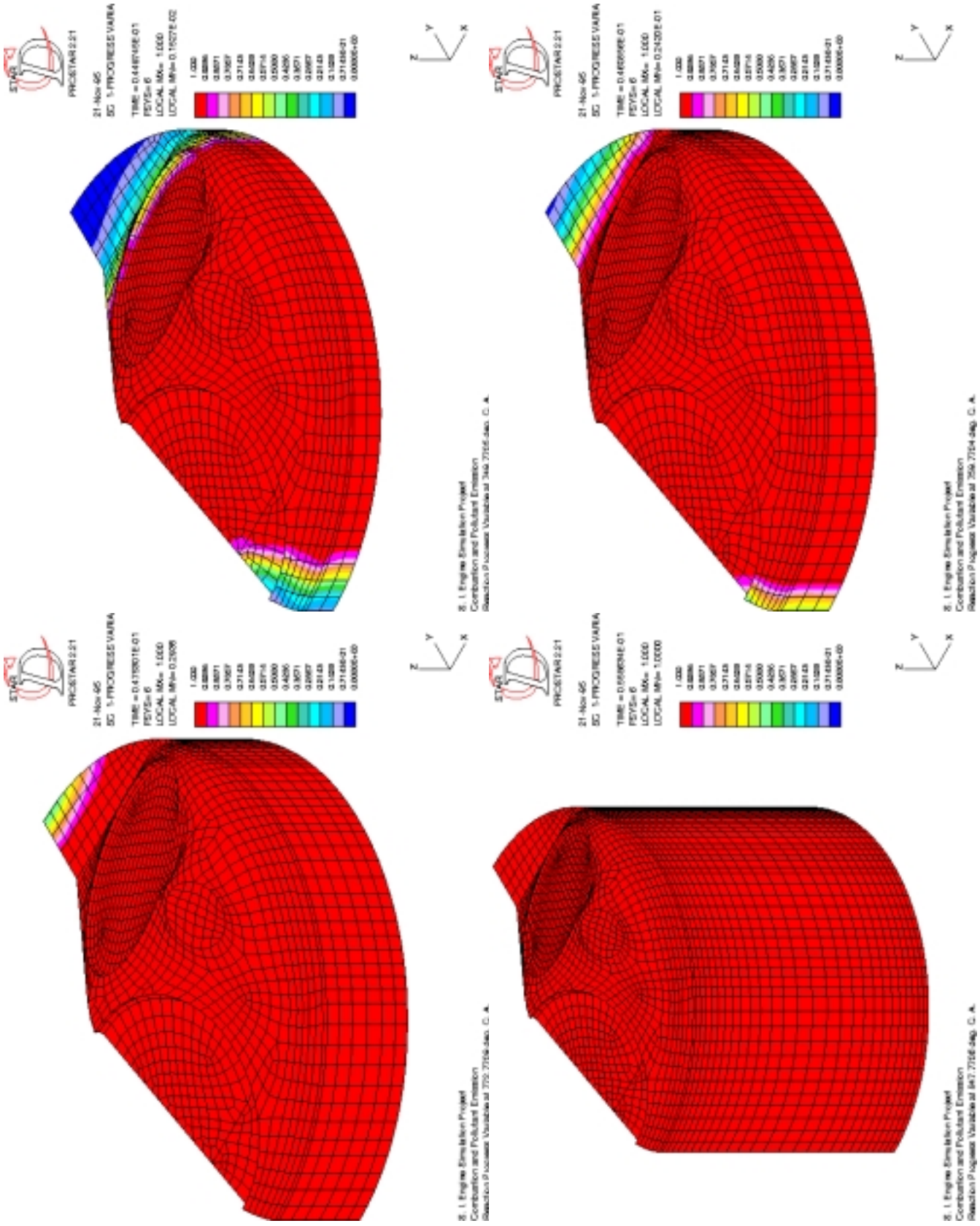

Abbildung 7.17: Flammenausbreitung im Brennraum: Reaktionsfortschrittsvariable bei 750 °, 760 °, 773 ° und 848 °KW (ZZP = 708 °KW).

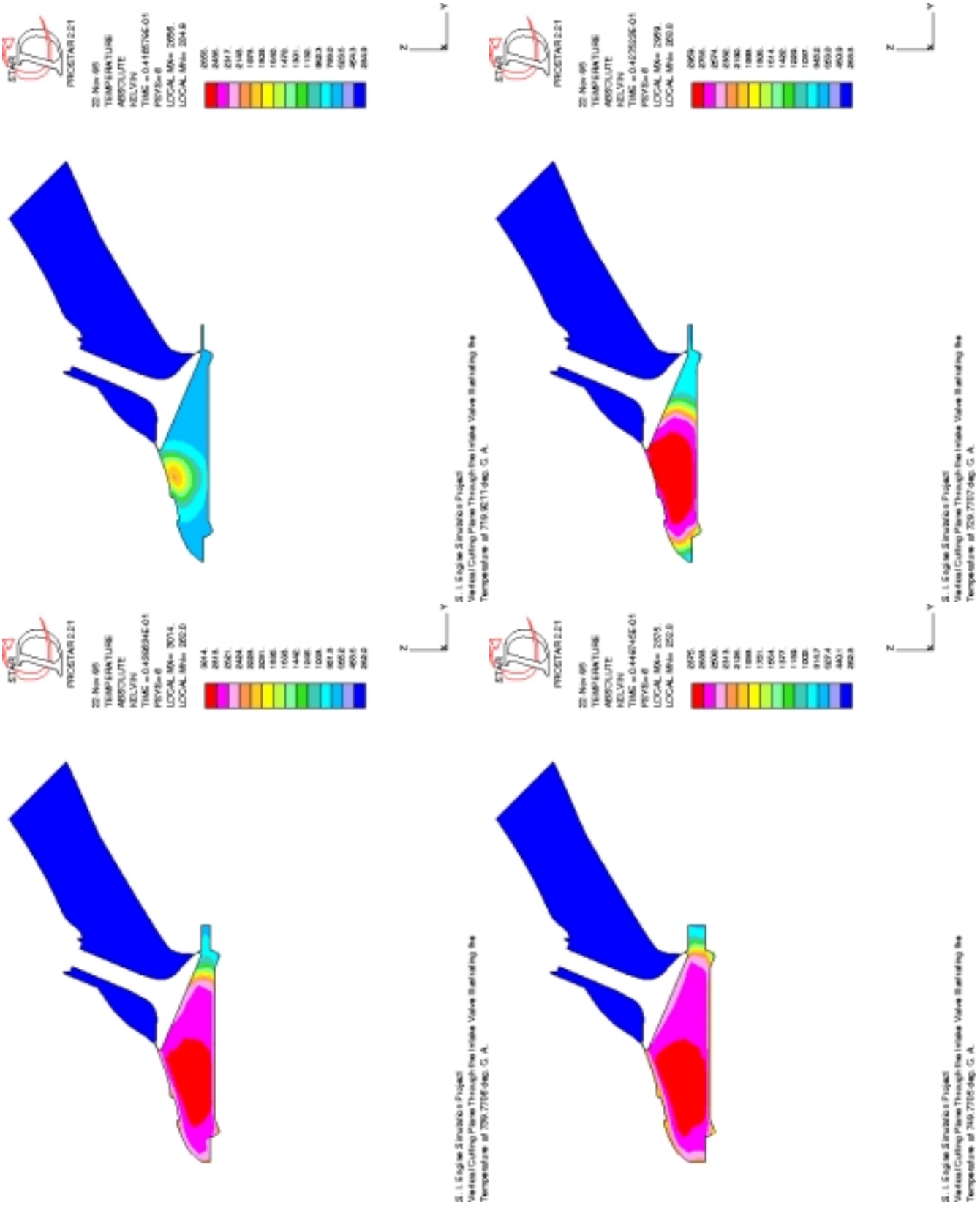

Abbildung 7.18: Temperaturfeld in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil bei 720 °, 730 °, 740 ° und 750 °KW.

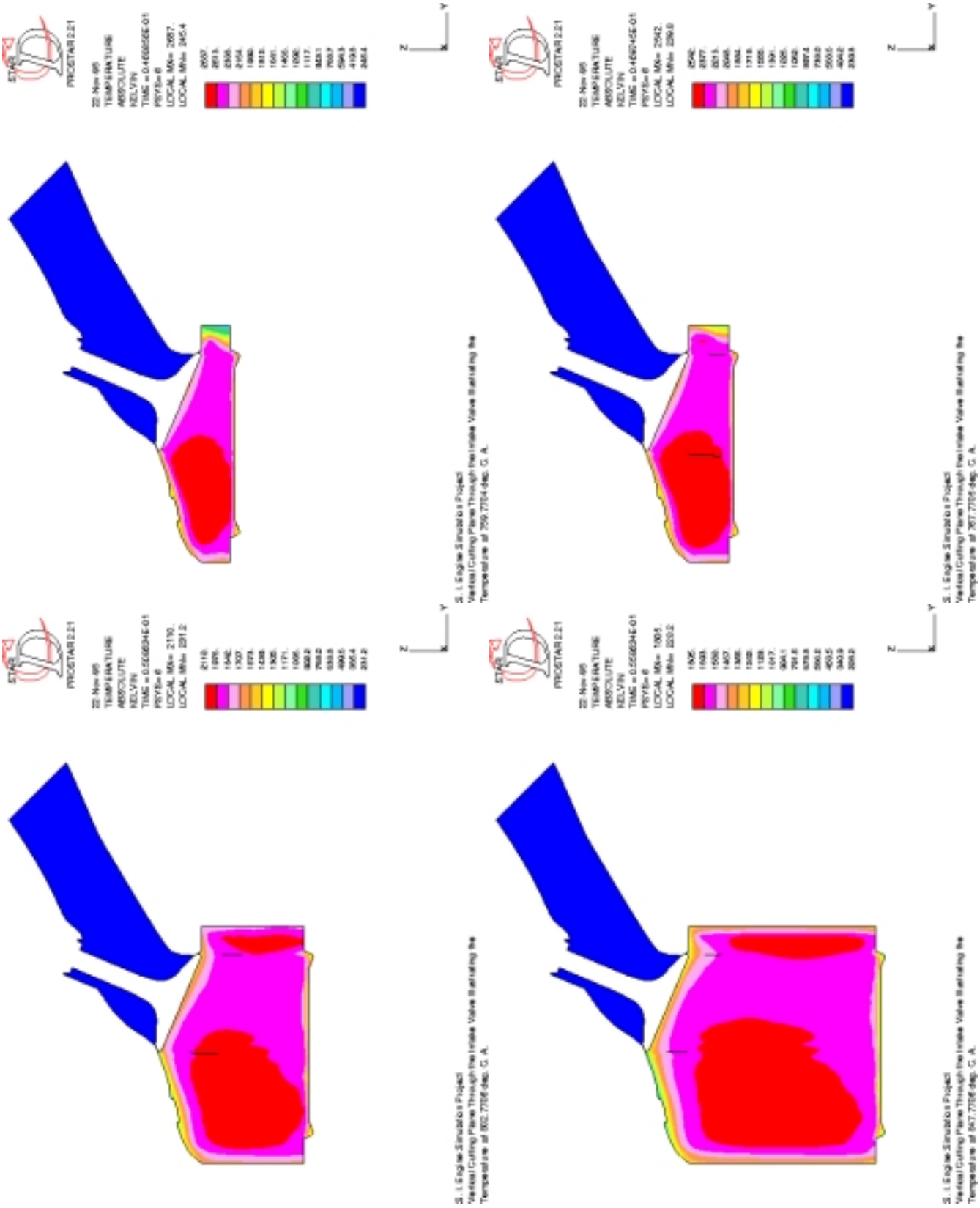

Abbildung 7.19: Temperaturfeld in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil bei 760 °, 768 °, 802 ° und 848 °KW.

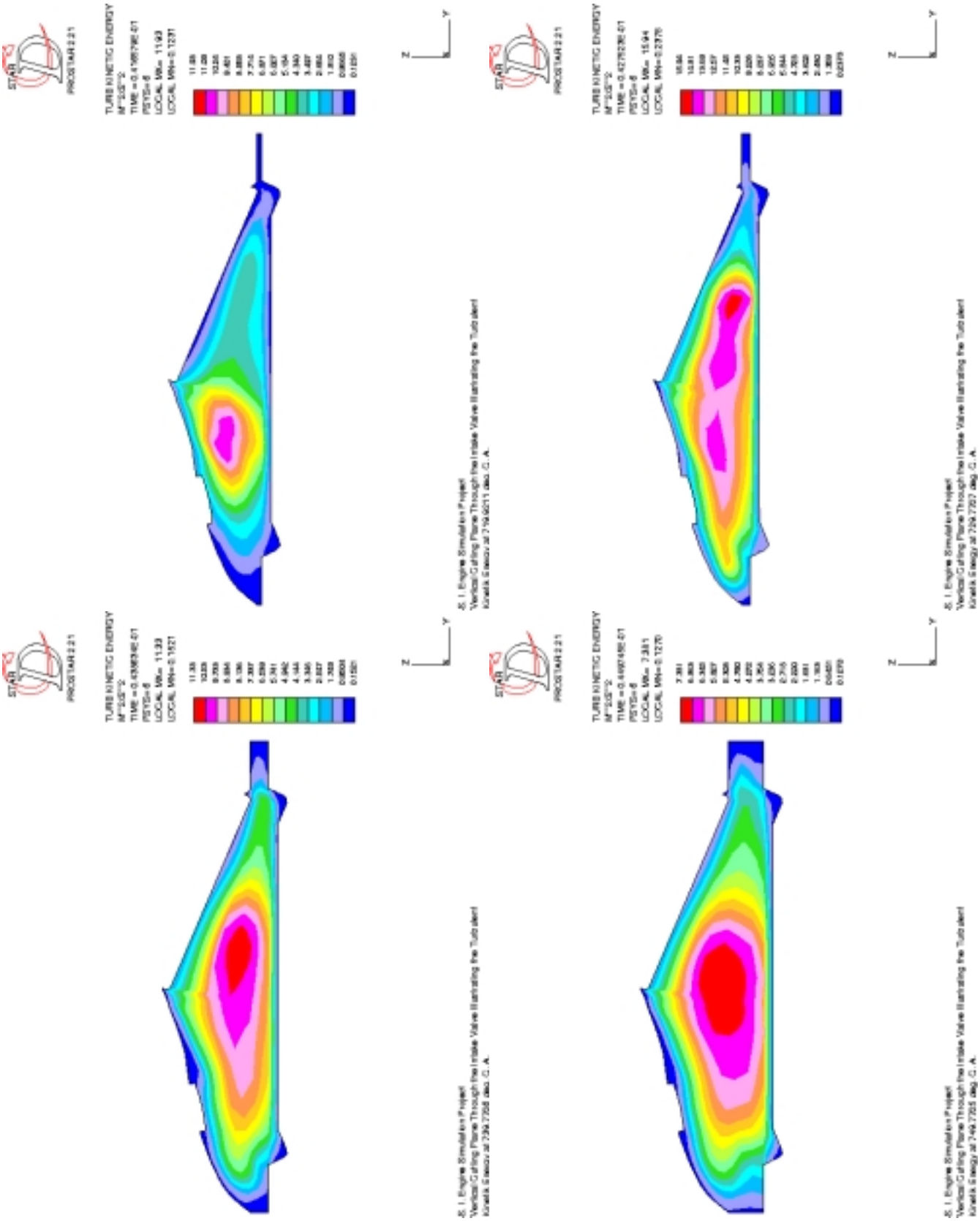

Abbildung 7.20: Turbulente kinetische Energie in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil bei 720 °, 730 °, 740 ° und 750 °KW.

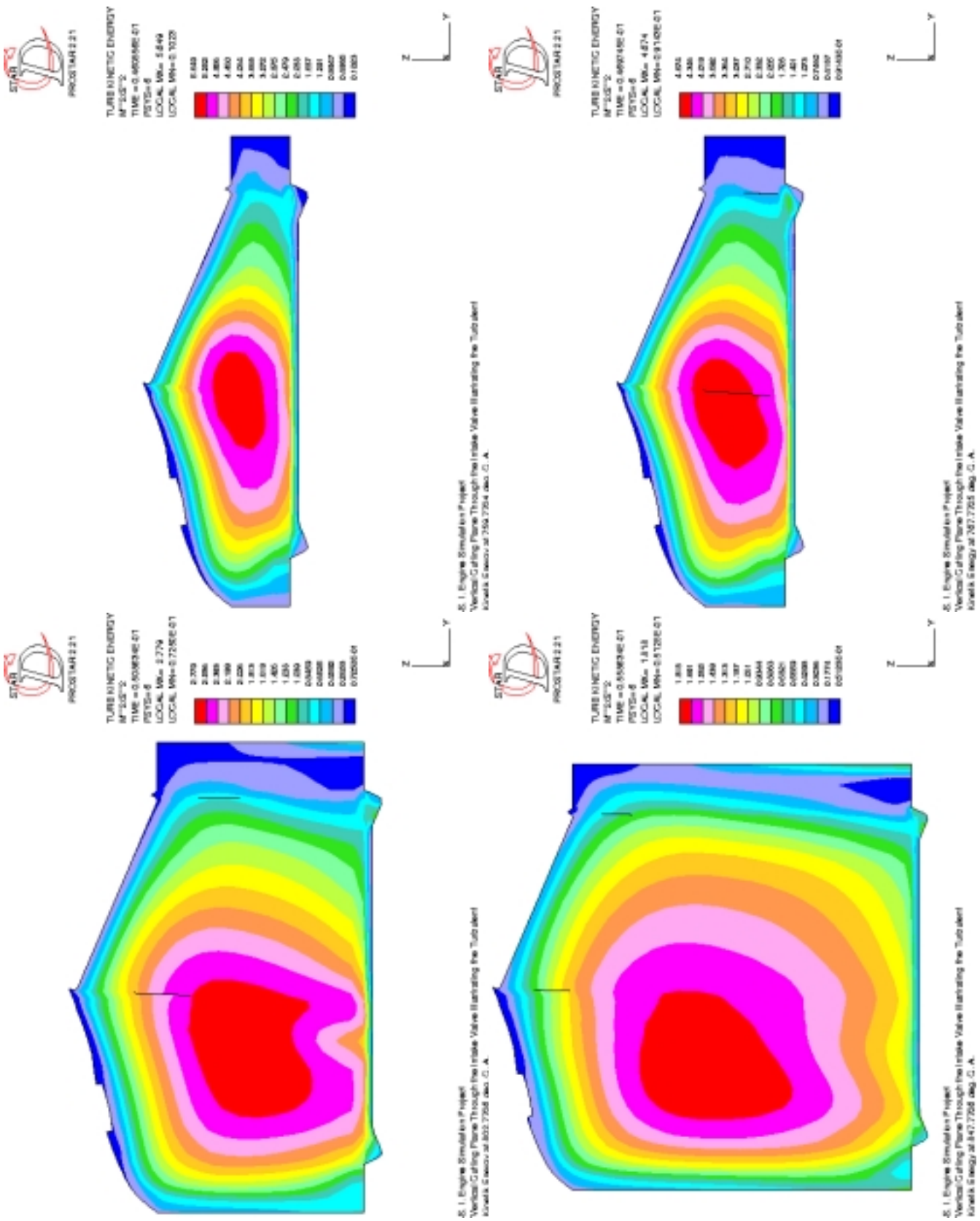

Abbildung 7.21: Turbulente kinetische Energie in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil bei 760 °, 768 °, 802 ° und 848 °KW.

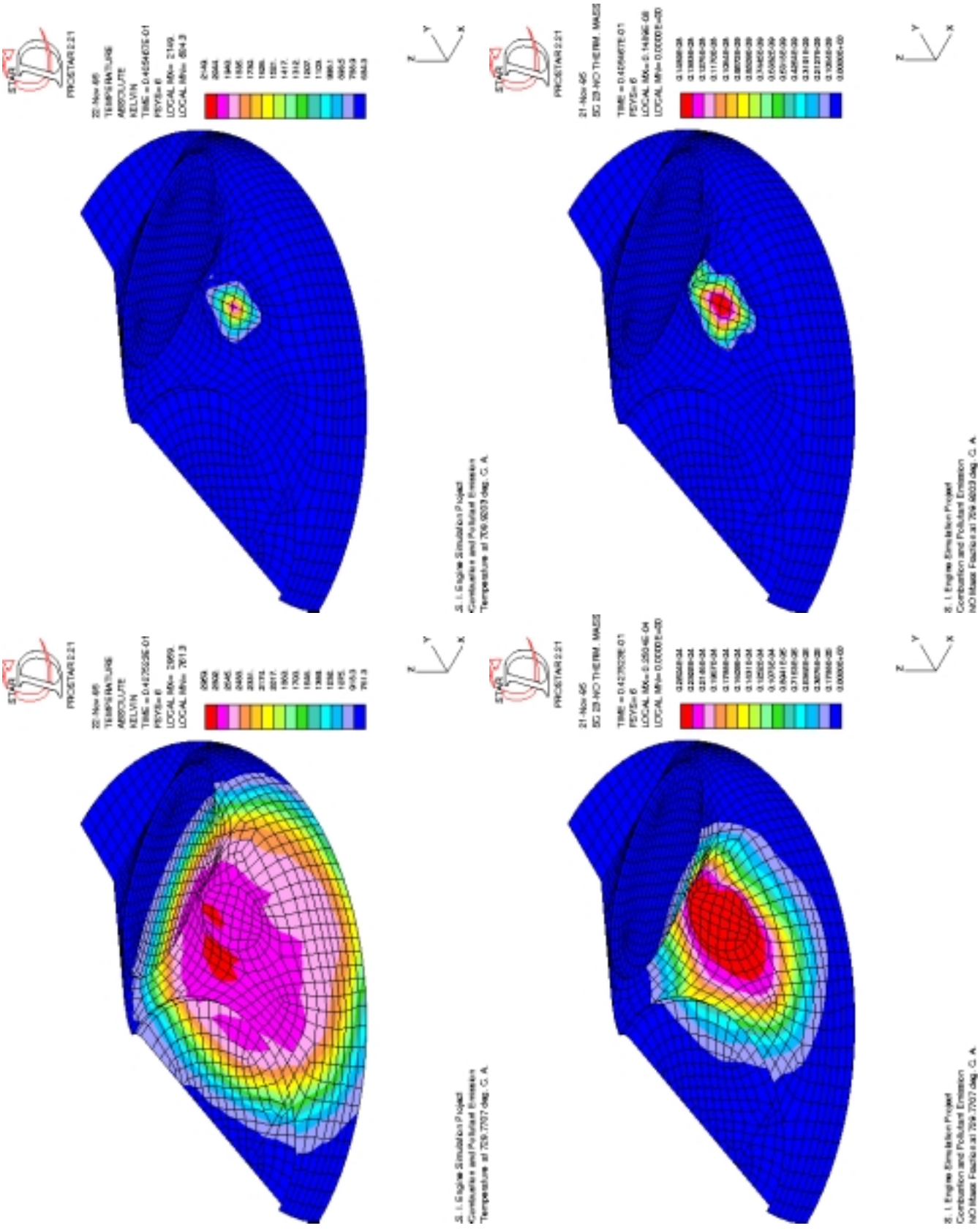

Abbildung 7.22: NO-Bildung im Brennraum des M112-3V-DZ (VHT): Temperatur und NO-Massenbruch jeweils bei 710 ° und 730 °KW (ZZP = 708 °KW).

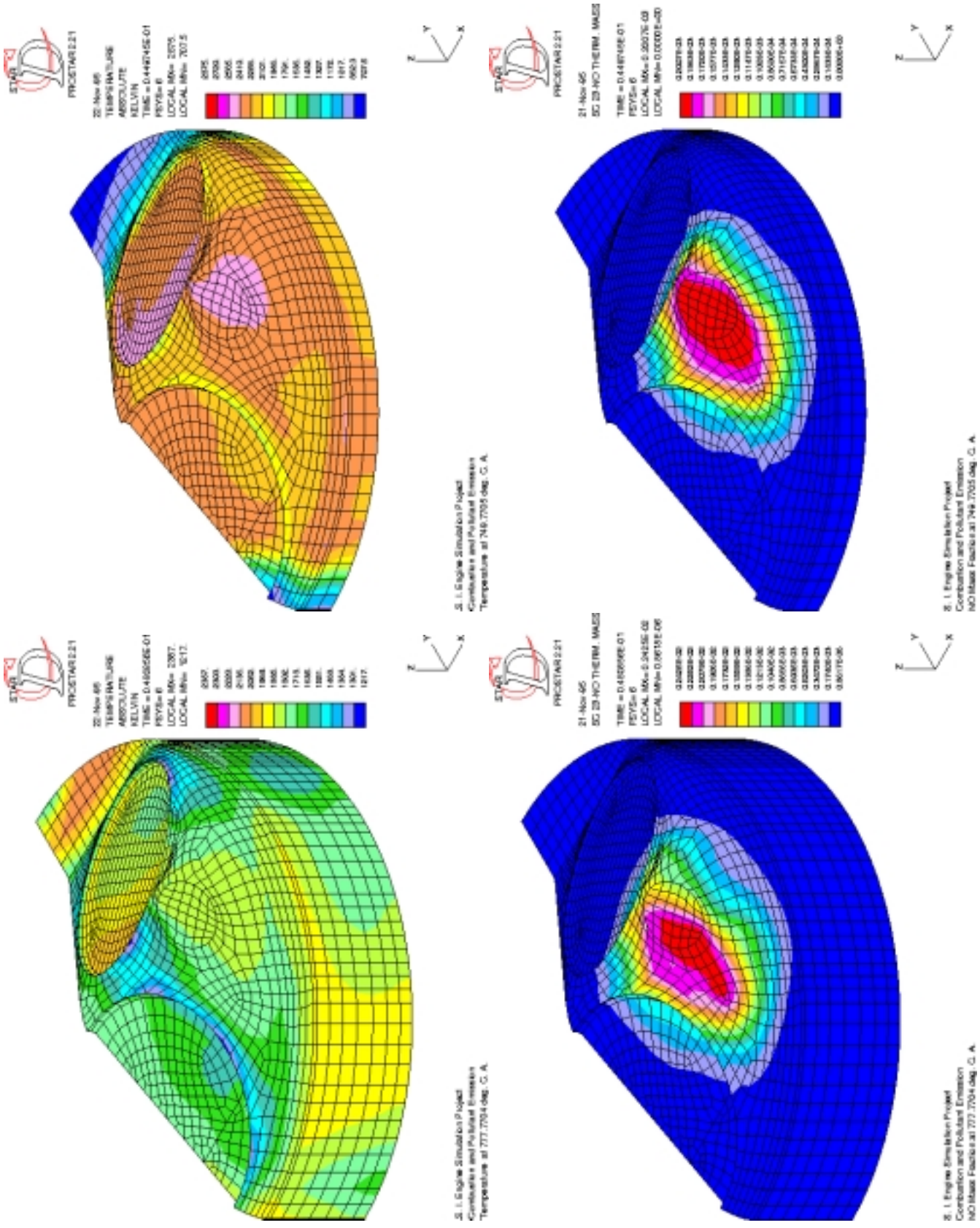

Abbildung 7.23: NO-Bildung im Brennraum des M112-3V-DZ (VHT): Temperatur und NO-Massenbruch jeweils bei 750 ° und 778 °KW (ZZP = 708 °KW).

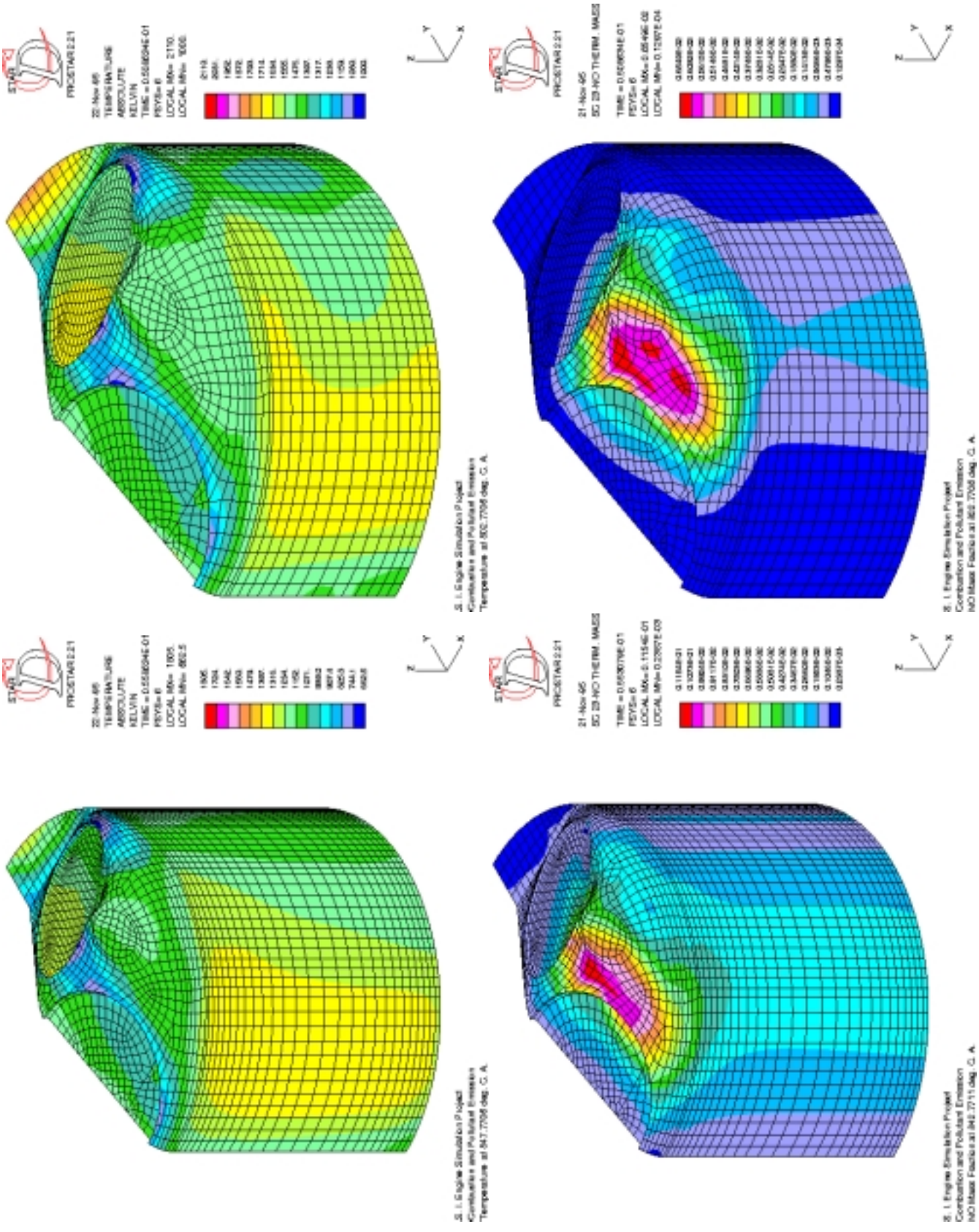

Abbildung 7.24: NO-Bildung im Brennraum des M112-3V-DZ (VHT): Temperatur und NO-Massenbruch jeweils bei 803 ° und 848 °KW (ZZP = 708 °KW).

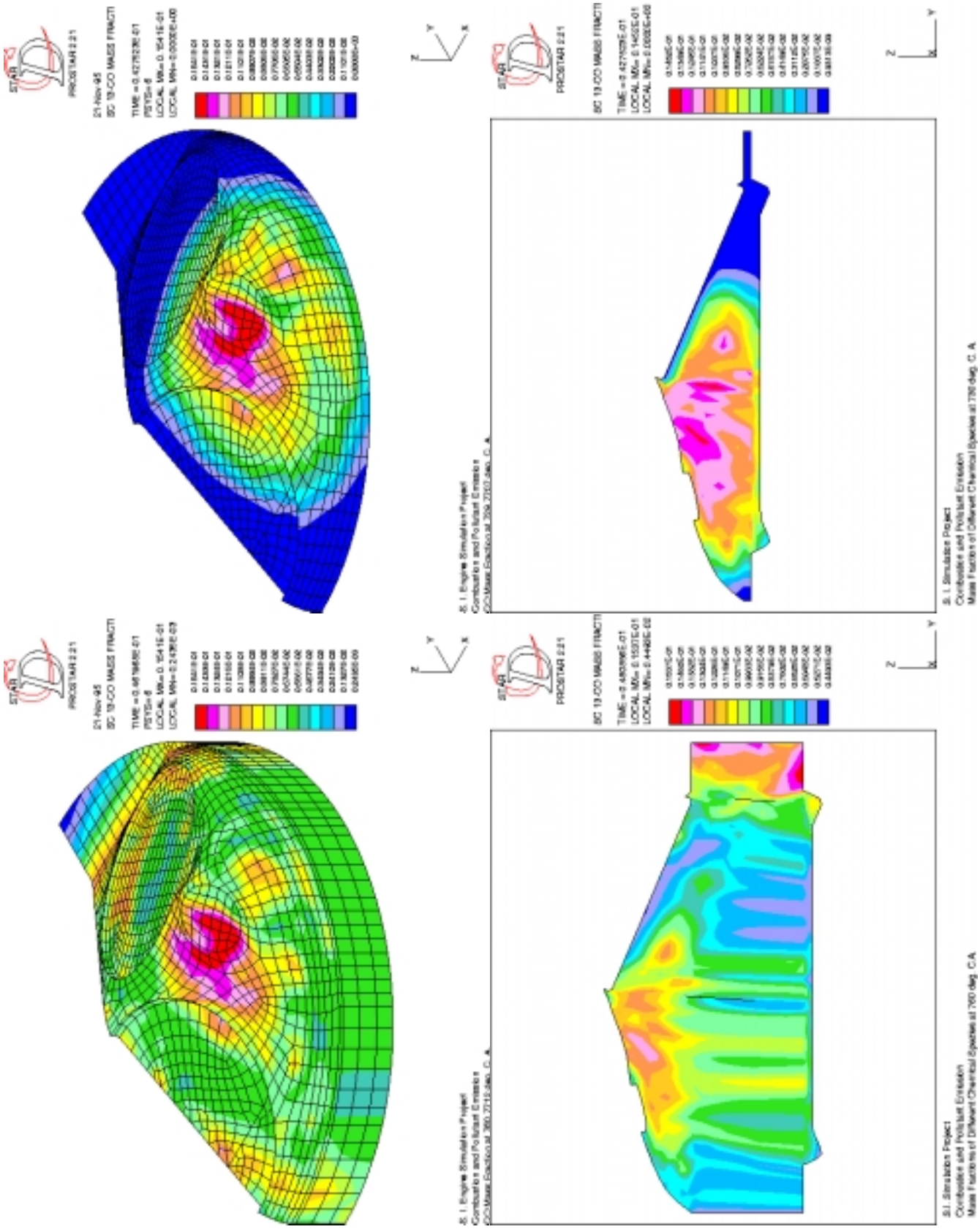

Abbildung 7.25: CO-Bildung im Brennraum: Draufsicht und senkrechter Schnitt durch das Einlaßventil jeweils bei 730 ° und 760 °KW.

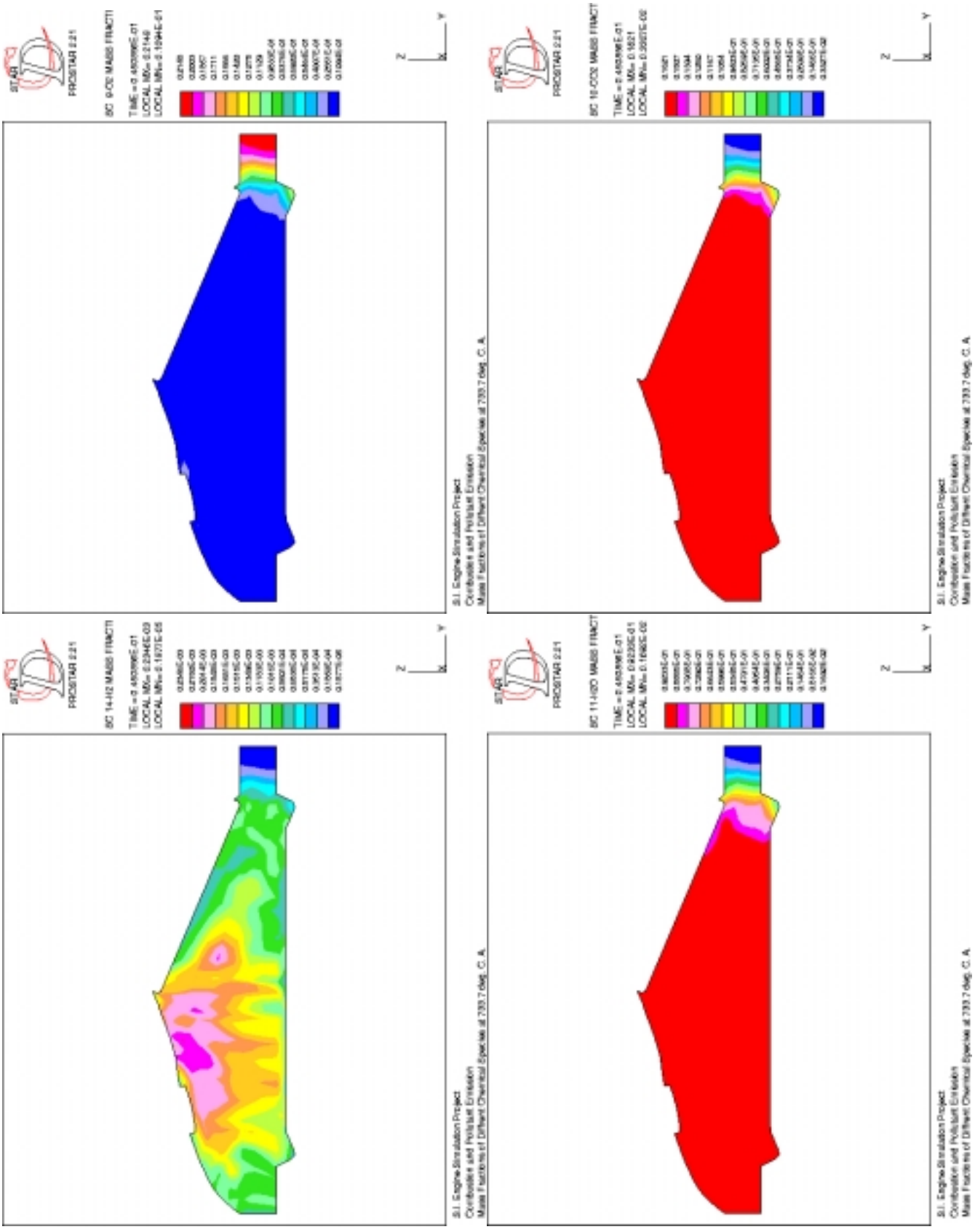

Abbildung 7.26: Massenbrüche der chemischen Spezies O_2, CO_2, H_2 und H_2O in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil bei 733 °KW.

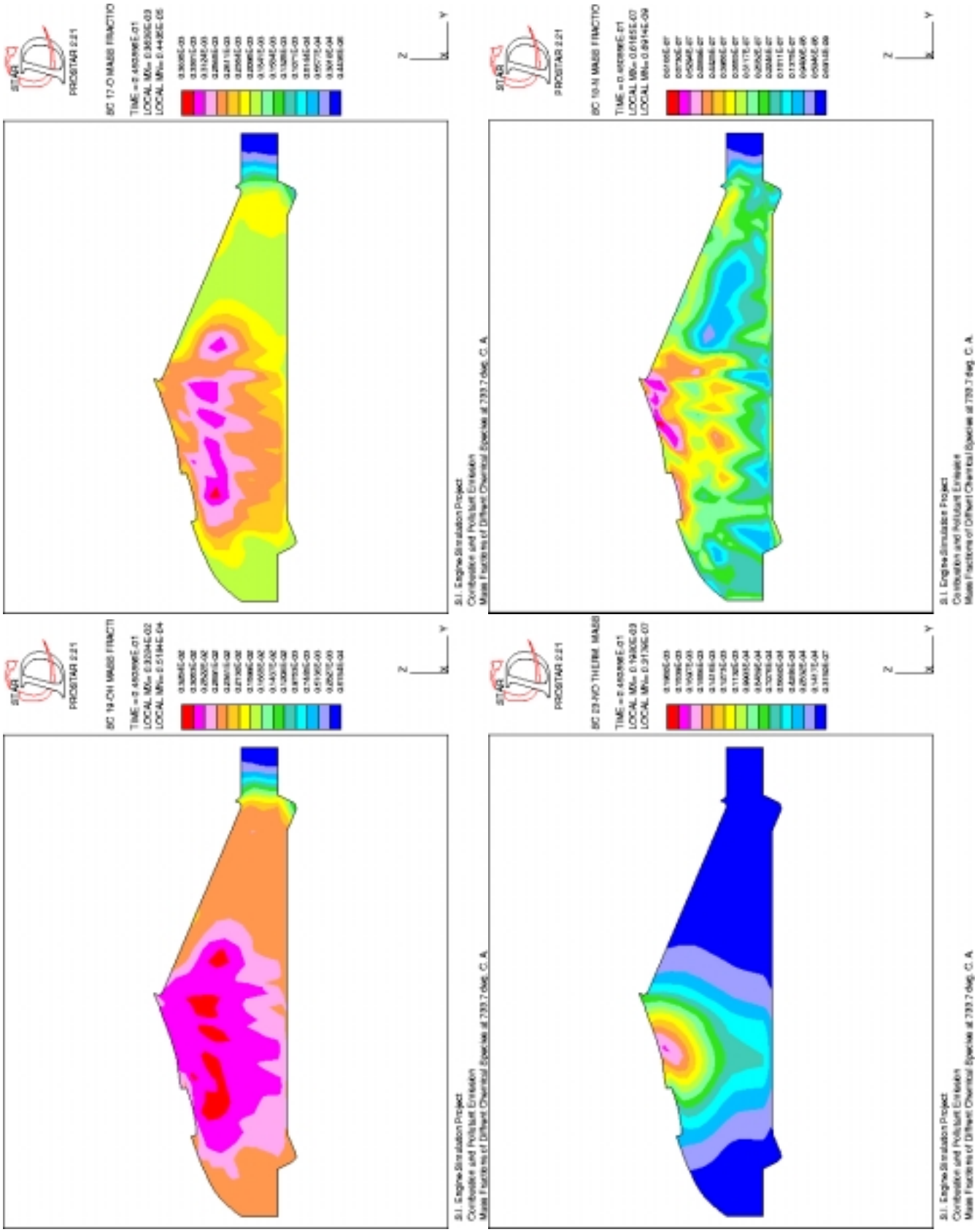

Abbildung 7.27: Massenbrüche der Radikale O, N und OH und des thermischen NO in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil bei 733 °KW.

Abbildung 7.28 zeigt den Summenbrennverlauf für die Berechnungen mit den Zündzeitpunkten $ZZP = 705$ und $708\,°\text{KW}$ sowie die Summenbrennverläufe, die mit der Ersatzbrennfunktion nach Vibe [55] anhand des berechneten Summenbrennverlaufs angenähert wurden:

$$w_\text{b} = 1 - \exp\left[-a_W \cdot \left(\frac{\theta - \theta_{Vb}}{\Delta\theta_{Vg}}\right)^{(m_W+1)}\right] \quad . \tag{7.1}$$

Die Werte der anzupassenden Parameter der Vibe-Funktion sind für den Fall $ZZP = 708\,°\text{KW}$ die folgenden: $a_W = 5,388$, der Formfaktor $m_W = 1,959$ und die Brenndauer $\Delta\theta_{Vg} = 56\,°\text{KW}$. Der Verbrennungsbeginn (i.e. die Kurbelwinkelstellung mit 1% Umsatz an Frischgasmasse) liegt in diesem Fall bei $\theta_{Vb} = 715\,°\text{KW}$, die Schwerpunktlage der Verbrennung (i.e. die Kurbelwinkelstellung mit 50% des Umsatzes an Frischgasmasse) bei $\theta_{Vs} = 16\,°\text{KW}$ n. OT, die Umsetzrate (i.e. das Kurbelwinkelintervall zwischen 10% und 90% Umsatz) beträgt $\Delta\theta_{80\%} = 27\,°\text{KW}$. Diese Werte wurden für denselben Fall aus dem indizierten Druckverlauf bestimmt (Glemser, [65]). Dabei ist der Vibe-Parameter $a_W = 6,908$ von Glemser als fix betrachtet worden und davon ausgehend der Parameter $m_W = 2,846$ berechnet. Die von Glemser angegebenen Ergebnisse stimmen zum Teil sehr gut mit den berechneten Werten überein ($\Delta\theta_{Vg,exp} = \Delta\theta_{Vg,rech} = 56\,°\text{KW}$, $\Delta\theta_{80\%,exp} = \Delta\theta_{80\%,rech} = 27\,°\text{KW}$) und zum Teil nicht ($\theta_{Vb} = 711,2\,°\text{KW}$, $\theta_{Vb,rech} = 715\,°\text{KW}$, $\theta_{Vs,exp} = 22\,°\text{KW}$ n. OT, $\theta_{Vs,rech} = 16\,°\text{KW}$ n. OT). Anhand der Ergebnisse von Glemser ergeben sich eine ganze Reihe von Fragen zu möglichen Ungereimtheiten. Einerseits ist bei Glemser der Verbrennungsbeginn relativ früh und andererseits wird die Schwerpunktlage (bei gleicher Umsetzrate und Brenndauer bei Messung und Star-CD-Rechnung) extrem spät erreicht. Dies bedeutet, die Richtigkeit der Messung vorausgesetzt, eine drastische Erhöhung der mittleren Reaktionsgeschwindigkeit in der späten Phase der Verbrennung, die die Berechnung nicht wiedergibt.

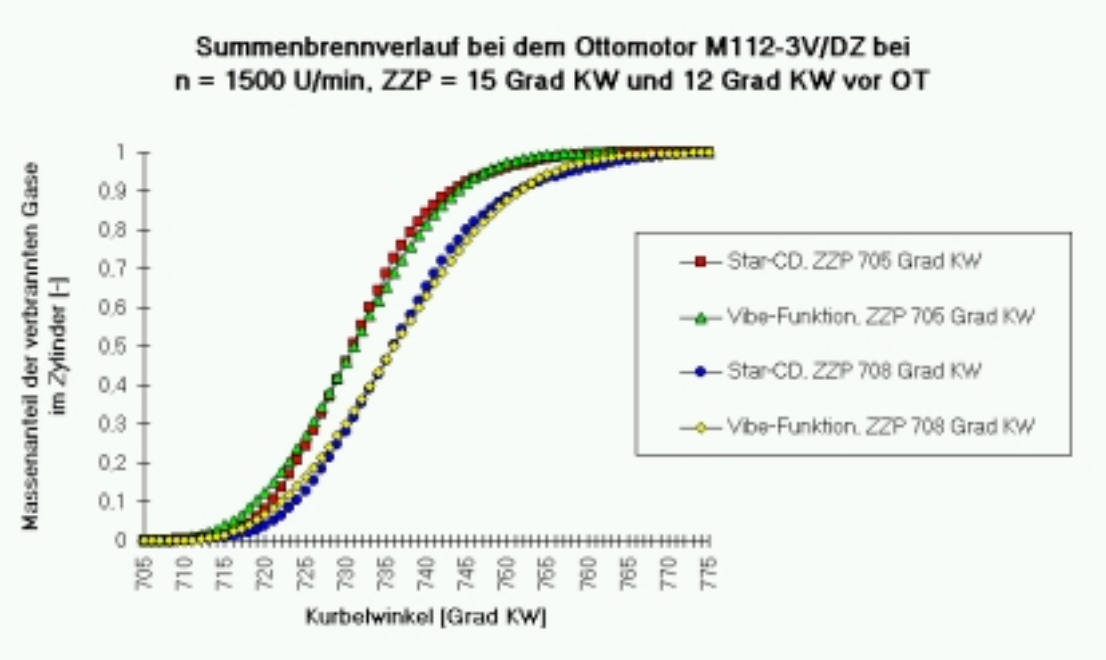

Abbildung 7.28: Berechneter Summenbrennverlauf (Star-CD) und Summenbrennverlauf nach Vibe-Funktion für $ZZP = 705\,°$ und $708\,°\text{KW}$.

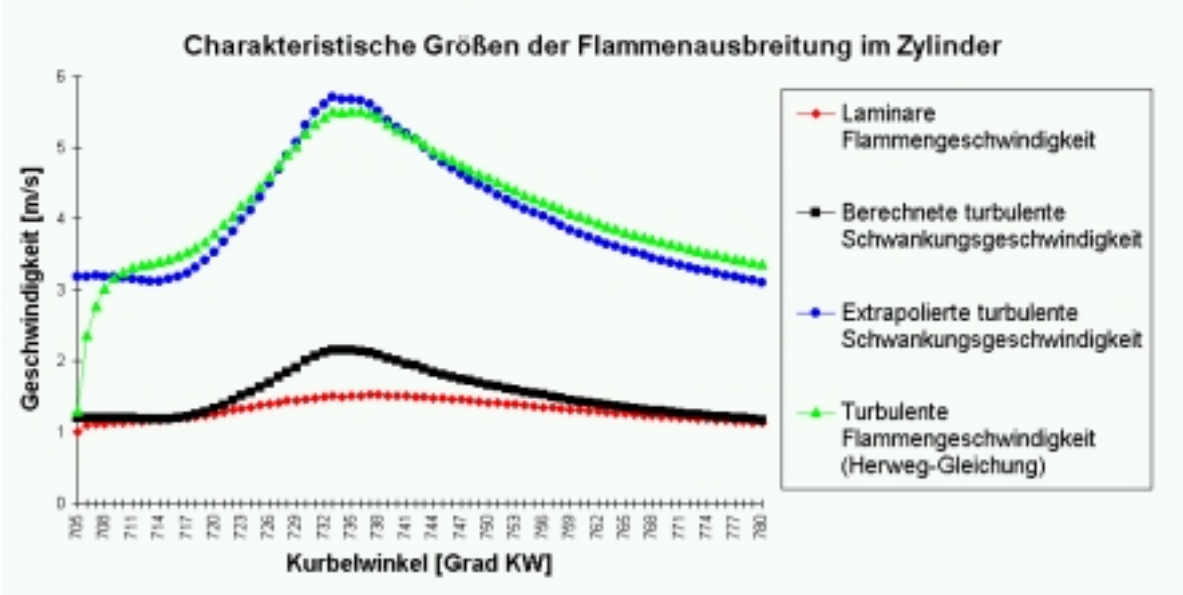

Abbildung 7.29: Laminare und Turbulente Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (Mittelwerte über der turbulenten Flammenfront, i.e. der Bereich $0.01 \leq \tilde{c} \leq 0.99$).

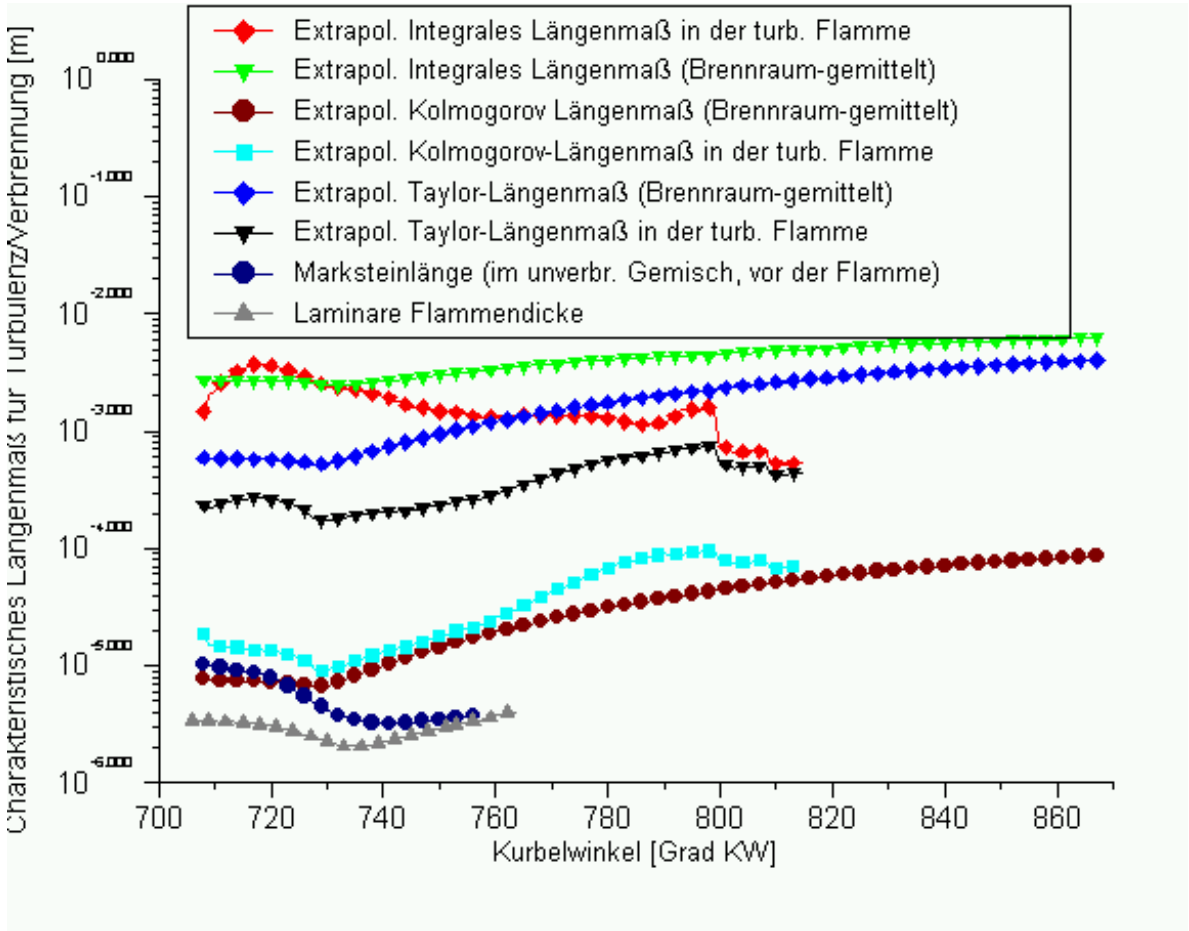

Abbildung 7.30: Mittelwerte einiger charakteristischer Längenmaße der Turbulenz und der Verbrennung.

Die Abbildungen 7.29 und 7.30 zeigen die charakteristischen Größen der Flammenausbreitung (Flammengeschwindigkeiten, bzw. Längenskalen). Darin ist zu erkennen, daß die laminare Flammendicke kleiner ist als das Kolmogorov-Längenmaß, d.h. das Klimov-Williams-Kriterium ist erfüllt. Die Verbrennung findet im Flamelet-Regime statt und die Voraussetzungen der Anwendung des Flamelet-Modells sind gegeben.

Zur Überprüfung der Aussagekraft des Verbrennungsmodells hinsichtlich der Flammenausbreitung im Brennraum wurden die berechneten Mittelwerte der Flammenankunftszeiten in sechs verschiedenen Punkten mit den Werten verglichen, die experimentell mit Hilfe von Ionenstromsonden ermittelt wurden. Die Lage der Ionenstromsonden ist in Abb. 7.31 zu sehen.

Die Abb. 7.16 und 7.17 zeigen die wesentlichen Aussagen der Berechnung der dreidimensionalen Flammenausbreitung im Zylinder:

- Eine relativ schwache Quetschspaltströmung bewirkt die Mitführung des Flammenkerns in den ersten 15 ° bis 20 °KW nach der Zündung in Richtung Auslaßventil (Geschwindigkeiten von ca. 5 m/s in der Nähe der Zündkerze, s. Abb. 7.7). Die Mitführung des Flammenkerns wird, wie erwartet, mit zunehmender Größe des Flammenkerndurchmessers unbedeutend.
- Die Flamme erreicht zuerst jenen Bereich des Brennraums, der dem Auslaßventil näher liegt und erst viel später den Quetschspalt auf der gegenüberliegenden Seite, in der Nähe des Einlaßventils.

Diese Aussagen werden durch die Ionenstromsondenmessungen qualitativ bestätigt (s. Abb. 7.31, rechts).

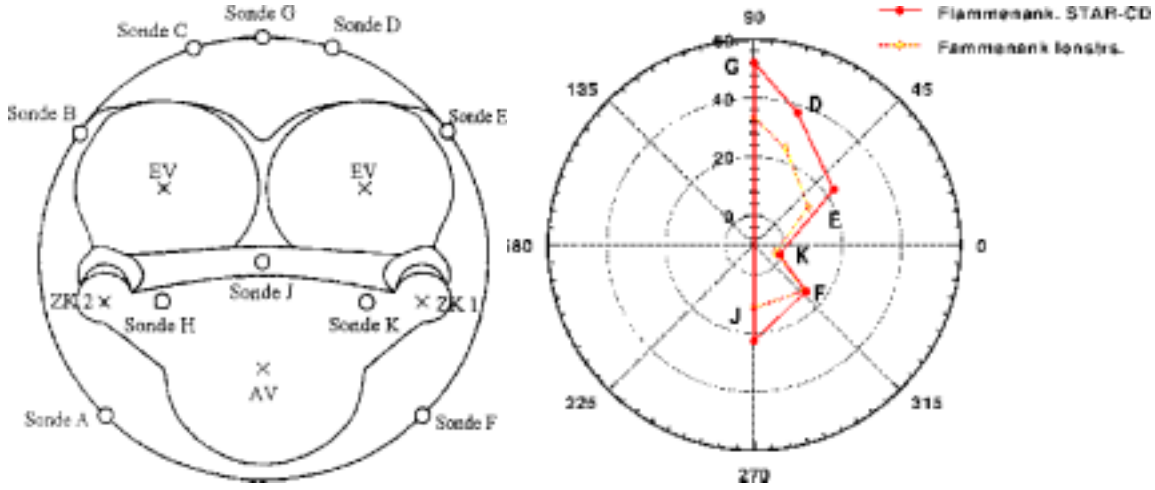

Abbildung 7.31: Bild links: Anordnung der Ionenstromsonden im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT). Bild rechts: Vergleich zwischen gemessenen und berechneten mittleren Flammenfrontankunftszeiten (Referenzrechnung: $n = 1500$ min^{-1}, Vollast, $\Phi = 1$, $ZZP = 708$ °KW, UPWIND-Ansatz, turbulenter Wärmeübergang nach (Gl. 3.65), turbulenter Austauschterm ($Sch_t = 0,9$), Wahl der Sonden-Zellen in der wandnächsten Zellschichte).

Man stellt jedoch eine systematische Abweichung der Rechenergebnisse von den Meßwerten fest, die mit zunehmender Entfernung der Ionenstromsonde von der Zündkerze wächst, und

zwar annähernd linear mit der gemessenen Flammenankunftszeit. Die mittlere Flammenankunftszeit zu der am nächsten liegenden Sonde (Sonde K) ist etwa gleich der gemessenen, bei der nächstfolgenden Sonde (Sonde F) ist der gemessene Wert des Zeitpunkts der Flammenankunft (umgerechnet in °KW) um 2 ° bis 3 °KW kleiner als der berechnete Wert, usw., so daß der berechnete Wert an der am weitesten entfernten Ionenstromsonde (Sonde G) um etwa 20 °KW von dem gemessenen Wert abweicht. Die berechnete turbulente Flammenausbreitung ist „zu langsam“, obwohl der Druckverlauf mit dem Experiment gut übereinstimmt. Die Ursachen dieses Verhaltens sind die folgenden:

1) Der Feuerstegspalt wurde bei der Modellierung des Brennraums nicht berücksichtigt. In diesen Spalt dringt ein nicht vernachlässigbarer Anteil des unverbrannten Gemisches ein, der von der Flamme nicht erreicht wird (Flammenverlöschung am Spalt) und der somit in den ersten 50 °KW nach Zündung für die Verbrennung nicht zur Verfügung steht. Erst mit der Abwärtsbewegung des Kolbens wird das Gasgemisch aus dem Feuerstegspalt austreten. Danach vermischt sich dieses brennbare Gemisch mit dem verbrannten Gasgemisch und wird zu einem bedeutenden Teil nachoxidiert. Das Volumen des Feuerstegspalts beträgt in der Regel 1% bis 2% des Kompressionsvolumens [55]. Für den M112-3V/DZ (VHT) wurde ein Spaltvolumen $V_{\mathrm{Sp}} = 0.93$ cm^3 angenommen. Der anhand dieses Wertes berechnete Massenanteil des unverbrannten Kraftstoffes in dem Spalt beträgt bei einer Zylinderwandtemperatur von 293 K je nach Brennraumdruck zwischen 6.5% und 9.1% der Gesamtmasse. Zum Zeitpunkt, zu dem im Experiment der gesamte Brennraum von der Flammenfront erfaßt wurde, befindet sich also etwa 7% der Gesamtmasse im Spalt, und die entsprechende Energie wird nicht freigesetzt. Somit wird verständlich, daß in den durchgeführten Star-CD-Rechnungen die Flammenausbreitung langsamer stattfinden muß, um einen korrekten Druckverlauf und Summenbrennverlauf zu erreichen, weil im Star-CD-Modell sich die ca. 6% bis 9% unverbranntes Gemisch im Brennraum und nicht im Feuerstegspalt befinden. Dies würde den annähernd linearen Verlauf der Abweichung zur gemessenen Flammenankunftszeit erklären, weil das Feuerstegspaltvolumen nur in dem Maße als Fehlerquelle für die 3D-Simulation auftritt, in welchem die Flamme den Spalt zwar erreicht hat, aber die Flamme im Experiment an der betreffenden Stelle verloschen ist und es nicht zur Freisetzung der chemischen Energie durch die Verbrennung kommt. Um eine Annäherung der Berechnung der Flammenausbreitung im Zylinder an die experimentellen Werte zu erreichen, muß der Feuerstegspalt als Teil des Rechengitters abgebildet werden. Dies wurde am „verfeinerten“ Rechennetz durchgeführt (s. § 6.4).

2) Die über die Zylinderwand abgegebene Wärmemenge, berechnet nach der Beziehung für den turbulenten Wärmeübergang (Gl. 3.65), ist zu niedrig. Der integrale Wert des Wärmestroms pro Zylinder berechnet nach (Gl. 3.65) ist im Vergleich zu dem Wärmestrom, der anhand von globalen Betrachtungen der Energiebilanz ermittelt wird, ca. um Faktor 5 zu niedrig. Die Berechnung der Wärmeverluste anhand der Beziehung von Woschni (Gl. 2.40) liefert einen relativ genauen Wert des integralen Wärmestroms, weil die Modellkonstanten in (Gl. 2.40) auf motorische Anwendungen abgestimmt sind. In Abb. 7.32 ist der über den gesamten Zylinder gemittelte Wärmestrom, berechnet mit den beiden Beziehungen (Gl. 3.65) bzw. (Gl. 2.40), dargestellt. Dazu, zum Vergleich, derselbe Wärmestrom berechnet anhand von (Gl. 2.40) mit dem quasi-dimensionalen Zwei-Zonen-Verbrennungsmodell ZOMOV (Rechnung von K. Ecke).

Eine größere nach außen abgegebene Wärmemenge bei gleichem Druckverlauf würde eine etwas schnellere Wärmefreisetzung erfordern, also einen höheren Wert des Parame-

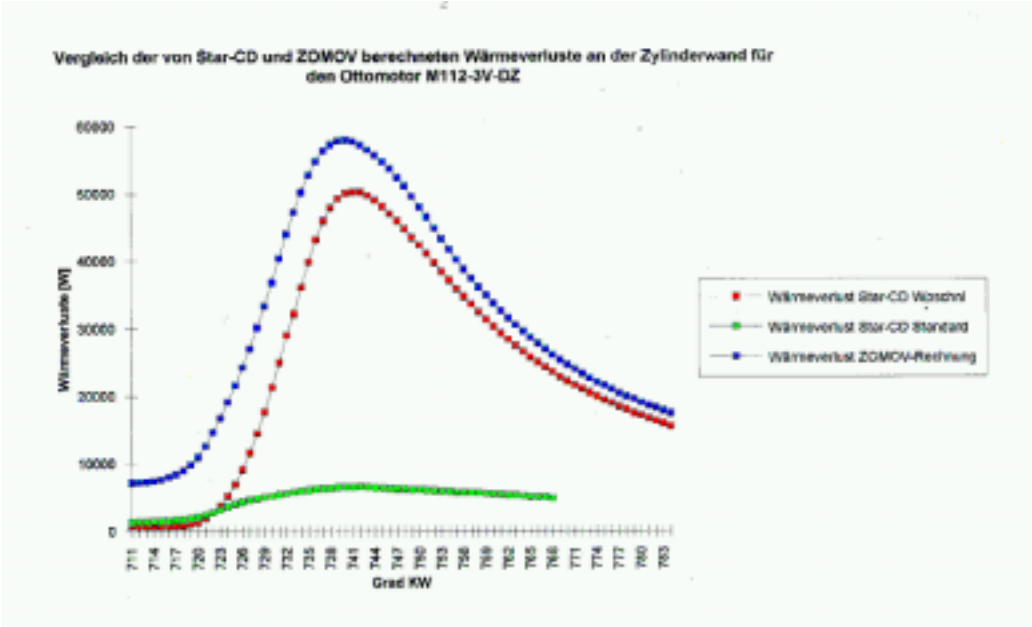

Abbildung 7.32: Wärmeverluste als Funktion des Kurbelwinkels.

ters A_{Netz} und damit explizit eine höhere turbulente Flammenausbreitungsgeschwindigkeit. Daher verspricht die Berechnung des Wärmeübergangs nach Woschni (Gl. 2.40) nicht nur eine deutliche Verbesserung der Genauigkeit der insgesamt vom Arbeitszylinder abgegebenen Wärmemenge, sondern auch einen Beitrag zur Verringerung der Unterschiede in den Flammenankunftszeiten und ein realistischeres Bild der Flammenausbreitung.

3) Das Eingleichungs-Verbrennungsmodell von Weller berücksichtigt nicht Effekte, die eine Reduzierung und Stabilisierung der turbulenten Flammendicke bewirken; als Folge davon nimmt die turbulente Flammendicke im Verlauf der Flammenausbreitung im Zylinderinneren permanent zu. Die turbulente Flammendicke ist in einer sehr guten Näherung gleich dem Kehrwert des Moduls des Gradienten der gemittelten Reaktionsfortschrittsvariablen $\tilde{c}$. Genau dieser Modul der gemittelten Reaktionsfortschrittsvariablen tritt in dem Quellterm der Transportgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable auf (Gl. 4.53). Eine zu dicke turbulente Flammenfront bedeutet einen zu geringen Modul des Gradienten von $\tilde{c}$ und damit eine zu kleine mittlere Reaktionsgeschwindigkeit, also eine zu langsame Flammenausbreitung.

Als Konsequenz wurden jene Maßnahmen untersucht, die zur Stabilisierung der turbulenten Flammendicke beitragen können, indem Einflüsse, die zur Verbreiterung der Flammenfront beitragen, ausgeschaltet oder gedämpft wurden. Das sind in erster Linie der turbulente Austauschterm in der Transportgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable (das dritte Glied auf der linken Seite in (Gl. 4.53)) und die numerische Diffusion, die durch den verwendeten Diskretisierungsansatz (UPWIND-Ansatz, kurz UD) maßgeblich bestimmt ist. Zwischen den beiden Einflußgrößen besteht der prinzipielle Unterschied, daß der turbulente Austauschterm ein physikalisches Phänomen modelliert, nämlich den Beitrag der Schwankungen des Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariablen beim Abbau der Gradienten der mittleren Reaktionsfortschrittsvariablen, während die numerische Diffusion ein rein numerisches Problem ist. In ihren Auswirkungen sind die beiden Einflußgrößen jedoch sehr ähnlich.

Der Beitrag des turbulenten Austauschterms kann ausgeschaltet werden, indem in der Transportgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable (Gl. 4.53) die turbulente Schmidt-Zahl Sch_t auf einen sehr großen Wert (praktisch ∞) gesetzt wird, während die numerische Diffusion durch Anwendung des Zentraldifferenzen-Ansatzes oder des SFCD-Ansatzes (s. § 5.1.2) deutlich reduziert wird.

Um die Bedeutung dieser Einflußfaktoren einzeln aufzuzeigen, wurden zum Vergleich verschiedene Rechenläufe mit und ohne turbulentem Austauschterm für drei der von Star-CD zur Auswahl gestellten Diskretisierungsansätze (UD, CD und SFCD) durchgeführt. Die Ergebnisse der Vergleichsrechnungen sind in Form von Polardiagrammen in Abb. 7.33 und 7.34 zu sehen.

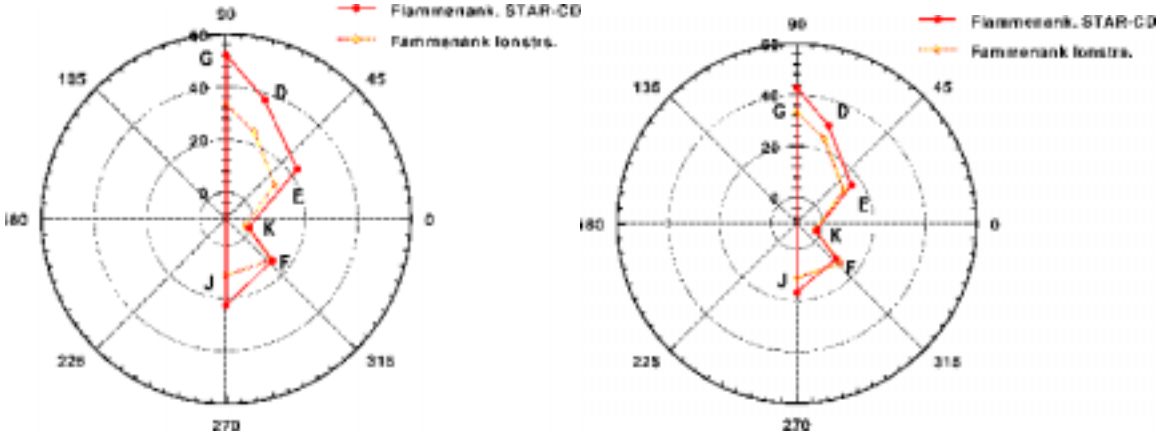

Abbildung 7.33: Einfluß des turbulenten Austauschterms auf die berechneten Flammenankunftszeiten bei dem Ottomotor M112-3V/DZ (UPWIND-Ansatz). Bild links: $Sch_t = 0,9$; Bild rechts: $Sch_t = 1,0 \cdot 10^{10}$. Der turbulente Austauschterm trägt zur Verbreiterung der turbulenten Flammenfront bei und bewirkt durch einen niedrigen Gradienten von $\tilde{c}$ eine langsamere Flammenausbreitung.

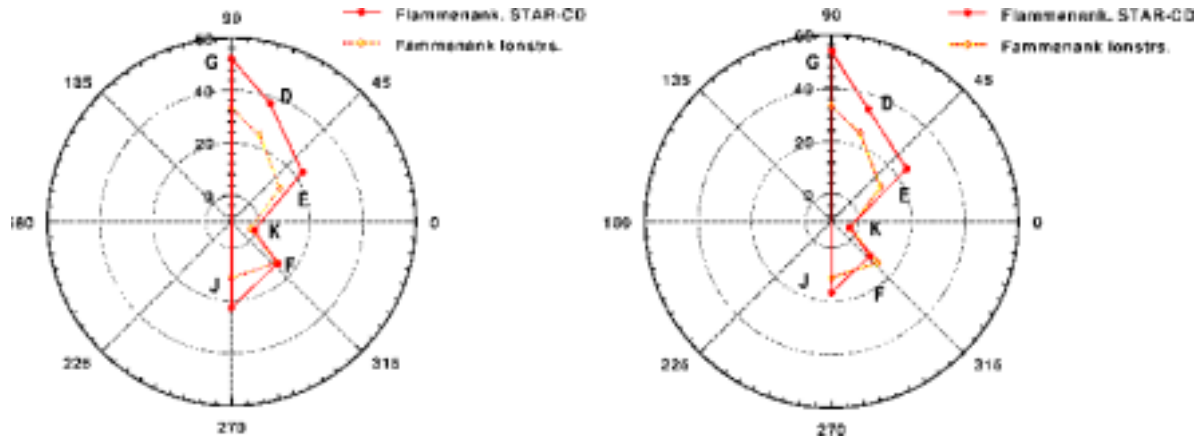

Abbildung 7.34: Einfluß des Diskretisierungsansatzes auf die Flammenfrontankunftszeiten: Links: UPWIND-Ansatz. Rechts: SFCD-Ansatz. Die numerische Diffusion trägt zur Verbreiterung der turbulenten Flammenfront bei. Der relativ steile Gradient von $\tilde{c}$ in dem SFCD-Ansatz bewirkt in den ersten 20 bis 30 °KW nach der Zündung eine deutlich schnellere Flammenausbreitung im Vergleich zum UPWIND-Ansatz.

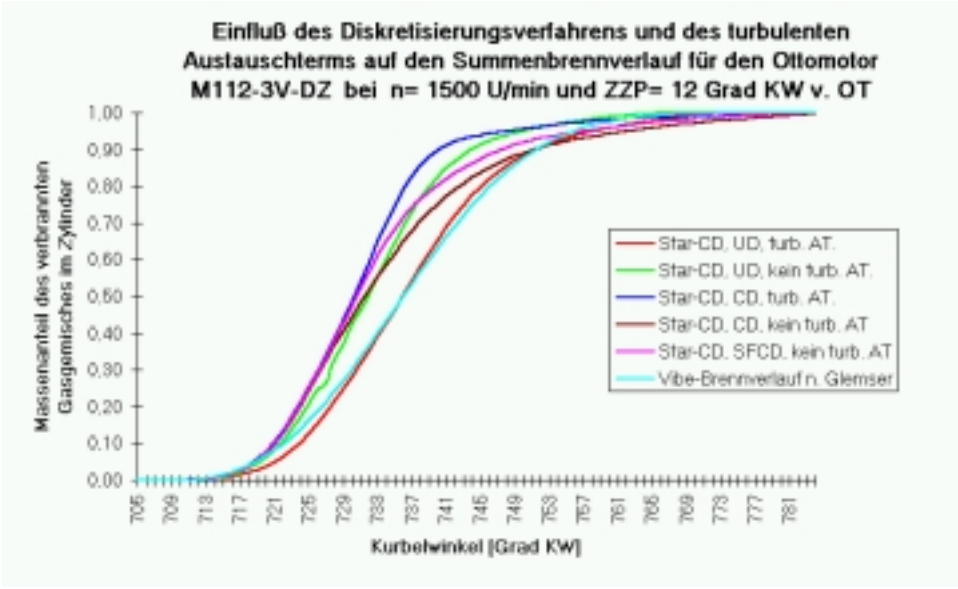

Abbildung 7.35: Einfluß des Diskretisierungsansatzes auf den Summenbrennverlauf.

Die Vergleichsrechnungen bestätigen die Aussage, daß der turbulente Austauschterm zur Verbreiterung der turbulenten Flammenfront beiträgt und durch einen niedrigeren Gradienten von $\tilde{c}$ eine viel langsamere Flammenausbreitung bewirkt.

Die numerische Diffusion trägt gleichfalls zur Verbreiterung der turbulenten Flammenfront bei. Der relativ steile Gradient von $\tilde{c}$ in dem SFCD-Ansatz bewirkt in den ersten 20 bis 30 Grad KW nach der Zündung eine deutlich schnellere Flammenausbreitung als beim UPWIND-Ansatz. Die mit dem SFCD-Ansatz berechneten Flammenfrontankunftszeit ist für die zündkerzennahe Ionenstromsonde F kleiner als die gemessene Flammenfrontankunftszeit.

Die globalen Veränderungen in der Flammenausbreitung sind in der Darstellung der Summenbrennverläufe (Abb. 7.35) zu sehen.

4) Effekte der Flammenausbreitung in der turbulenten Grenzschicht an der Brennraumwand spielen beim Vergleich der berechneten und gemessenen Werten der Flammenfrontankunftszeiten eine bedeutende Rolle. Zur Berechnung der Turbulenzgrößen in unmittelbarer Nähe einer festen Wand werden Wandgesetze angewendet, s. (Gl. 3.63) und (Gl. 3.64). Dringen die Spitzen der Ionenstromsonden durch diese dünne, turbulente Grenzschicht durch, welche zur Zeit von keinem motorischen Rechennetz aus Rechenzeitgründen aufgelöst werden kann, dann wird in der Umgebung der Sonden die turbulente kinetische Energie durch die Berechnung mit dem $\tilde{k}$-$\tilde{\epsilon}$-Modell mit Wandgesetz unterschätzt.

Dies bedeutet zumindest für die äußerste Zellschicht, in der sich natürlicherweise alle den Ionenstromsonden entsprechenden Zellen befinden, eine viel zu langsame, fast laminare Flammenausbreitung. Ein geeignetes Modell für die Wechselwirkung zwischen turbulenter Flamme und Wand ist nötig. Die Wahl der den Ionenstromsonden entsprechenden Zellen in der nächsten, (ca. 1 mm) weiter innen liegenden Zellschicht bedeutet für die Entfernung, über welche sich die turbulente Flamme in einem Brennraum mit Durchmesser $D = 95$ mm ausbreitet, einen relativ kleinen Fehler. Sie führt jedoch zu einer weiteren Annäherung der Rechenergebnisse an die Ergebnisse der Messung, vor allem bei den von der Zündkerze weiter entfernten Sonden (die Annäherung für die Sonde G beträgt 5 °KW, s. Abb. 7.36).

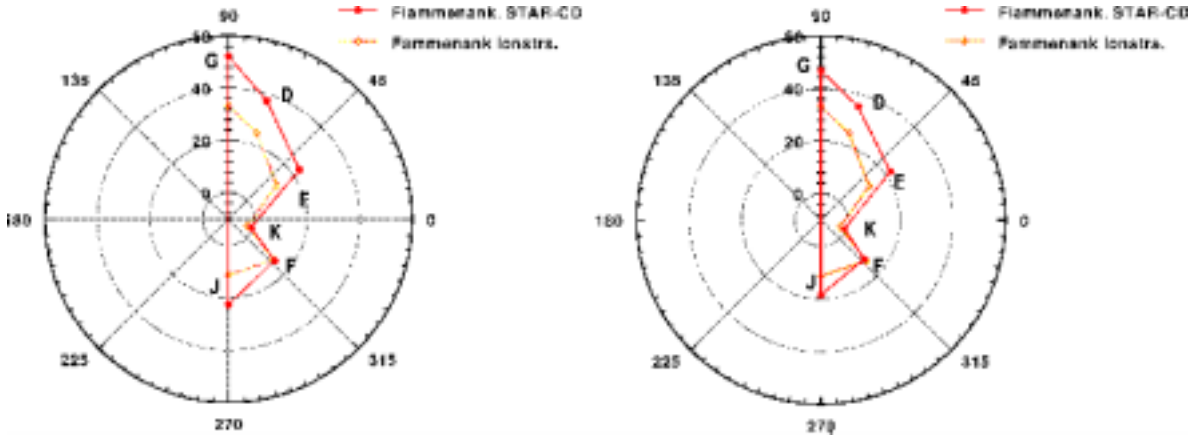

Abbildung 7.36: Einfluß der turbulenten Wandgrenzschicht auf die berechneten Flammenankunftszeiten bei dem M112-3V/DZ. Links: Die Zellen, die den Ionenstromsonden entsprechen, wurden in der äußersten Zellschicht gewählt. Rechts: Die Zellen wurden in der zweiten, ca. 1 mm weiter innen liegenden Zellschicht gewählt.

5) Numerische Fehler durch übermäßige Verzerrung von Zellen im Rechennetz können sich gravierend auf die Flammenausbreitung auswirken. Das hier betrachtete „grobe“ Netz weist an der Kante des Auslaßventils einige wenige stark verzerrte Zellen auf, die vom Hersteller bei der Anpassung des Netzes an die Geometrie des Brennraums nicht vermieden werden konnten. Diese verzerrten Zellen weisen bei Ankunft der Flammenfront unphysikalisch hohe Werte der TKE und der Dissipation der TKE auf. Die hohen Werte der TKE wirken sich einerseits auf den Quellterm der Transportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen (Gl. 4.53) beschleunigend aus, andererseits folgt aus den hohen Werten der Dissipation in diesen Zellen eine sehr hohe Flammenstreckung und damit Flammenverlöschung.

Es zeigt sich jedoch, daß die Auswirkung dieser numerischen Fehler stark von dem Diskretisierungsansatz abhängt. Der UPWIND-Ansatz zeigt sich relativ unempfindlich gegenüber den hohen Werten der Turbulenzgrößen in den verzerrten Zellen, weil diese sich glücklicherweise in unmittelbarer Nähe der Wand befinden und so die Ausbreitung des numerischen Fehlers im restlichen Strömungsgebiet vermieden wird. Dagegen zeigt sich der Zentraldifferenzenansatz als besonders empfindlich. Bei diesen Ansatz werden die hohen Werte der Turbulenzgrößen in den verzerrten Zellen aufgrund der linearen Interpolation an alle Nachbarzellen weitergegeben. Die numerischen Fehler können sich so im Strömungsgebiet ausbreiten (s. Abb. 7.37).

Nachdem festgestellt wurde, daß die Ursache der Flammenverlöschung rein numerischer Natur ist, wurde deren Effekt beseitigt, indem der kritische Wert der Flammenstreckung (bei welchem erstmals Verlöschung eintritt) auf einen sehr hohen Wert gesetzt wurde. Anhand der vorliegenden Daten wird offensichtlich, daß bei Netzen mit stark verzerrten Zellen, wie den benutzten, das UD-Verfahren den beiden anderen Diskretisierungsansätzen vorzuziehen ist.

Anhand der durchgeführten Vergleichsrechnungen ist bewiesen, daß aufgrund jedes einzelnen dieser Einflußfaktoren eine Verkürzung der Brenndauer und eine spürbare Annäherung der Flammenankunftszeiten an die Messergebnisse erzielt wird. Es kann nun eine Rechnung durchgeführt werden, in welcher gleichzeitig alle angeführten Einflußfaktoren (außer dem Feuerstegspalt) in der jeweils bestmöglichen Variante gewählt werden.

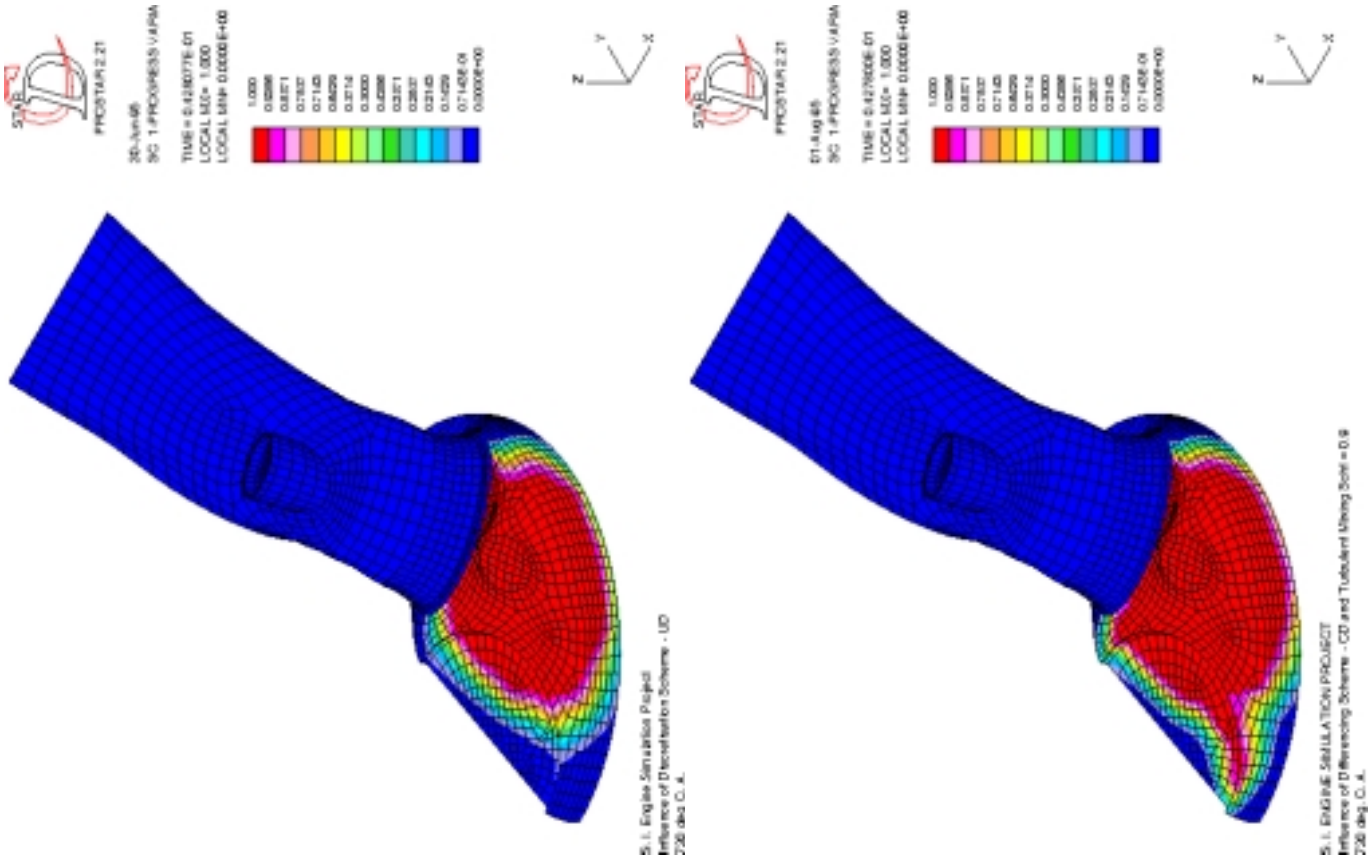

Abbildung 7.37: Einfluß der numerischen Fehler durch einige, wenige, stark verzerrte Zellen an der Kante des Auslaßventils auf die Flammenausbreitung bei unterschiedlichen Diskretisierungsansätzen. Links: UPWIND-Ansatz, Rechts: Zentraldifferenzen-Ansatz.

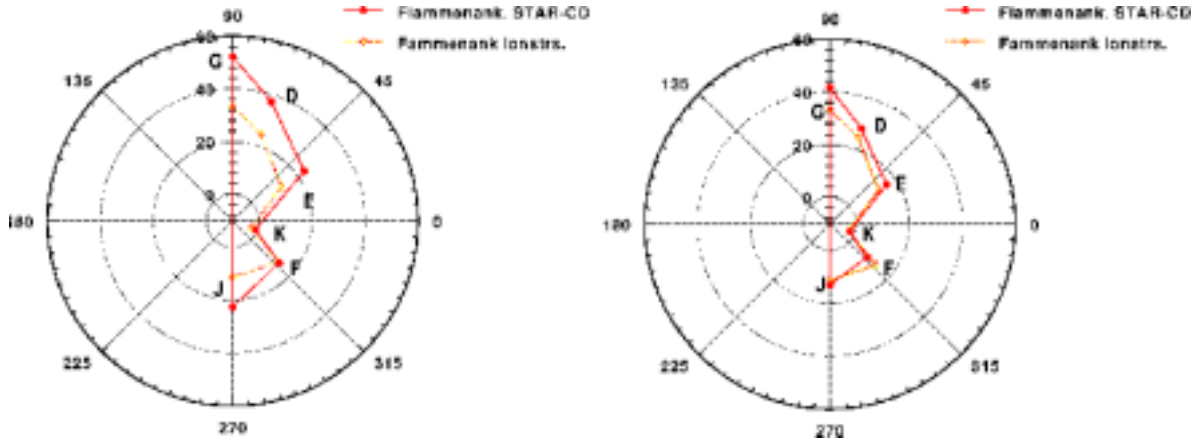

Abbildung 7.38: Vergleich der gemessenen und berechneten Flammenankunftszeiten bei dem Ottomotor M112-3V/DZ (VHT). Links: Referenzrechnung; Rechts: Berücksichtigung der Einflußfaktoren 2 bis 5.

Der Massenanteil der Schadstoffkomponenten CO und NO wurde nach der in Kap. 4 beschriebenen Vorgehensweise berechnet. Darin sind folgende restriktiven Annahmen enthalten: ausschließlich thermisches Stickoxid (NO) nach (Gl. 5.4) bis (Gl. 5.6) und Kohlenmonoxoid CO ausschließlich in den ersten 100 °KW nach der Zündung (Hochtemperaturphase der Verbrennung mit ausreichend schneller Reaktionskinetik, in welcher die Annahme eines vollständigen chemischen Gleichgewichts bezüglich CO gerechtfertigt ist). Die Bildung dieser beiden Schadstoffkomponenten ist in den Abb. 7.39 und 7.40 dargestellt.

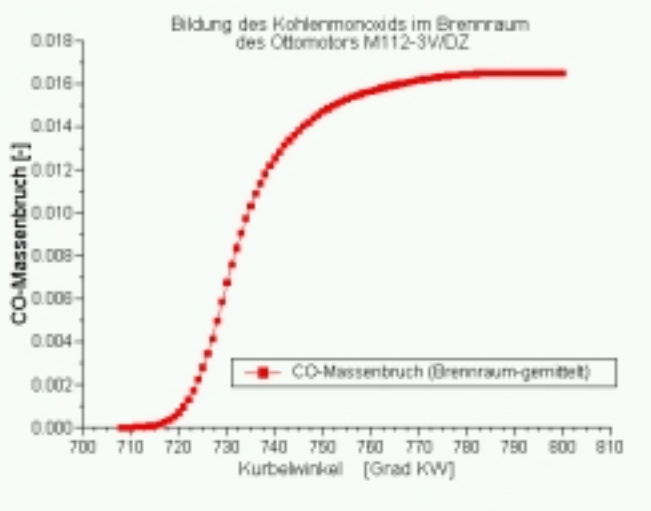

Abbildung 7.39: Bildung des Kohlenmonoxids im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT) in den ersten 100 °KW nach der Zündung.

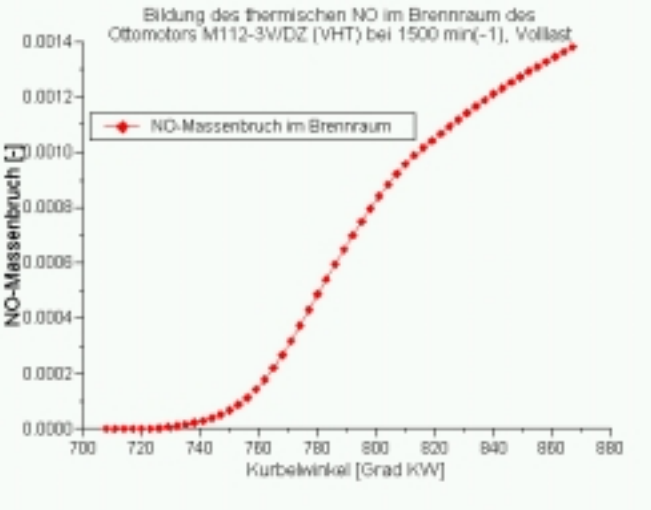

Abbildung 7.40: Bildung des thermischen Stickoxids im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT).

Der gemessene Wert des NO-Massenbruchs liegt nach Kenntnisstand des Verfassers nur für den Serienmotor vor und beträgt in diesem Fall $w_{\mathrm{NO}} \approx 3000$ ppm. Dieser Wert bezieht sich auf die Verbrennung von bleifreiem Superbenzin, das in Form von Spray eingespritzt wird. Deshalb ist der Vergleich mit der Propanverbrennung in der VHT-Variante nur bedingt möglich. Es ist aber anzunehmen, daß die NO-Konzentration, welche extrem empfindlich auf die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der lokalen Brennraumtemperatur reagiert, für den M112-3V/DZ (VHT) im Propanbetrieb mit dem vorliegenden Modell qualitativ richtig bzgl. des Orts der Bildung und Verteilungsdichte im Brennraum berechnet wird, quantitativ jedoch nur mit einem relativen Fehler von ca. 100% berechnet werden kann.

Für den Wert des CO-Massenbruchs liegt nur der im Abgastrakt gemessene Wert vor, der mit dem CO-Massenbruch im Brennraum in der Hochtemperaturphase nicht vergleichbar ist (s. Kap. 4). Dieser beträgt nach Angaben der Prüfstandsleitung $w_{\mathrm{CO}} \approx 2600$ ppm.

7.1.5 Berechnung der Strömung mit dem „feinen“ Netz

Die Berechnung derselben Motorgeometrie mit einem viel feineren Netz soll die Aussagen zur Netzabhängigkeit und zum asymptotischen Verhalten der Strömungsvariablen, die durch Netzabhängigkeitsstudien an einfachen Geometrien von Modellbrennräumen gewonnen wurden (s. Kap. 5), an einer seriennahen Motorgeometrie überprüfen und das Maß an höherer Genauigkeit der Berechnung abschätzen, welches durch die Netzverfeinerung erreicht wird. Das „feine“ Netz besteht aus 338000 Zellen insgesamt, davon ca. 80000 Fluid-Zellen für den Brennraum in OT, und erlaubt die Auflösung kleinerer Wirbelstrukturen als dies mit dem groben Netz möglich ist. Die groben Wirbelstrukturen der Strömung sind annähernd dieselben, die auch mit dem groben Netz berechnet wurden. Es ergeben sich erwartungsgemäß mehrere zusätzliche Wirbel, hauptsächlich in den Randgebieten der Strömung, die in der Berechnung mit dem groben Netz nicht zu erkennen waren (s. Abb. 7.41 bis 7.44).

In Abb. 7.45 ist die turbulente kinetische Energie dargestellt, in demselben senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil wie in Abb. 6.8 und 6.9 beim groben Netz. Darin ist der wichtige Unterschied zur Simulation mit dem groben Netz zu sehen. Ähnlich wie in den Netzabhängigkeitsuntersuchungen von Gildein (s. Kap. 5) erreicht die mit dem $\tilde{k}$-$\tilde{\epsilon}$-Modell berechnete TKE bei der Berechnung mit dem feinen Netz einen etwa 50% höher liegenden Wert als der entsprechende Wert beim groben Netz. Die räumliche Form der Verteilung der TKE im Brennraum zeigt bis gegen Ende des Kompressionstaktes eine gewisse Ähnlichkeit auf. Ab ca. 660 °KW sind jedoch auch bezüglich der räumlichen Verteilung deutliche Unterschiede zu sehen, welche sich in der geometrischen Form der turbulenten Flammenfront bemerkbar machen.

Aus dem Vergleich der Abbildungen 7.45, 6.8 und 6.9 kann man schlußfolgern, daß die Anwendung eines Extrapolationsverfahrens zur Berechnung der asymptotischen Werte der beiden Turbulenzgrößen $\tilde{k}$ und $\tilde{\epsilon}$ sich prinzipiell als der richtige Weg zur Lösung der Netzabhängigkeitsprobleme erweist, aber auch, daß ein durch Extrapolation berechnetes Turbulenzfeld nur eine relativ grobe Annäherung an die Wirklichkeit sein kann. In Abb. 7.48 bis 7.51 sind die zeitlichen Verläufe der Mittelwerte mehrerer charakteristischer Größen der Turbulenz über dem Brennraum zu sehen, die mit dem feinen Netz berechnet wurden. Der abschließende Vergleich folgt in § 6.1.6.

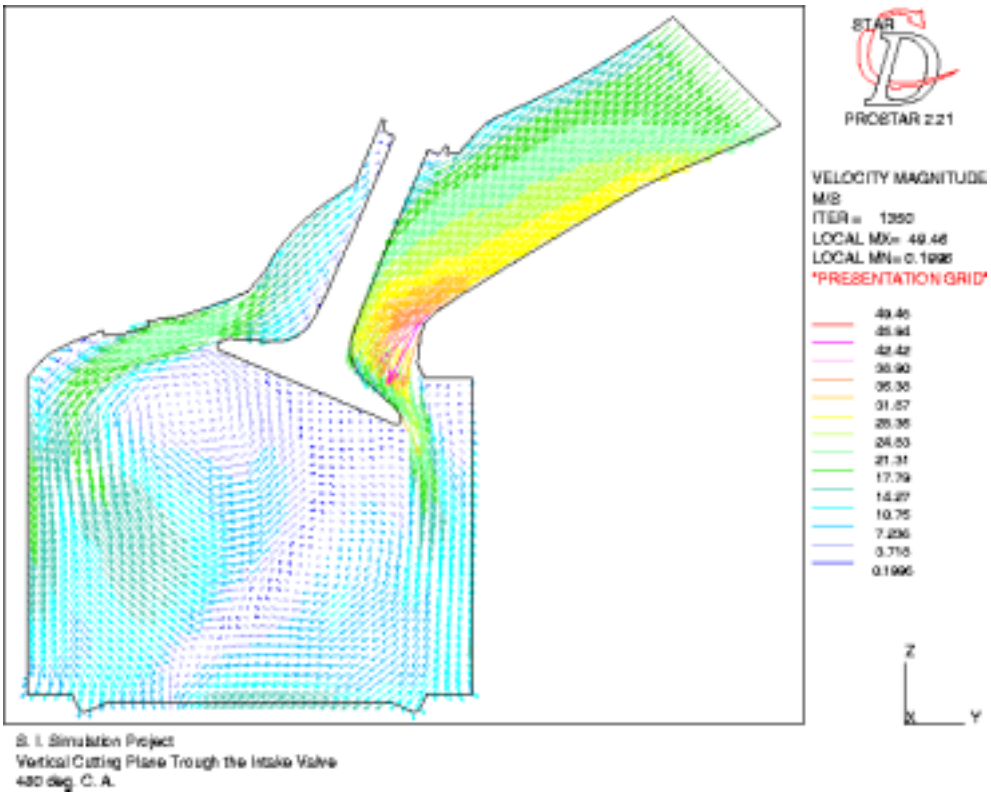

Abbildung 7.41: M112-3V/DZ (VHT), feines Netz: Geschwindigkeitsfeld bei 480 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

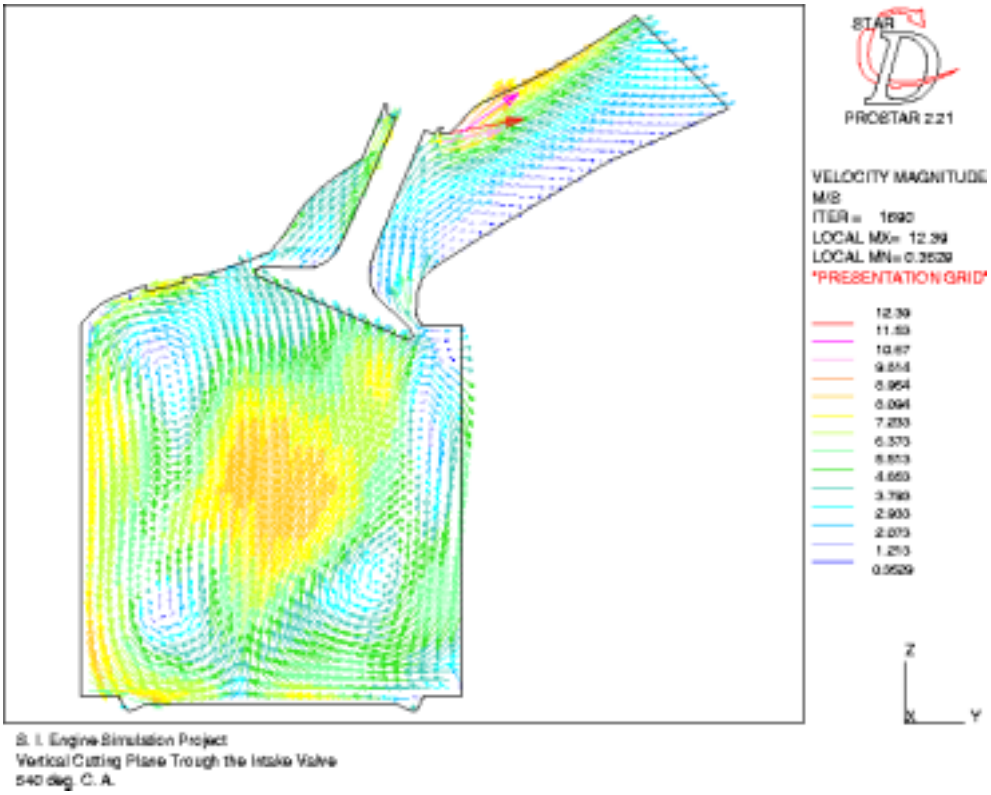

Abbildung 7.42: Geschwindigkeitsfeld bei 540 °KW (Gaswechsel-UT) in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

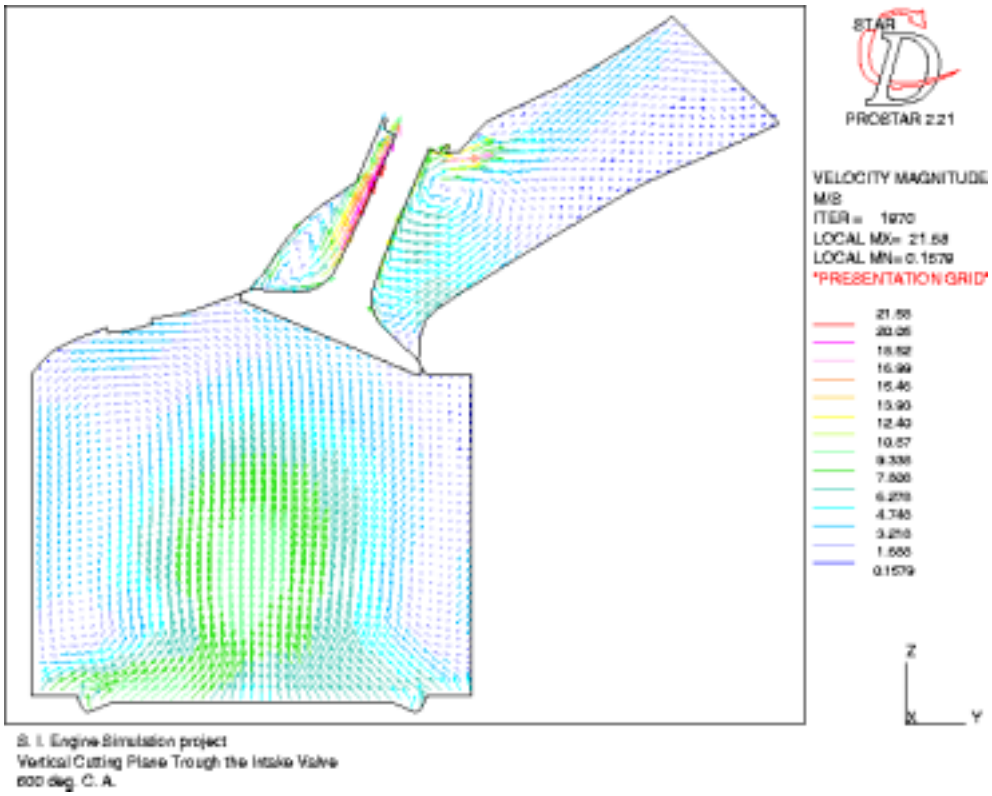

Abbildung 7.43: Geschwindigkeitsfeld bei 600 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

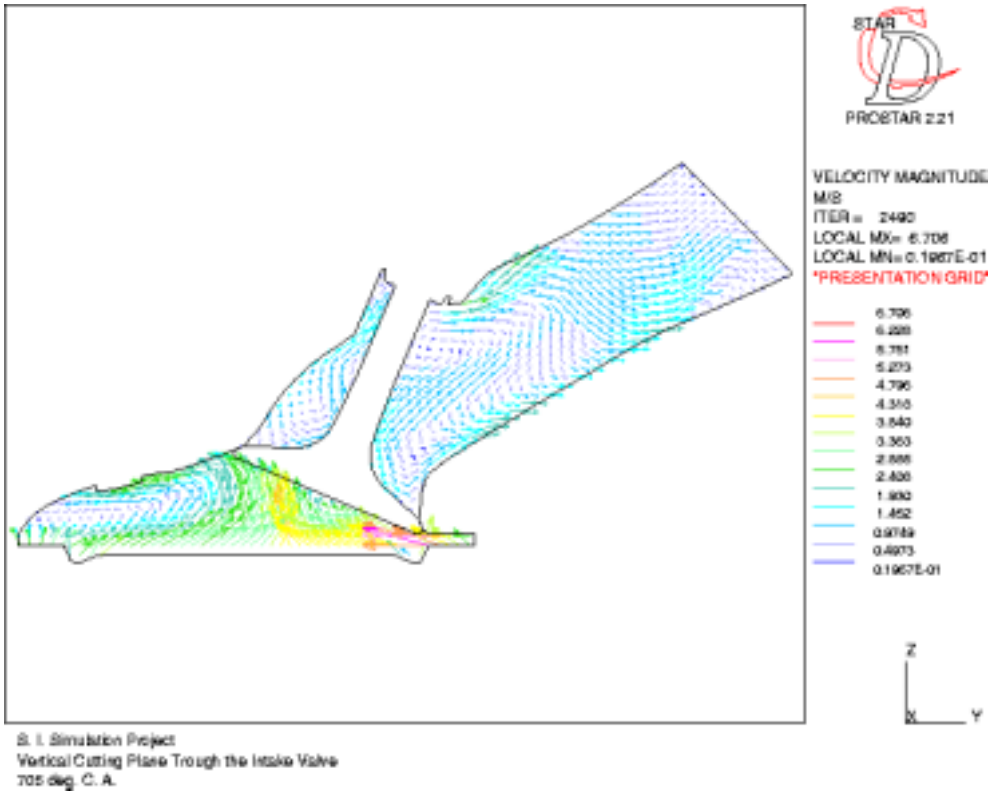

Abbildung 7.44: Geschwindigkeitsfeld bei 705 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

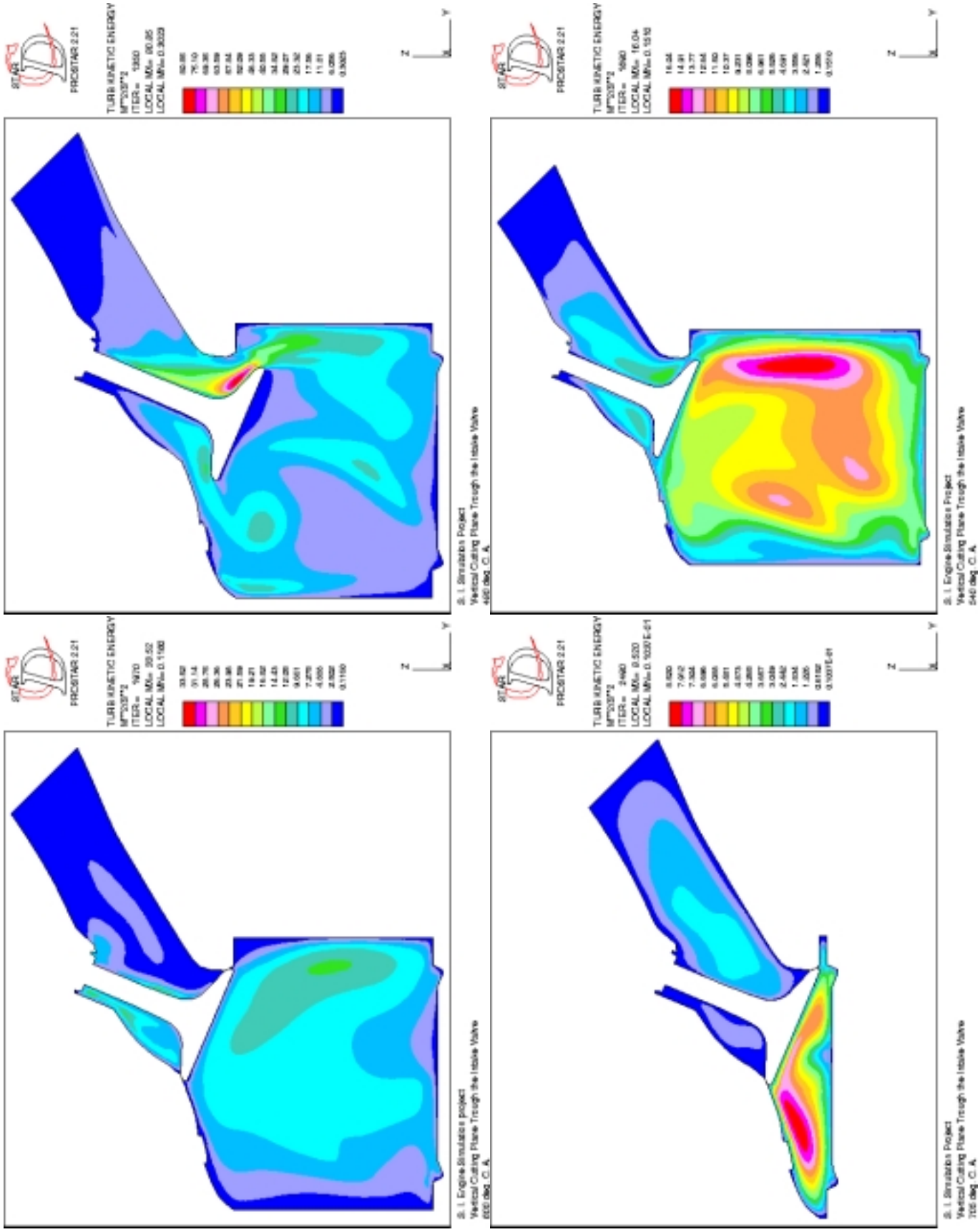

Abbildung 7.45: Turbulente kinetische Energie bei 480 °, 540 °, 600 ° und 705 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

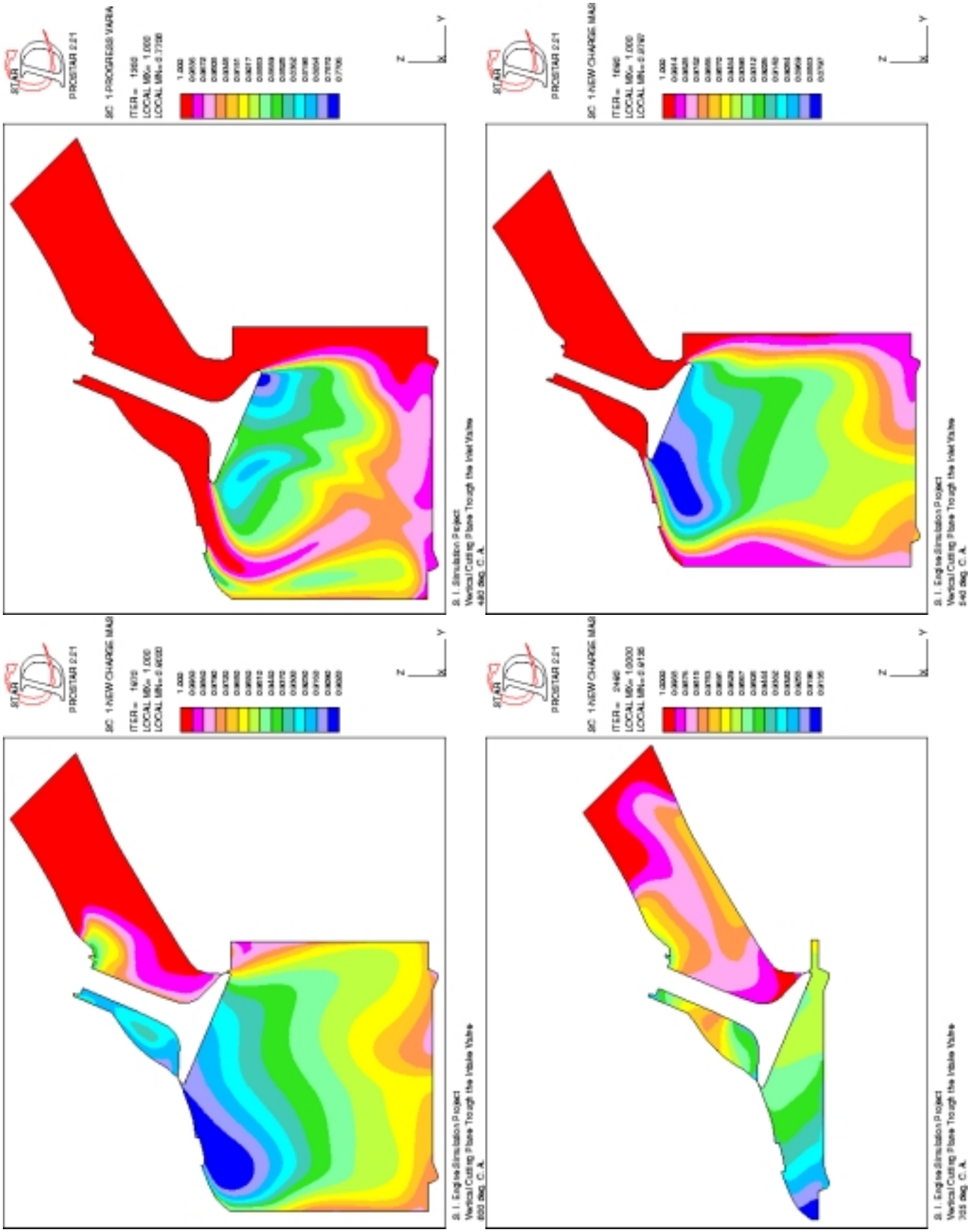

Abbildung 7.46: Massenbruch des Frischgases bei 480 °, 540 °, 600 ° und 705 °KW in einem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil.

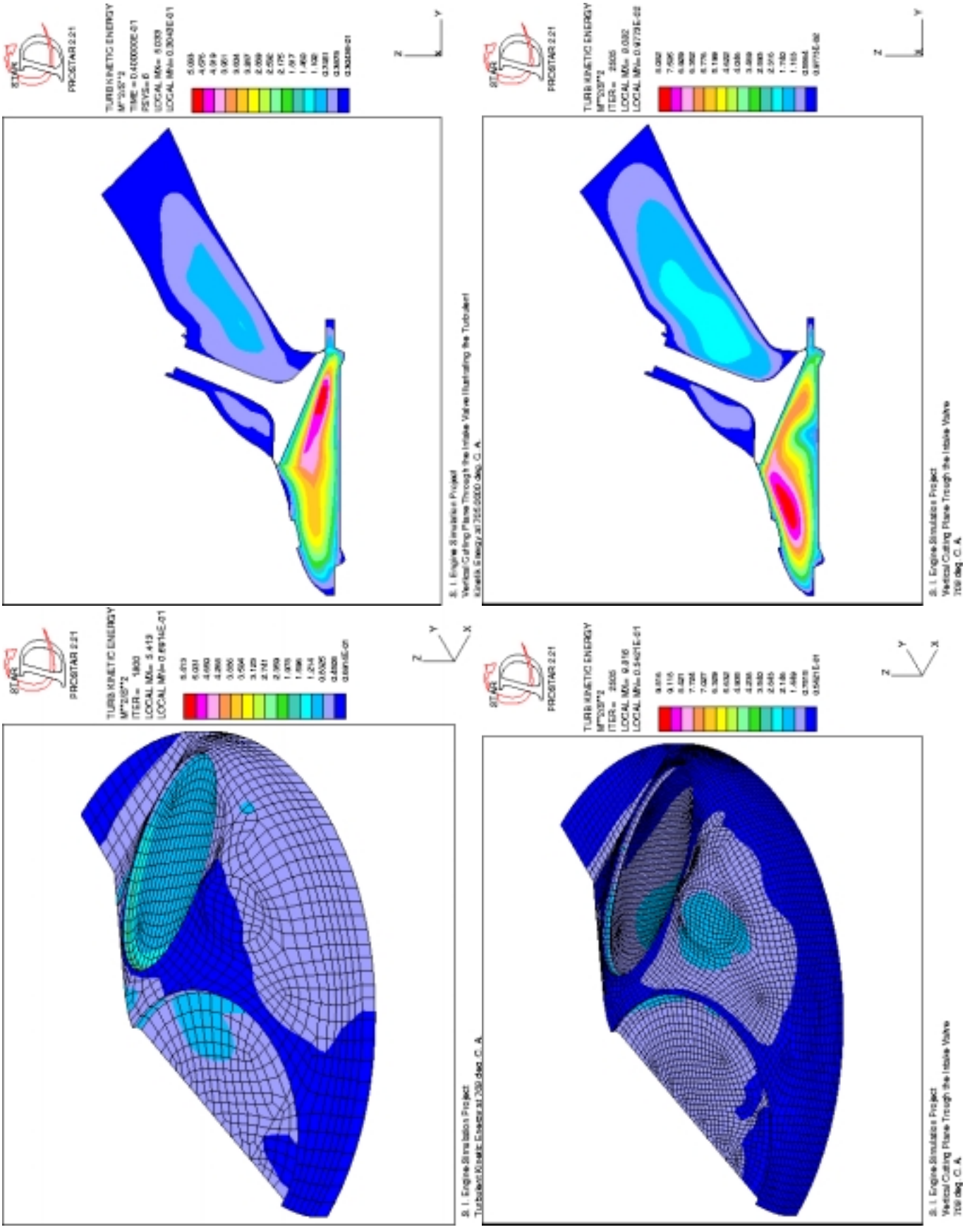

Abbildung 7.47: Netzabhängigkeit: Vergleich der turbulenten kinetischen Energie zum Zündzeitpunkt (708 °KW) beim groben und feinen Netz.

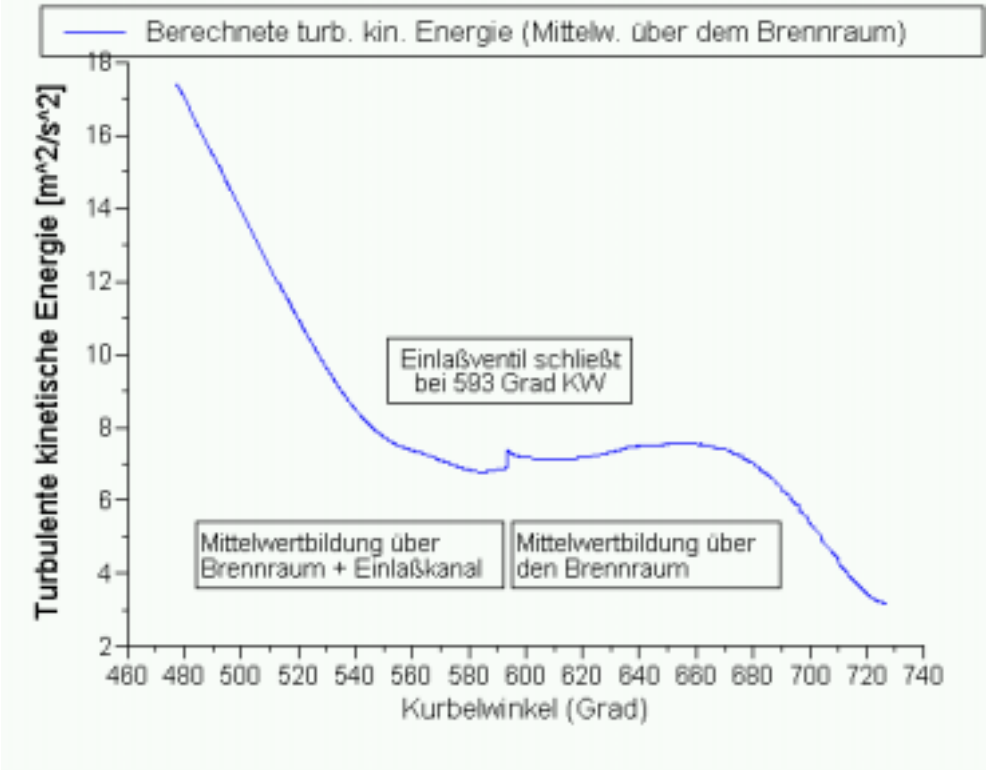

Abbildung 7.48: M112-3V/DZ (VHT), feines Netz: Zeitlicher Verlauf der berechneten turbulenten kinetischen Energie als Mittelwert über dem Brennraum.

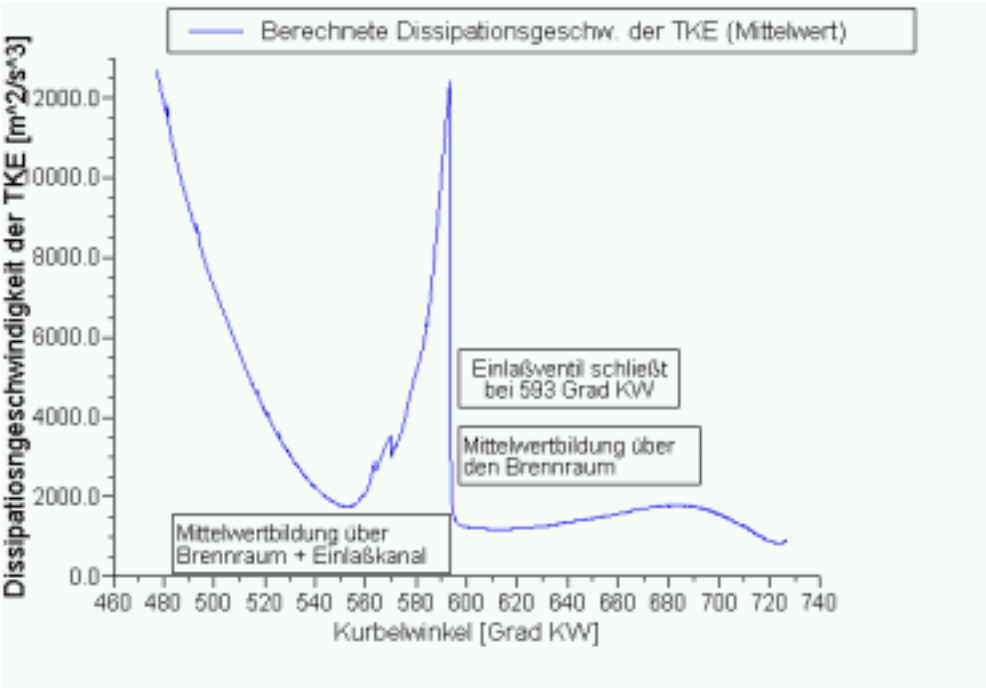

Abbildung 7.49: M112-3V/DZ (VHT), feines Netz: Zeitlicher Verlauf der berechneten Dissipationsgeschwindigkeit der turbulenten kinetischen Energie als Mittelwert über dem Brennraum.

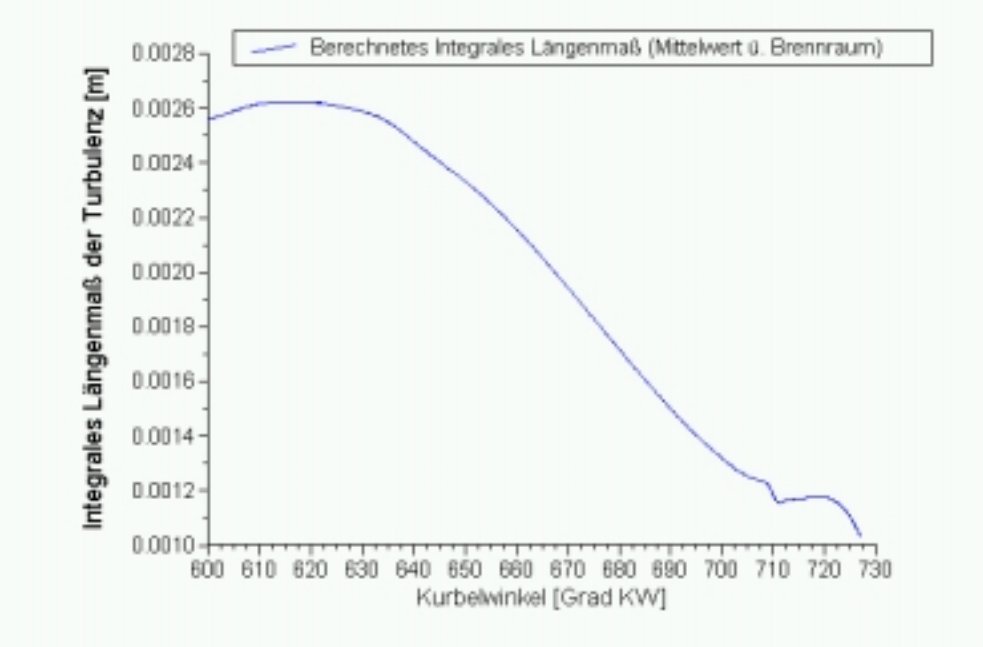

Abbildung 7.50: M112-3V/DZ (VHT), feines Netz: Zeitlicher Verlauf des berechneten Integralen Längenmaßes der Turbulenz als Mittelwert über dem Brennraum.

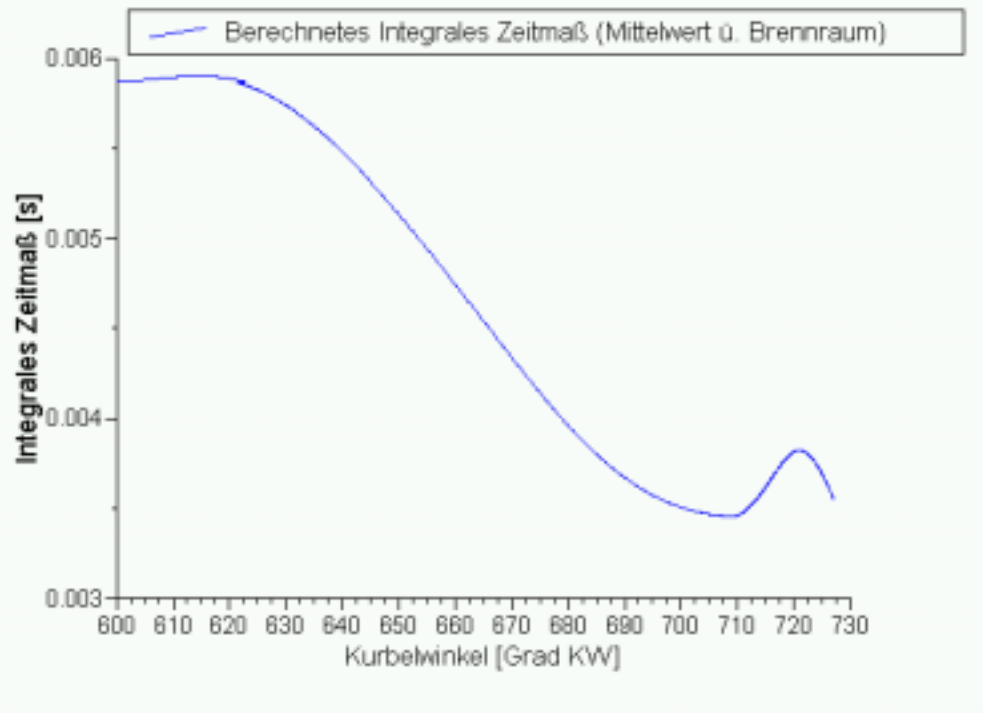

Abbildung 7.51: M112-3V/DZ (VHT), feines Netz: Zeitlicher Verlauf des berechneten Integralen Zeitmaßes der Turbulenz als Mittelwert über dem Brennraum.

Gleichzeitig zu den Unterschieden in den Turbulenzgrößen treten auch beim Feld des Frischgasmassenbruchs, das durch den turbulenten Mischungsprozess über die Wirbelviskosität $\mu_t = C_\mu \cdot \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}}$ maßgeblich beeinflußt wird, deutliche Unterschiede zum groben Netz auf (s. Abb. 6.10, 6.11, 7.46, 7.52). Das Problem der Netzabhängigkeit des Frischgasmassenbruchs ist eine direkte Folge der Netzabhängigkeit der Turbulenz und kann nur durch die Lösung des letzteren Problems beseitigt werden. In Ottomotoren ist der Massenbruch des Frischgases bzw. des Restgases im Brennraum zum Zündzeitpunkt annähernd homogen, die kleinen Unterschiede sind jedoch wegen dem großen Einfluß des Restgasmolenbruchs auf die lokale laminare Flammenausbreitungsgeschwindigkeit (s. Gülder-Korrelation, (Gl. 4.15)) keinesfalls vernachlässigbar.

Durch Extrapolation der Wirbelviskosität auf ein hypothetisches, unendlich feines Netz und Verwendung des asymptotischen Wertes der Wirbelviskosität kann der Einfluß dieser Fehlerquelle in der Simulation reduziert werden. Dafür müßte der Faktor A_{Netz} auf Erfahrungswerte abgestützt werden, die den unterschiedlichen Feinheitsgraden der realen Rechennetze entsprechen. Aus der Erhöhung der TKE um ca. 50% bei einer Verfeinerung des Rechennetzes etwa um Faktor 2 in jede Richtung (also Halbierung der durchschnittlichen Seitenkantenlänge der Zellen) kann für das feine Netz ein Faktor $A_{Netz,fein}$ als eine erste Schätzung vorausgesagt werden. Ausgehend von dem angepaßten Wert des Faktors $A_{Netz,grob}$ = 2,65 beim groben Netz ist $A_{Netz,fein} \approx A_{Netz,grob}/\sqrt{\tilde{k}_{fein}/\tilde{k}_{grob}}$ = 2,17 der erwartete Wert.

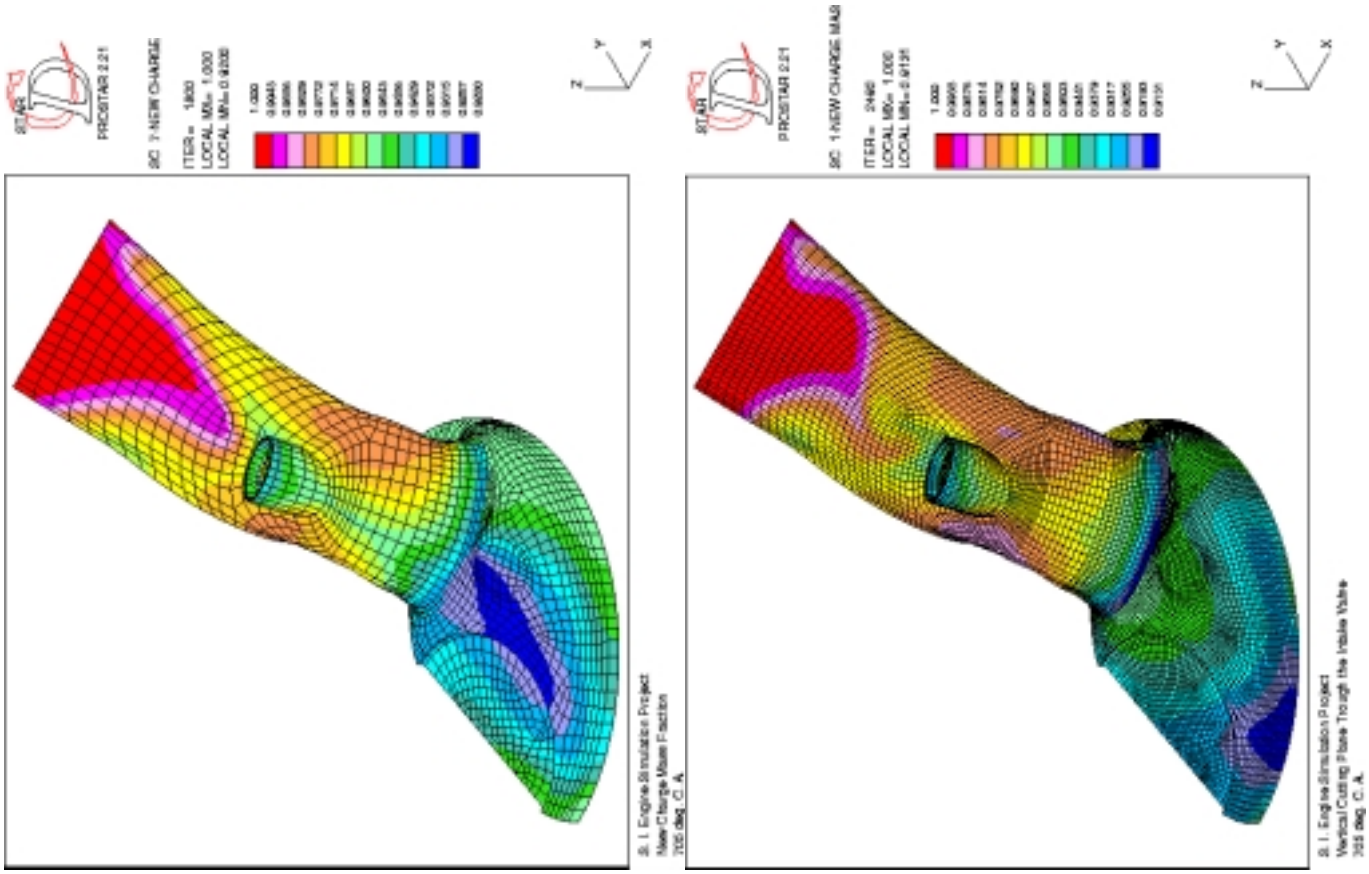

Abbildung 7.52: Netzabhängigkeit: Vergleich der Frischgasmassenbruchs beim groben und feinen Netz bei 705 °KW.

Die durchgeführten Berechnungen der Verbrennung mit dem feinen Netz lassen auf einen Wert $A_{Netz,fein} \approx 2,3$ rückschließen.

Das Problem bei der Simulation eines Ottomotors in dieser Feinheitsklasse (ca. 340000 Zellen beim feinen Netz) besteht jedoch in den gewaltigen Rechenzeiten, die ein solches Netz erfordert. Diese liegen deutlich über den derzeitigen Möglichkeiten eines Computers.

Dadurch, daß in den ersten 20 °KW nach Zündung die Zeitschrittweite auf 0,05 °KW reduziert werden muß, um eine Lösung der Transportgleichungen erst möglich werden zu lassen, wird die notwendige Rechenzeit für eine Verbrennungssimulation inakzeptabel hoch, trotz gleichzeitigem Einsatz von 2 bis 3 Prozessoren auf einer der zur Zeit leistungsfähigsten Workstations. Jeder der Prozessoren wird mit der Simulation für einen Wert des Parameters A_{Netz} beauftragt, welcher aus der Übereinstimmung des berechneten Druckverlaufs mit dem gemessenen Druckverlauf zu bestimmen ist.

Eine nennenswerte Reduzierung der Rechenzeit aufgrund der Tatsache, daß nur 80000 Zellen in der Nähe der oberen Totpunkts aktive Zellen sind, wurde nicht festgestellt. Die Überforderung des Rechners wurde offensichtlich, als nach einem Monat die Berechung der Verbrennung erst bis 729 °KW erfolgt war. Deshalb mußte der Rechenbetrieb mit dem feinen Netz eingestellt werden.

Diese Klasse von Simulationsaufgaben ist nur unter Einsatz von Höchstleistungs-Parallellrechnern möglich. Die Ergebnisse der Verbrennungssimulation mit der besten erzielten Übereinstimmung mit Meßwerten für den Druckverlauf ($A_{Netz,fein} = 2,3$) sind in Abb. 7.53 bis Abb. 7.55 dargestellt.

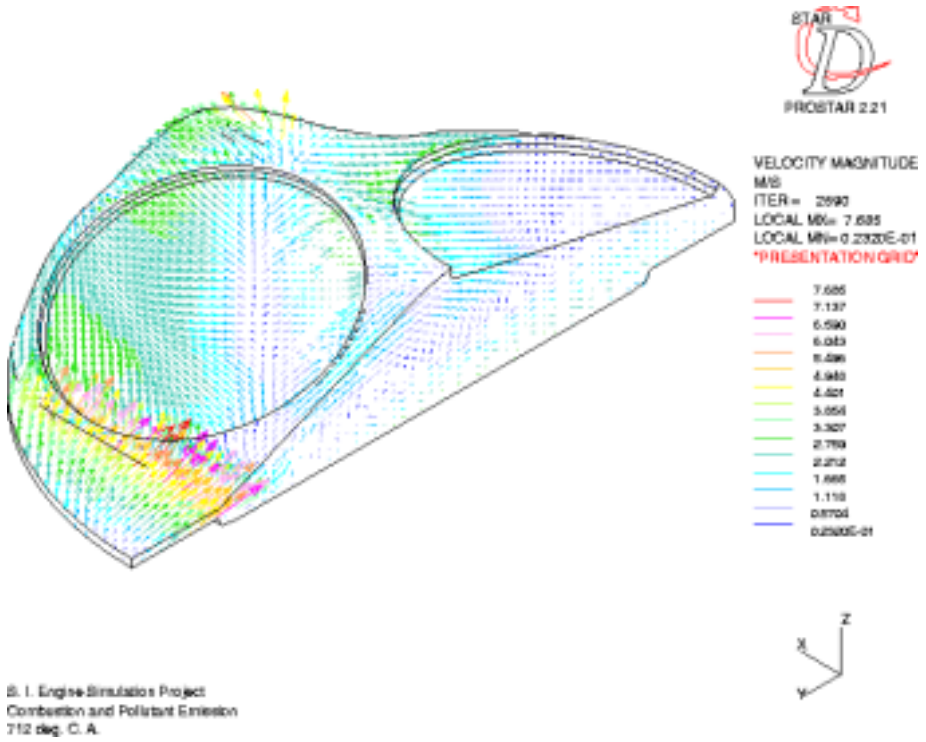

Abbildung 7.53: Quetschspaltströmung: Geschwindigkeitsfeld bei 712 °KW.

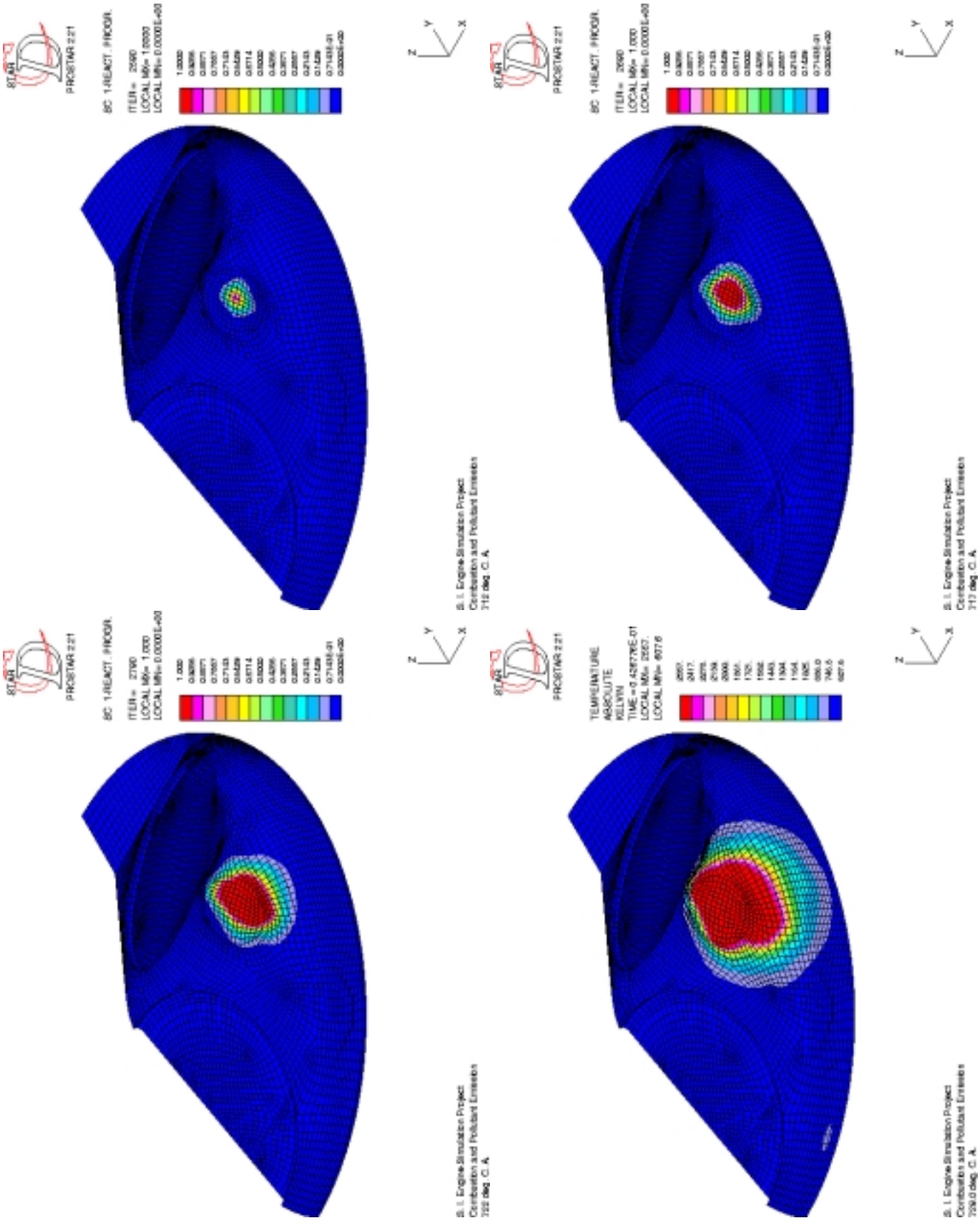

Abbildung 7.54: Flammenausbreitung im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ, berechnet mit dem feinen Netz: Temperaturfeld bei 712 °, 717 °, 722 ° und 729 °KW.

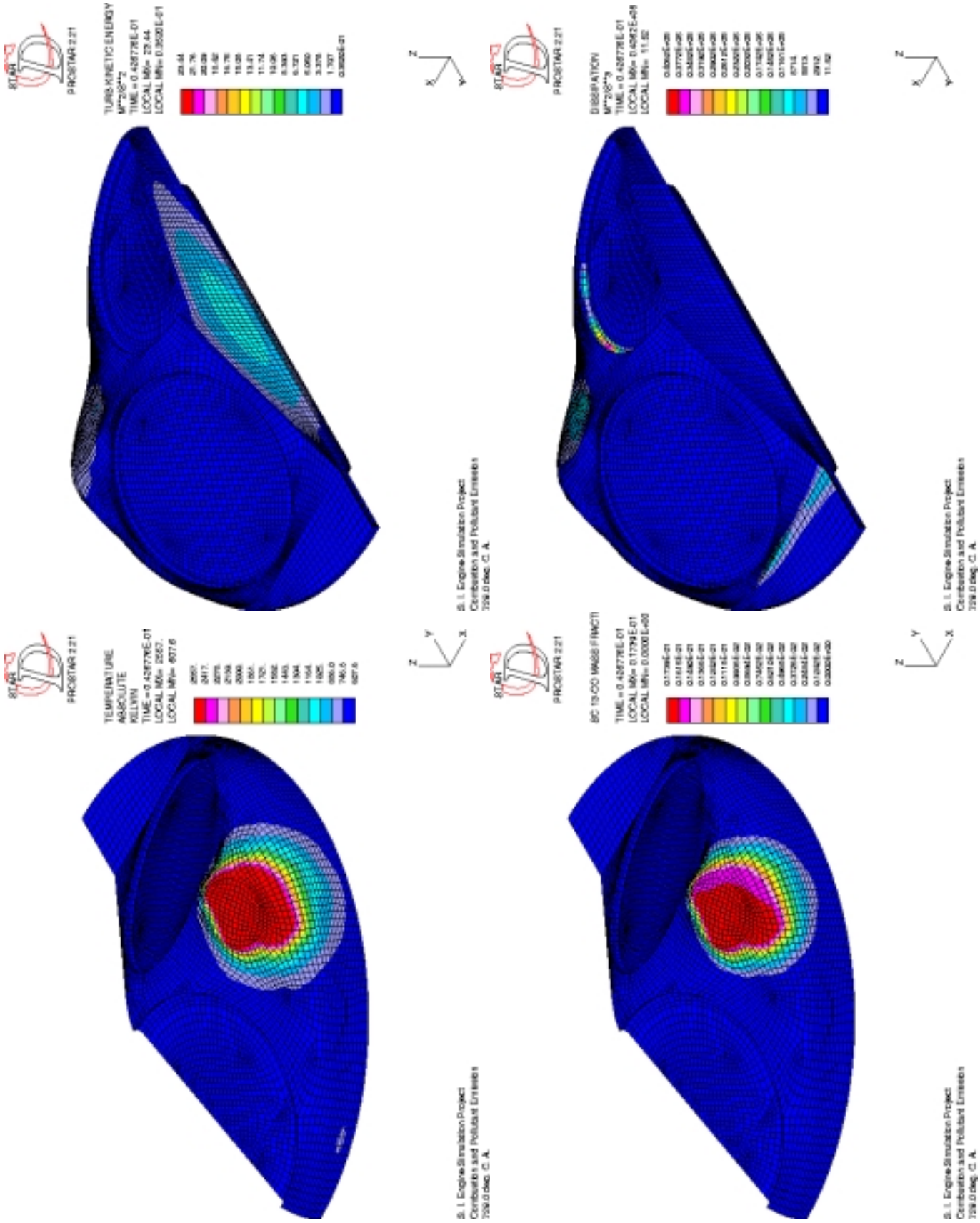

Abbildung 7.55: Turbulente kinetische Energie und Dissipationsgeschwindigkeit der TKE, sowie Temperatur und Massenbruch des Kohlenmonoxids bei 729 °KW.

7.1.6 Berechnung der Strömung und der Verbrennung mit dem „verfeinerten“ Netz

Als praktikable Alternative zur sehr rechenzeitintensiven Strömungssimulation mit dem feinen Netz kann eine Berechnung der Strömung mit einem relativ groben Netz angewendet werden, wenn der Zerfall der Tumbleströmung gegen Ende des Kompressionstaktes mit einem ausreichend feinen Rechennetz durchgeführt wird, das der Motorgeometrie in der Nähe des oberen Totpunkts angepaßt ist und jede Form des Topologiewechsels und die damit verbundenen numerischen Fehler vermeidet.

Diese Idee ist bestechend einfach und kann, insofern sie sich als praxistauglich erweist, einen Ausweg aus dem Dilemma zwischen ausreichender Genauigkeit, die durch eine höhere Auflösung erreicht wird, und dem damit verbundenen hohen Aufwand an Rechnerresourcen bieten.

Zur Bewertung dieser Alternative wurde ausgehend vom groben Netz in der Stellung 665 °KW (55 °KW vor ZOT) eine Netzverfeinerung durch Unterteilung aller Zellen des Brennraums mit dem Faktor 2 nach jeder der drei räumlichen Richtungen vorgenommen und das so entstandene Netz um ein „Feuerstegspalt“-Volumen erweitert (s. Abb. 7.56). Das „verfeinerte“ Netz umfaßt somit ca. 133000 Zellen, die zusammen eine Hälfte des symmetrischen Brennraums abbilden.

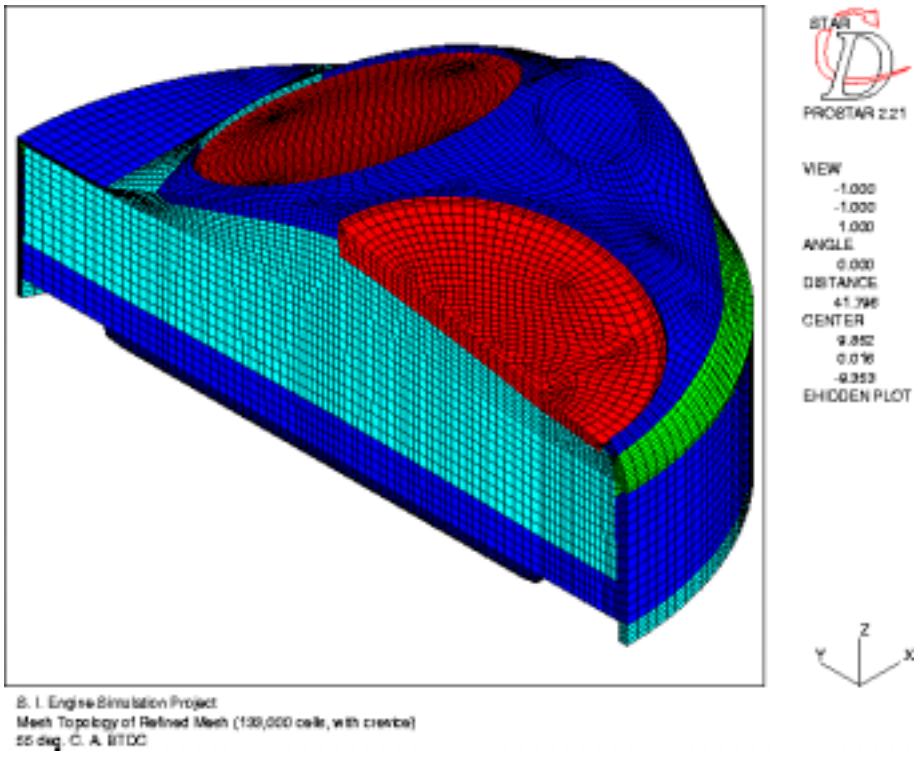

Abbildung 7.56: M112-3V/DZ (VHT): Netzstruktur des verfeinerten Rechennetzes.

In dem Spalt-Volumen, welches das Volumen des Feuerstegspalts $V_S = 0,93$ cm^3 in dem realen Motor besitzt, kann keine Verbrennung stattfinden, weil die Flamme in der motorischen Verbrennung am Rande des Spalts verlöscht. Die Reaktionsfortschrittsvariable $\tilde{c}$ wird deshalb in dem Spalt permanent auf den Wert Null gesetzt.

Bei der Netzgenerierung im Bereich des Spalts wurde hohen Wert gelegt auf eine ausreichende Auflösung des Spalts mit 3 Zellschichten in radialer Richtung sowie auf die reguläre Struktur des Netzes beim Übergang vom Feuerstegspalt zum Brennraum. Dabei wurde eine Verbreiterung des Spaltes auf $d_S \cong 0,3$ mm in Kauf genommen, weil der Spalt nur in seiner Funktion als Speichervolumen für unverbranntes Gemisch in dem Brennraum interessiert (s. Analyse der Fehlerquellen in § 6.1.4). Eine exakte Analyse der Strömung in dem Feuerstegspalt erfordert eine hohe räumliche Auflösung des Ringspalts, die Vorgabe einer Austrittsgeschwindigkeit des Gasgemisches in der Ebene des obersten Kolbenrings und die Berücksichtigung der Sekundärbewegung des Kolbens. Dies ist nicht Gegenstand der vorliegenden Arbeit, es stellt jedoch ein interessantes Aufgabengebiet für die Zukunft dar.

Als Anfangsbedingung der Berechnung mit dem verfeinerten Netz wurde das Strömungsfeld vorgegeben, das mit dem groben Netz zum Zeitpunkt 665 °KW berechnet und auf das verfeinerte Netz mittels Interpolation übertragen wurde. Alle Randbedingungen für das Strömungsfeld sind vom Typ „feste Wand“ mit der jeweils vorgeschriebenen Temperatur. Berechnet wurde derselbe Betriebspunkt wie im Falle der beiden vorhergehenden Simulationen. Das Strömungsfeld, das mit dem verfeinerten Netz berechnet wird, unterscheidet sich bezüglich der Turbulenz breits zum Zündzeitpunkt deutlich von dem des groben Rechennetzes, obwohl zwischen Beginn der Rechnung und dem Zündzeitpunkt (708 °KW) nur 43 °KW liegen.

In Abb. 7.57 ist das Geschwindigkeitsfeld zum Zündzeitpunkt zu sehen, darauffolgend der Vergleich der berechneten Werte der turbulenten kinetische Energie in dem senkrechten Schnitt durch das Einlaßventil zum Zündzeitpunkt, berechnet mit den drei unterschiedlichen Netzen.

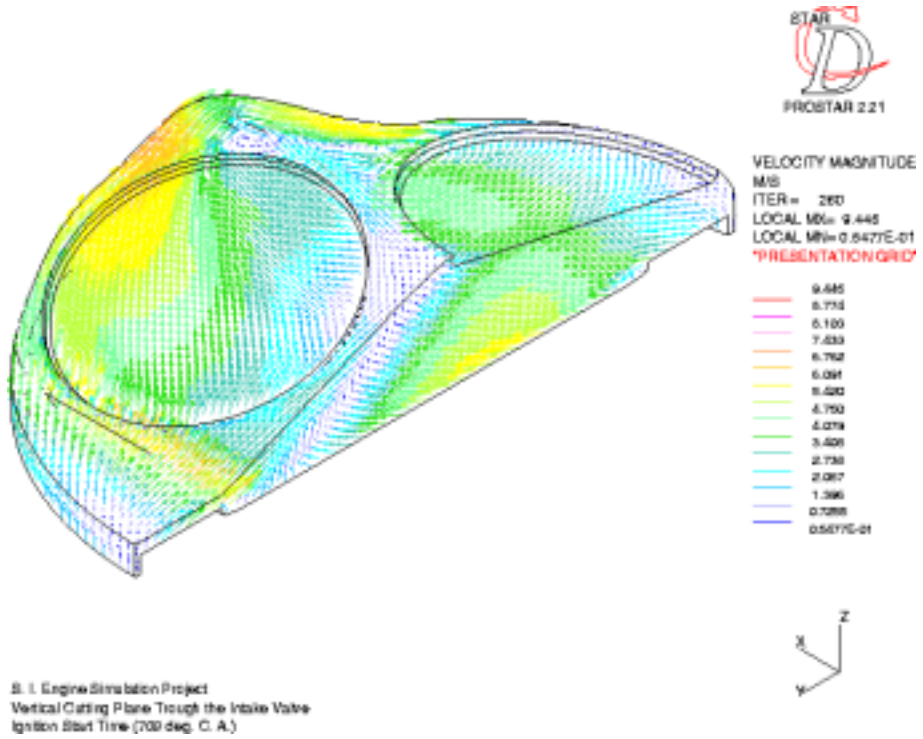

Abbildung 7.57: M112-3V/DZ (VHT), Verfeinertes Netz: Geschwindigkeitsfeld zum Zündzeitpunkt (708 °KW).

Der zeitliche Verlauf der berechneten Turbulenzgrößen (als Mittelwerte über dem Brennraum) weist in der Endphase der Kompression dieselben allgemeinen Merkmale der Netzabhängigkeit auf, die von Gildein [61] in den Untersuchungen der Strömung am Scheibenbrennraum aufgezeigt wurden(s. Abb. 7.59). Mit steigendem Auflösungsvermögen des Rechennetzes, d.h. mit steigender Zellenzahl, steigt auch der berechnete Mittelwert der TKE in der Nähe des oberen Totpunkts. Der asymptotische Wert der Brennraum-gemittelten TKE, der einer unendlich feinen Auflösung des Netzes entspricht (s. Netzabhängigkeitshypothese in § 5.1.2), ist in Abb. 7.60 für jede der drei verwendeten Rechennetze aufgetragen.

Der Netzabhängigkeitsfaktor A_{Netz}, mit dessen Quadrat der berechnete Wert der TKE multipliziert wurde, nähert sich mit wachsender Netzfeinheit dem asymptotischen Wert 1,0. Wenn man davon ausgeht, daß die Annäherung von A_{Netz} an den asymptotischen Wert proportional zum Mittelwert der Seitenkantenlängen der Zellen des Netzes ist,

$$A_{Netz} \cong 1,0 + F_{Netz} \cdot \overline{\delta l} \cong 1,0 + F_{Netz} \cdot \left(\frac{V_{Zyl}}{N_{cells}}\right)^{\frac{1}{3}} \quad , \tag{7.2}$$

dann kann man anhand der vorliegenden Ergebnisse die Zellenzahl abschätzen, die notwendig ist, um den Diskretisierungsfehler bei der Lösung der Transportgleichung der TKE unter einem gewünschten Wert zu halten. Die notwendige Zellenzahl, um den Diskretisierungsfehler auf unter 20% zu reduzieren, liegt für einen typischen seriennahen Ottomotor schätzungsweise bei ca. 4 Millionen Zellen in UT für eine symmetrische Motorgeometrie (Halbmodell), bzw. 8 Mio. Zellen für eine unsymmetrische Geometrie. Die Rechenleistung, die diese Zellenzahl erfordert, ist nur mit Hilfe von Höchstleistungs-Parallelrechnern zu erbringen. Simulationen mit einer Zellenzahl in dieser Größe (bis 10 Mio. Zellen) werden heute schon für die Berechnung der stationären Außenumströmung und Motorraumdurchströmung von Fahrzeugen durchgeführt. Es ist deshalb nur eine Frage der Zeit, wann Rechenkapazitäten in dieser Größenordnung für motorische Berechnungen zur Verfügung stehen werden.

In Abb. 7.59 ist, zum Unterschied von den Untersuchungen von Gildein, der Einfluß der Verbrennung auf die TKE berücksichtigt. Der Mittelwert der TKE steigt während der Verbrennung an. Nachdem die Flammenfront den gesamten Brennraum erfaßt hat, fällt der Mittelwert der TKE relativ steil unter den Wert, der zum Zündzeitpunkt erreicht wurde.

In Abb. 7.65 ist der Frischgasmassenbruch, berechnet mit dem groben und dem verfeinerten Netz bei 705 °KW zu sehen, darauffolgend in Abb. 7.66 der Druckverlauf bei der Verbrennungsrechnung mit dem verfeinerten Netz. Der Wert $A_{Netz} = 2,25$ liefert die beste erzielte Übereinstimmung von Messung und Rechnung für den Wert des Spitzendrucks. Die Ergebnisse der 3D-Simulation der Verbrennung und der Stickoxidbildung mit dem verfeinerten Netz sind in Abb. 7.67 bis Abb. 7.70 dargestellt. Sie zeigen, daß die Methode der Strömungssimulation des Ladungswechsels mit einem relativ groben Netz und der darauffolgenden Berechnung der Strömung in der Endphase der Kompression (Zerfall der Tumble-Strömung) und der Verbrennung auf einem verfeinerten Netz ein guter Kompromiß ist und einen praktikablen Weg darstellt in dem Spannungsfeld zwischen den Anforderungen an die Genauigkeit der Lösung und den heute zur Verfügung stehenden Rechenkapazitäten. Damit sind zwei der Ziele dieser Arbeit erreicht: die Überprüfung des Netzabhängigkeitsverhaltens der Strömungsvariablen bei der 3D-Simulation der Strömung an einer seriennahen Motorgeometrie und die Empfehlung eines Verfahren zur möglichst genauen und gleichzeitig kostengünstigen Durchführung der 3D-Simulation der motorischen Verbrennung.

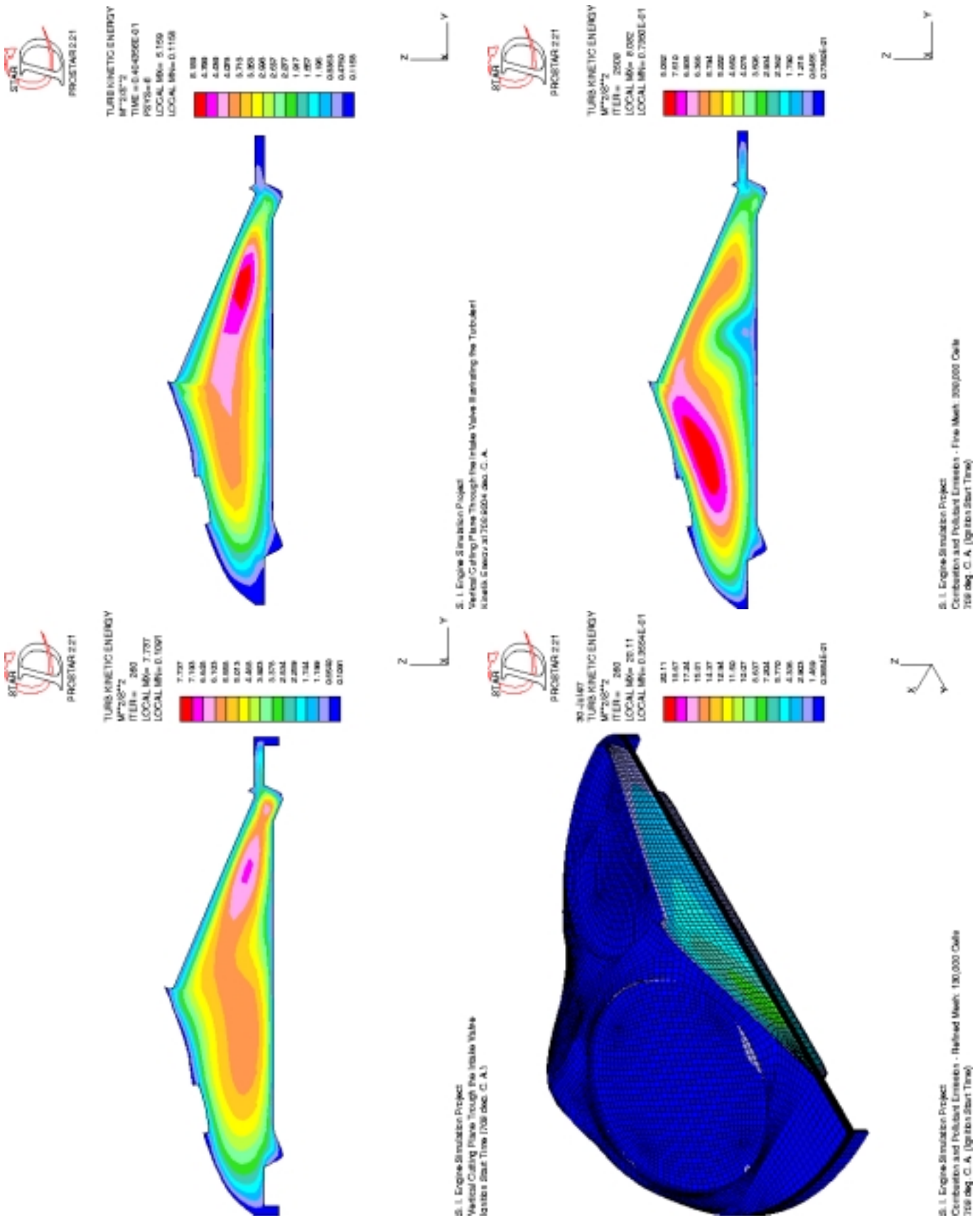

Abbildung 7.58: Vergleich der berechneten Werte der turbulenten kinetischen Energie im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT) zum Zündzeitpunkt (708 °KW) bei unterschiedlicher Netzfeinheit (grobes, feines und verfeinertes Netz).

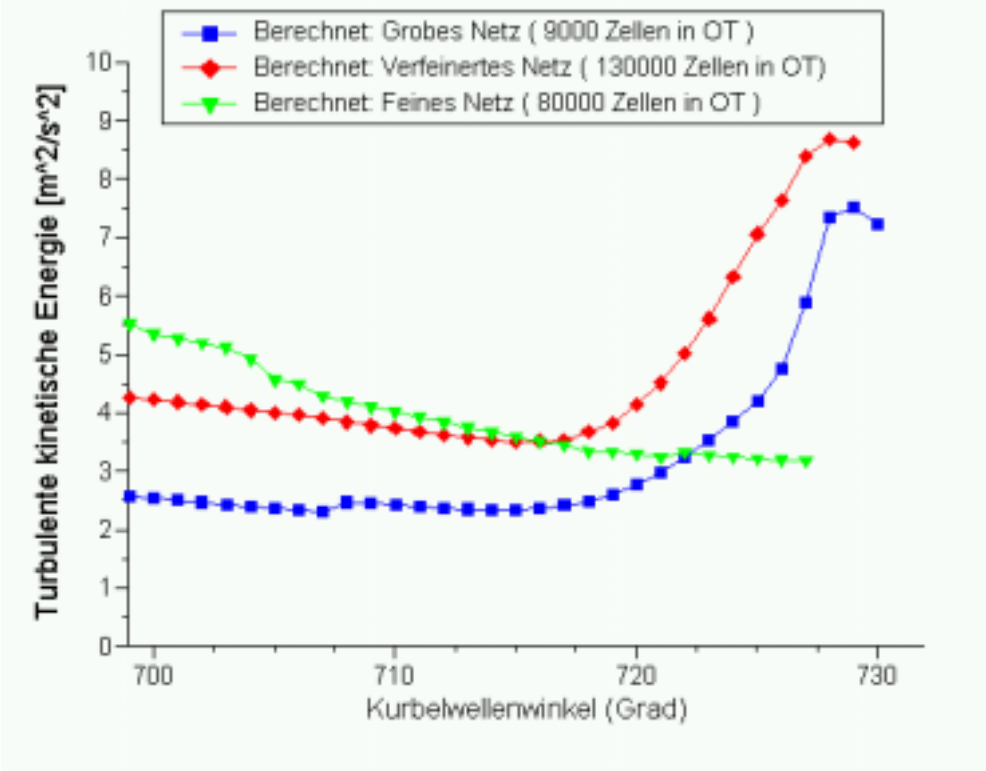

Abbildung 7.59: M112-3V/DZ (VHT): Zeitlicher Verlauf der berechneten turbulenten kinetischen Energie als Mittelwert über dem Brennraum bei unterschiedlicher Netzfeinheit.

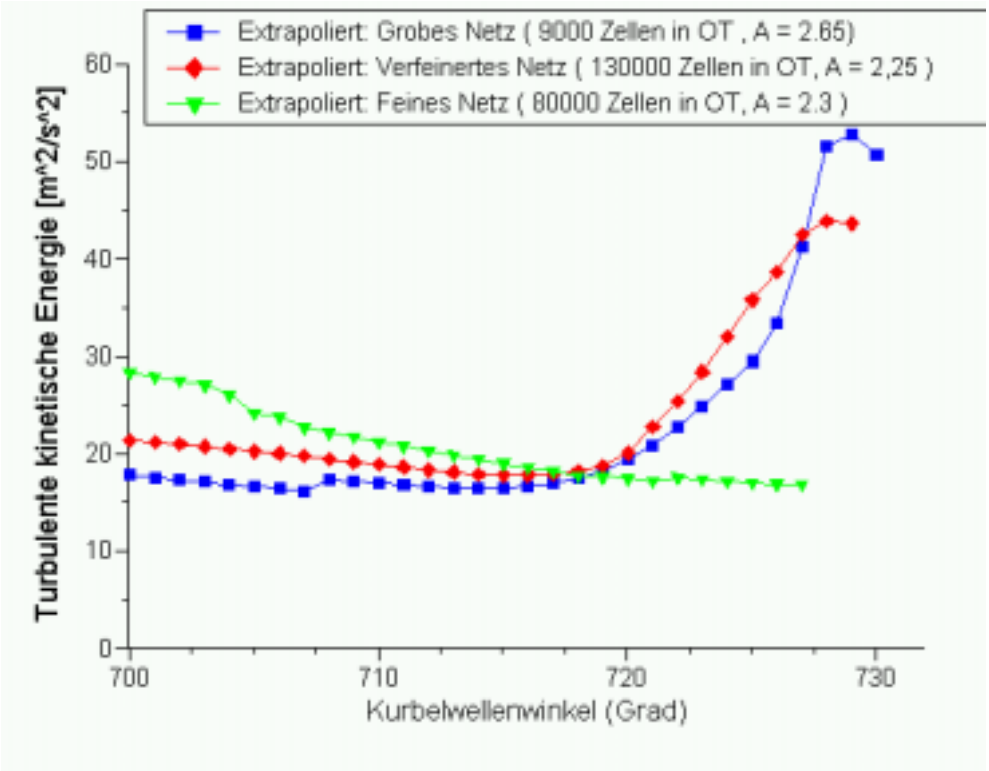

Abbildung 7.60: M112-3V/DZ (VHT): Zeitlicher Verlauf der extrapolierten turbulenten kinetischen Energie als Mittelwert über dem Brennraum bei unterschiedlicher Netzfeinheit.

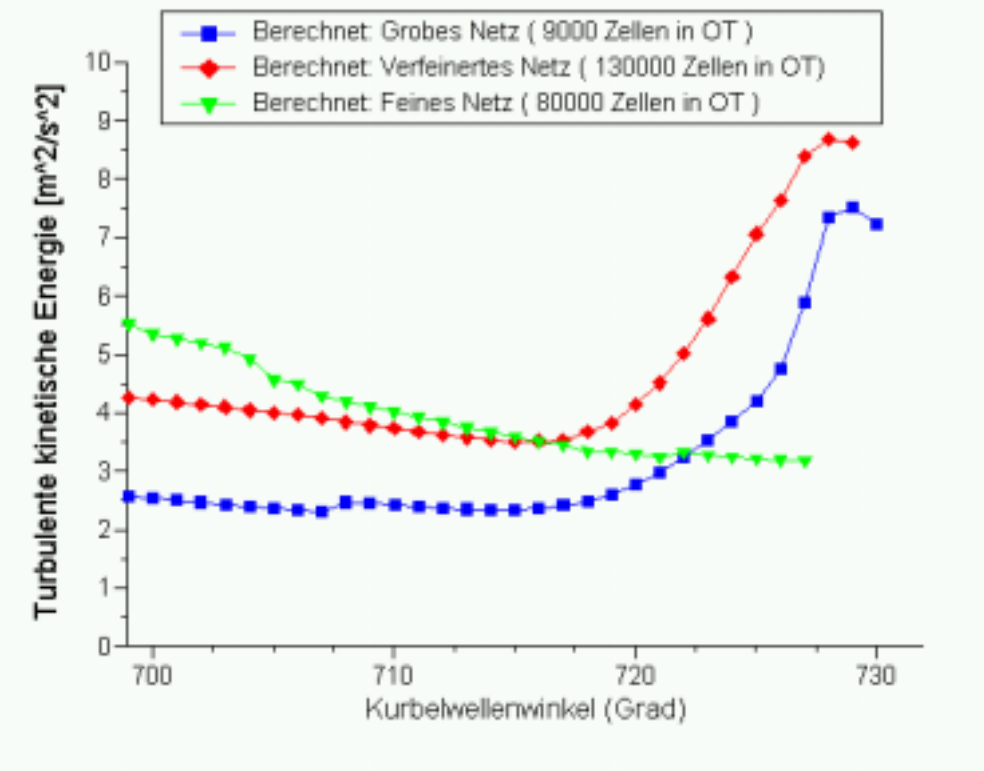

Abbildung 7.61: M112-3V/DZ (VHT): Zeitlicher Verlauf der berechneten Dissipationsgeschwindigkeit $\tilde{\epsilon}$ als Mittelwert über dem Brennraum bei unterschiedlicher Netzfeinheit.

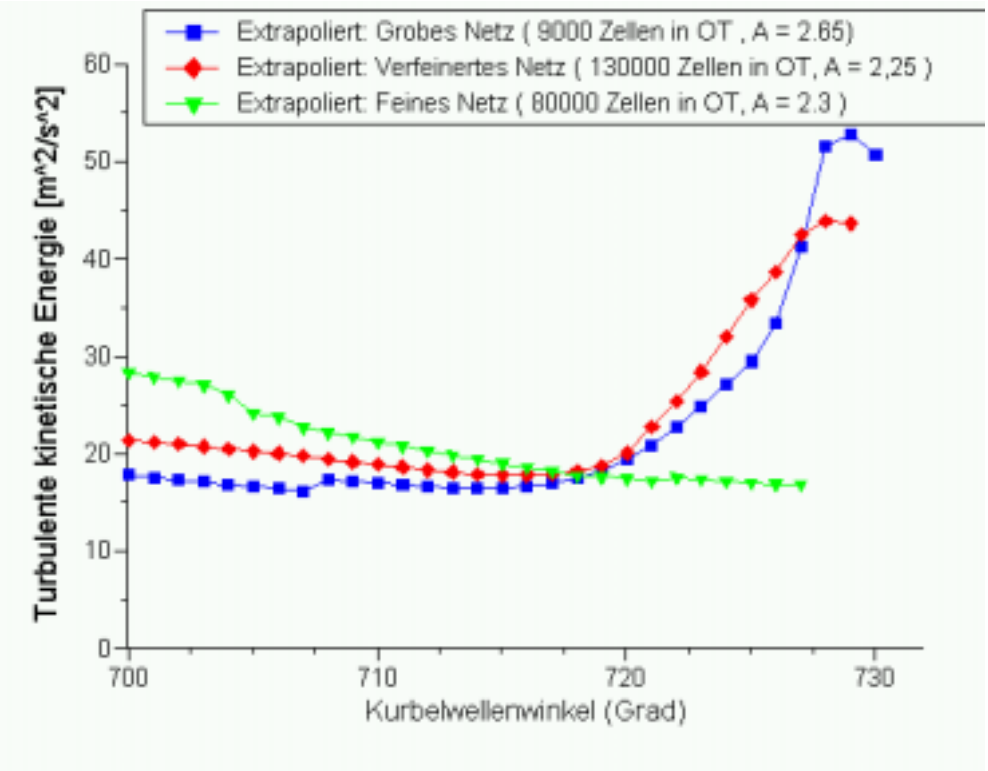

Abbildung 7.62: M112-3V/DZ (VHT): Zeitlicher Verlauf der extrapolierten Dissipationsgeschwindigkeit $\tilde{\epsilon}$ als Mittelwert über dem Brennraum bei unterschiedlicher Netzfeinheit.

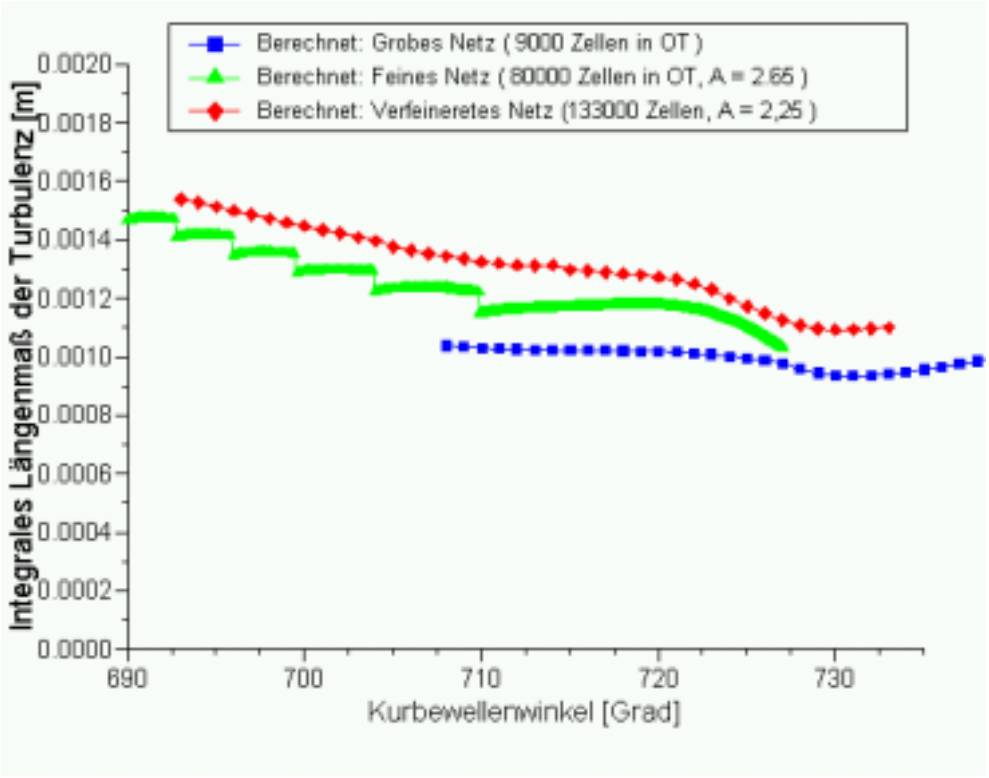

Abbildung 7.63: M112-3V/DZ (VHT): Zeitlicher Verlauf des berechneten integralen Längenmaßes als Mittelwert über dem Brennraum bei unterschiedlicher Netzfeinheit.

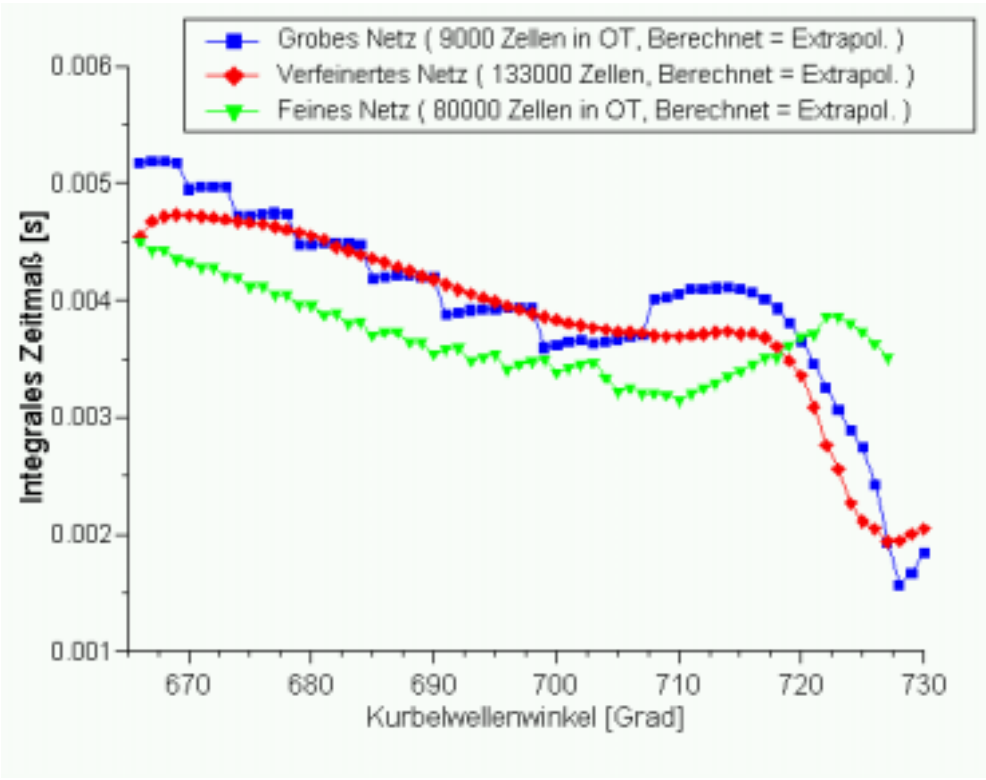

Abbildung 7.64: M112-3V/DZ (VHT): Zeitlicher Verlauf des integralen Zeitmaßes als Mittelwert über dem Brennraum bei unterschiedlicher Netzfeinheit.

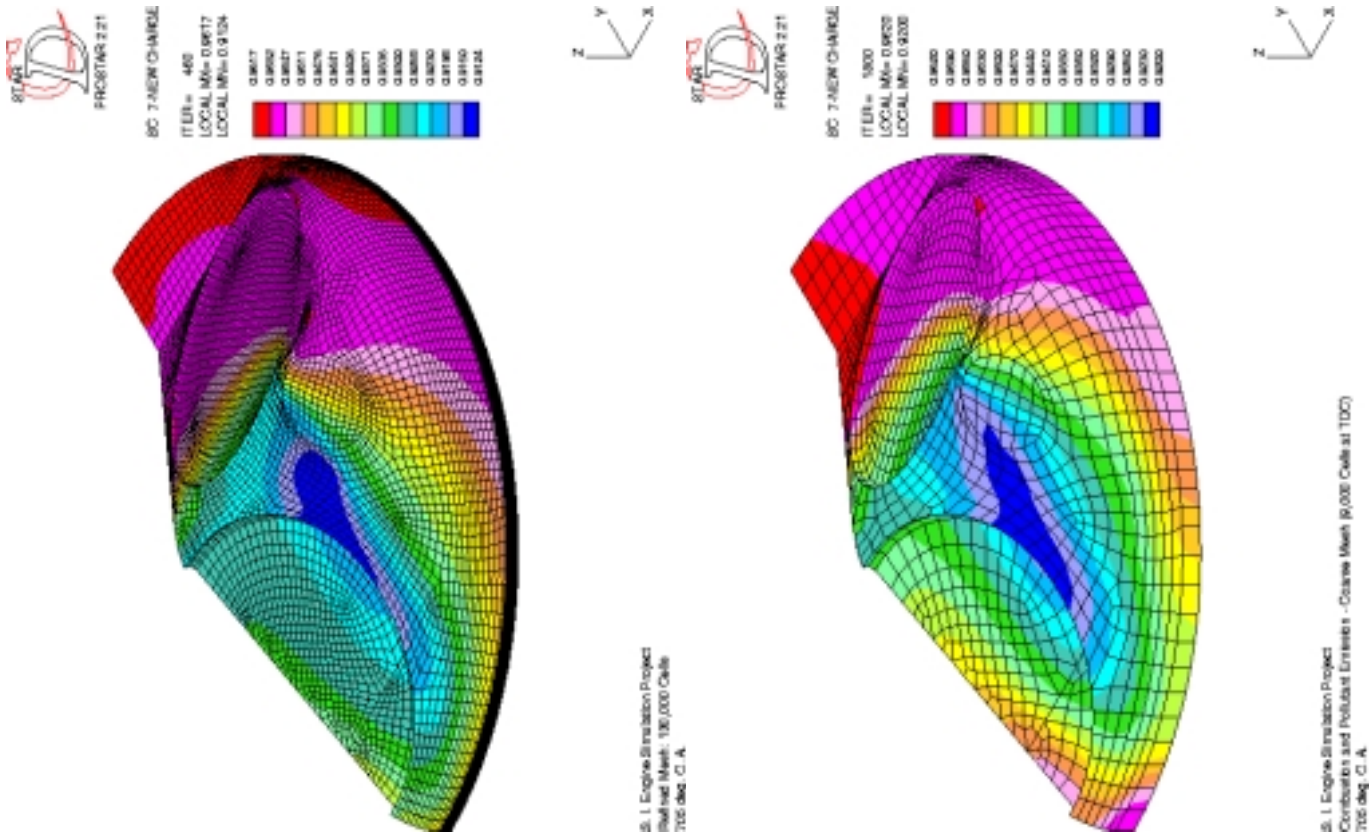

Abbildung 7.65: Vergleich des Frischgasmassenbruchs bei 705 °KW bei dem groben und dem verfeinerten Netz.

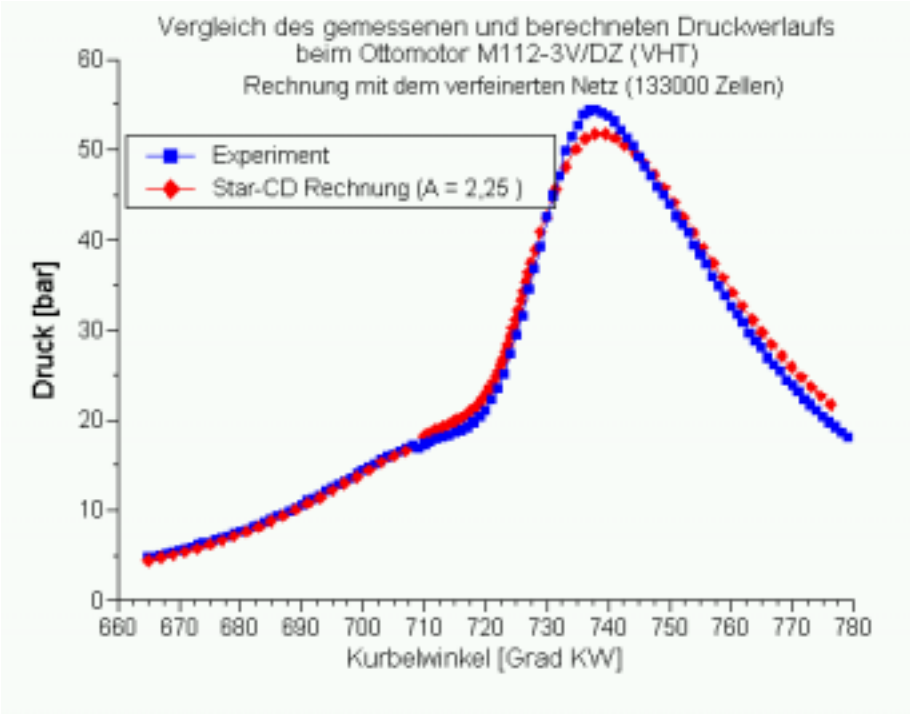

Abbildung 7.66: Vergleich zwischen gemessenem und berechnetem Druckverlauf (Rechnung mit dem verfeinerten Netz bei bester Übereinstimmung - $A_{Netz} = 2,25$).

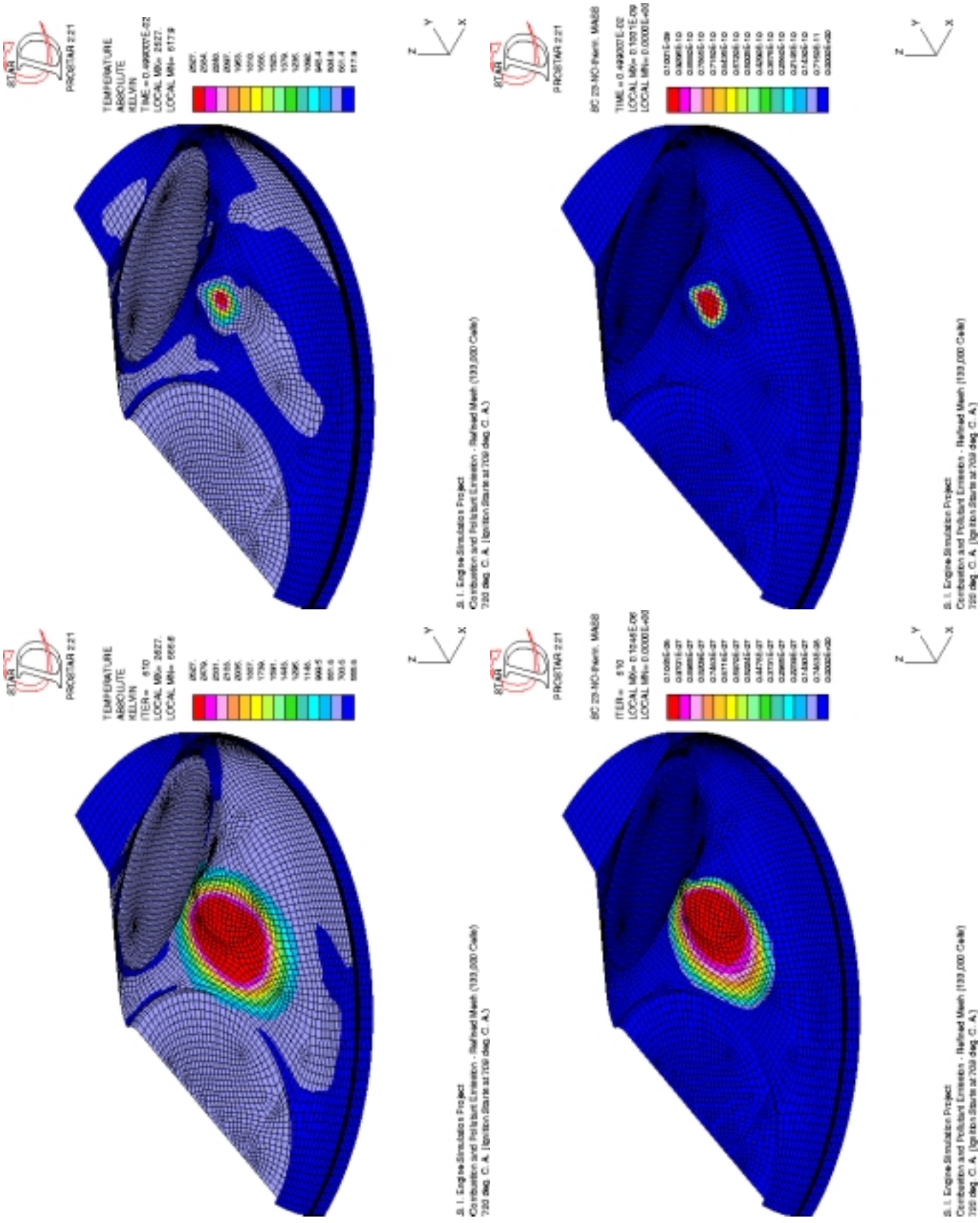

Abbildung 7.67: Temperatur und NO-Massenbruch im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT) bei 710 ° und 720 °KW, berechnet mit dem verfeinerten Netz.

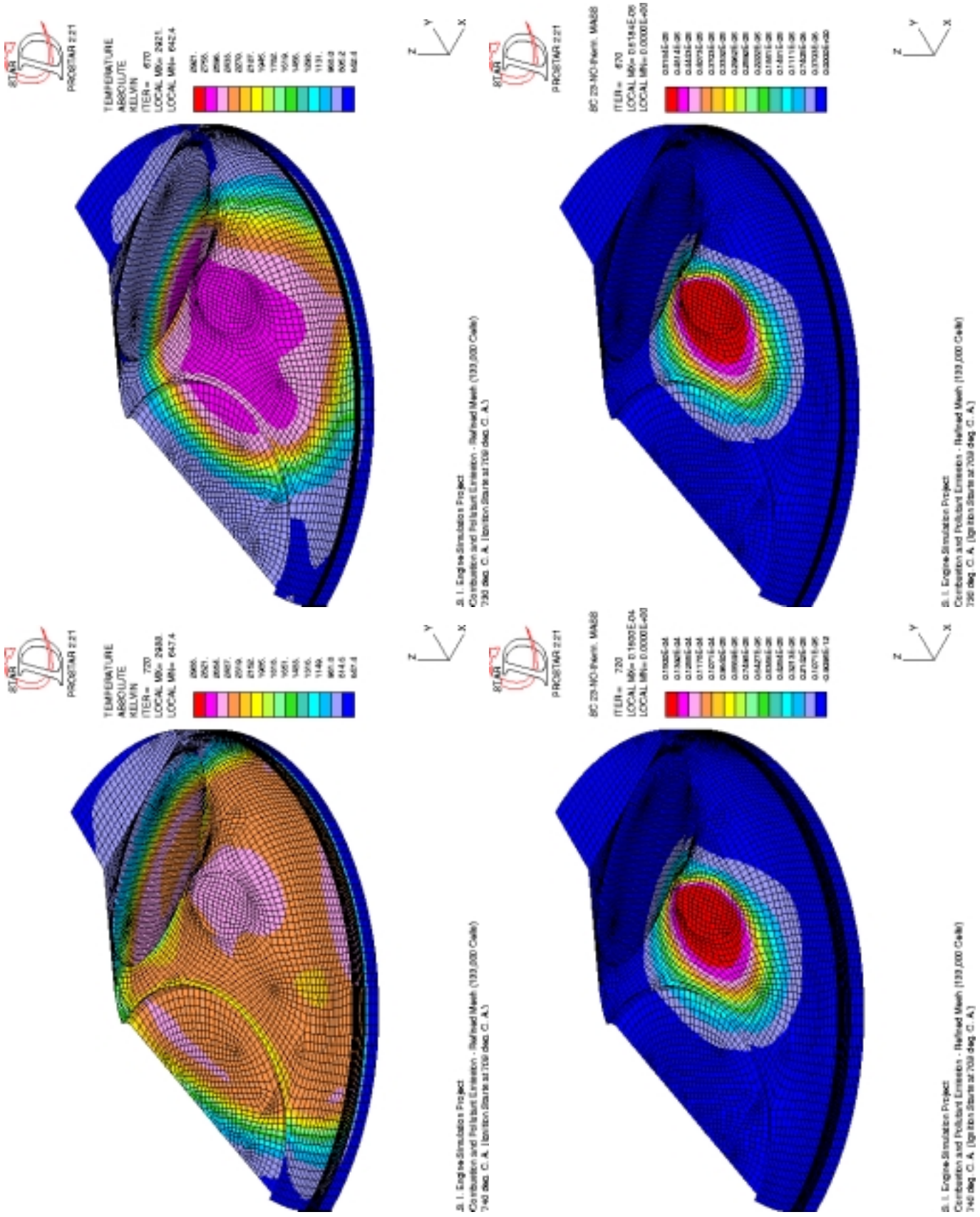

Abbildung 7.68: Temperatur und NO-Massenbruch im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT) bei 730 ° und 740 °KW, berechnet mit dem verfeinerten Netz.

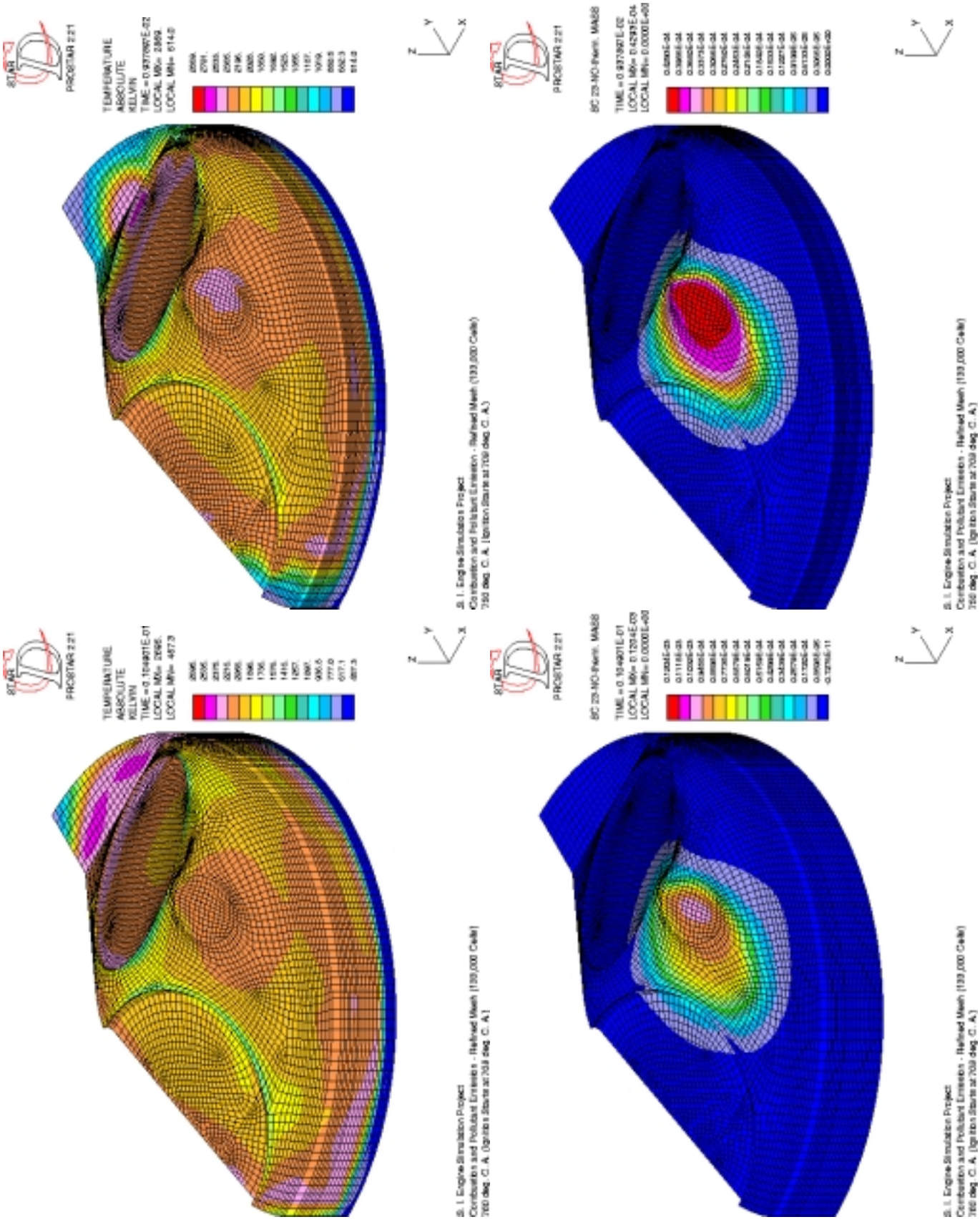

Abbildung 7.69: Temperatur und NO-Massenbruch im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT) bei 750 ° und 760 °KW, berechnet mit dem verfeinerten Netz.

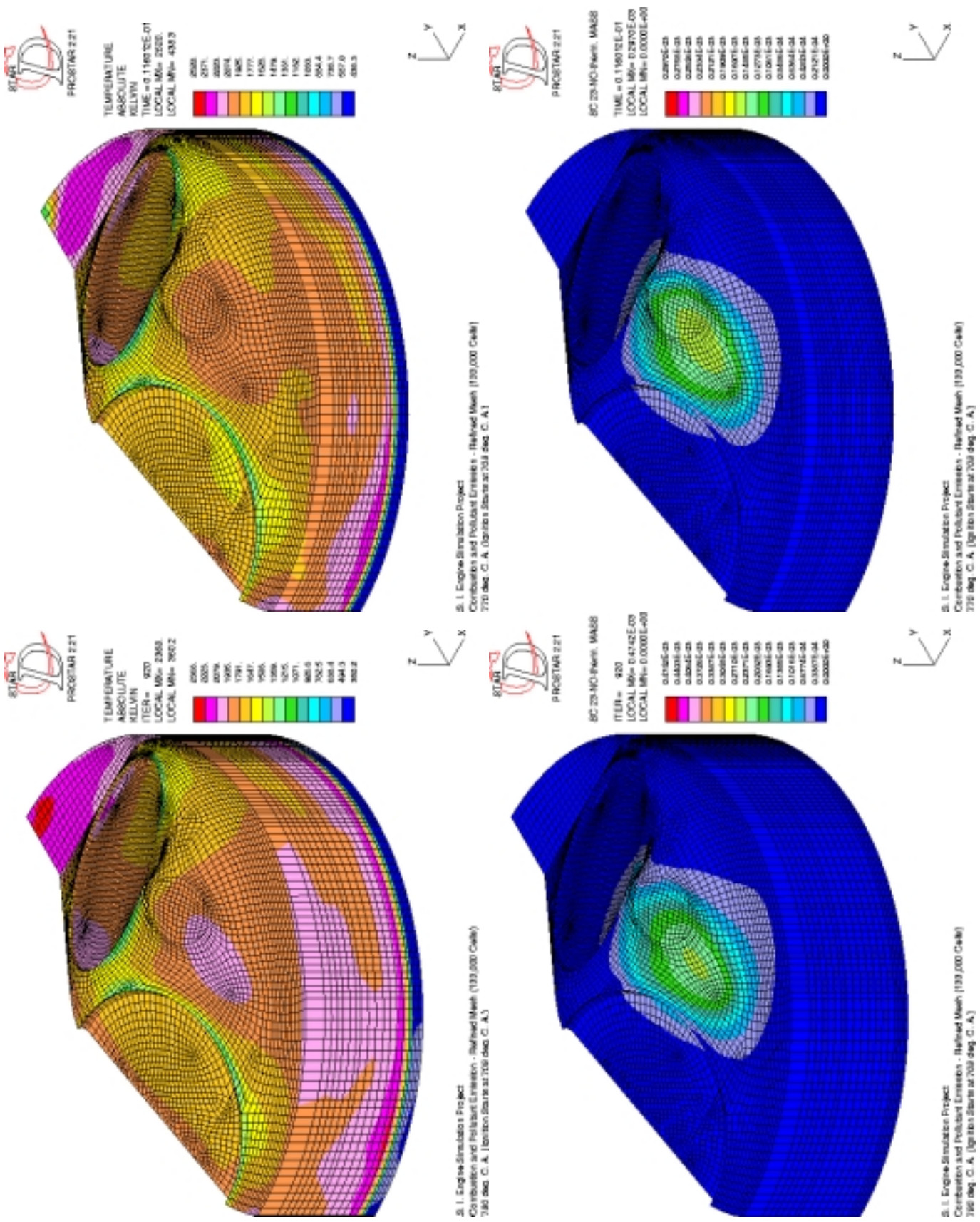

Abbildung 7.70: Temperatur und NO-Massenbruch im Brennraum des Ottomotors M112-3V/DZ (VHT) bei 770 ° und 780 °KW, berechnet mit dem verfeinerten Netz.

7.2 Berechnungen für den Quadratischen Forschungsmotor

7.2.1 Versuchsträger

Der Quadratische Forschungsmotor der Daimler Benz AG ist ein Einzylinderaggregat, das für optische Meßverfahren im Brennraum besonders geeignet ist. Der Zylinderquerschnitt ist ein Quadrat, daher der Name dieses Motors. Die beiden Ventile (Einlaß- und Auslaßventil) sind symmetrisch angeordnet, die Zündkerze befindet sich im Zentrum des quadratischen Querschnitts ca. 2 mm unter der Ebene des Brennraumdachs. Der Motor weist eine rein geometrische Symmetriebene auf, in welcher zweidimensionale laseroptische Messungen durchgeführt wurden. Durch die unterschiedlichen Funktionen der beiden Ventile (Einlaßventil, bzw. Auslaßventil) ist die Strömung in dem Brennraum des Forschungsmotors nicht symmetrisch.

Die technischen Daten des Quadratischen Forschungsmotors sind [66] :

Zylinderquerschnitt:	L x B = 75 mm x 75 mm
Hub:	H = 67 mm
Pleuellänge:	l =112 mm
Hubvolumen:	$V_H = 581$ cm^3
Verdichtungsverhältnis	$\epsilon = 10$
Durchmesser Einlaßventil:	$D_E = 33,8$ mm
Ventilsteuerzeiten Einlaßventil:	$E\ddot{O} = 7,7\,^\circ$KW v. OT
	$ES = 32,3\,^\circ$KW v. UT
Ventilsteuerzeiten Auslaßventil:	$A\ddot{O} = 7,7\,^\circ$KW v. UT
	$AS = 32,3\,^\circ$KW n. OT
Kraftstoff:	Propan
Äquivalenzverhältnis	$\Phi = 0,77\ -\ 1,11$
Drehzahlbereich:	$n = 300\ -\ 2000$ min^{-1}
Last:	Luft: 25, 50, 100 l/min
Zündzeitpunkt:	ZZP = 320 - 360 °KW

Der Forschungsmotor wurde experimentell sehr detailliert untersucht [66]. Dabei wurde das Geschwindigkeitsfeld im Ventilvorhang mittels Laser-Doppler-Anemometrie an 6 Stellen am Umfang des Einlaßventils ermittelt, so daß die Eintrittsgeschwindigkeit des Frischgases an jedem Punkt auf der Oberfläche des Ventilvorhangs durch lineare Interpolation zwischen den Werten, die der Messung entsprechen, berechnet werden kann. Zur Untersuchung der Gemischbildung mittels Laser-induzierter Fluoreszenz wurden in einem Laserlichtschnitt (2-dimensional) entlang der Symmetrieebene des Motors die Konzentrationen mehrere Spezies (Ketone als Spezies zur Visualisierung des Kraftstoffmassenbruches, OH, O_2, NO) ermittelt. Dabei werden nur relative Werte der jeweiligen Konzentration ermittelt. Das räumliche Auflösungsvermögen vom 700 x 300 Pixel entspricht einer Auflösung von ca. 1 mm in xy-Richtung, die zeitliche Auflösung liegt bei 20 ns $\ll 1\,^\circ$KW) [66].

7.2.2 Berechnung des Ladungswechsels

Die Berechnung der Strömung und der 3-dimensionalen Flammenausbreitung beim Quadratischen Forschungsmotor und die Validierung dieser Berechnungen anhand von Meßergebnissen wurden erstmals in der Arbeit von B. Heel [53] durchgeführt. Diese befaßt sich jedoch nicht mit der Berechnung der Schadstoffbildung, welche Ziel und Schwerpunkt der im folgenden aufgeführten Berechnungen ist. Anhand der vorliegenden Meßdaten soll die Bewertung der Ergebnisse des Flamelet-Verbrennungsmodells hinsichtlich der NO-Bildung erfolgen.

Der gewählte Betriebspunkt für die 3D-Simulation ist:

- Drehzahl $n = 1000$ min^{-1},
- Last $L = 50$ l/min,
- Äquivalenzverhältnis $\Phi = 1$,
- Zündzeitpunkt $ZZP = 340\,°\text{KW} = 20\,°\text{KW}$ v. ZOT.

Als Variation des Betriebspunktes wurden die Zündzeitpunkte $ZZP = 330\,°\text{KW}$ und $ZZP = 320\,°$ bei unveränderten Werten der restlichen Parameter berechnet.

Das Rechennetz für den Quadratischen Forschungsmotor besteht aus ca. 42000 Zellen, welche ausschließlich den Brennraum abbilden (nicht auch Einlaß- und Auslaßkanal). Das Auslaßventil ist nicht modelliert (d. h. die Berechnung des Ausstritts der Gase aus dem Brennraum ist mit diesem Netz nicht möglich). Die Elemente des Rechennetzes (Knoten, Zellen) befolgen eine einfache Netzbewegung ohne Topologiewechsel. Das bedeutet zwar eine relativ geringe Auflösung der Strömung entlang der Bewegungsrichtung des Kolbens im unteren Totpunkt, jedoch eine gute Auflösung der Strömung im oberen Totpunkt. Die Auflösung entlang der beiden anderen Richtungen bleibt konstant.

Als Randbedingungen sind die Geschwindigkeit (Interpolation zwischen Ergebnissen der LDA-Messungen), die Temperatur in dem Ventilvorhang und die Temperatur der Brennraumwand ($T_{wall} = 328$ K) vorgegeben. Als Korrelation für den Wandwärmeübergangskoeffizienten wird die Korrelation von Woschni (Gl. 2.40) angewendet.

Der Quadratische Forschungsmotor weist konstruktionsbedingt Leckage auf. Eine nicht vernachlässigbare Masse des Gasgemisches verläßt den Brennraum während der Kompression und der Verbrennung. Zur Berechnung des Leckageflußes wurde (Gl. 2.50) angewendet (s. § 1.5).

Um den Einfluß der zyklischen Schwankungen auf die Verbrennung zu reduzieren, deren Ursache u. a. die Verteilung des Restgases im Brennraum (bedingt durch die innere Abgasrückführung) ist, wurde während des Prüfstandsbetriebs nicht jeder Zyklus, sondern nur etwa jeder 15. Zyklus gefeuert, so daß davon ausgegangen werden kannn, daß sich im Brennraum ein homogenes, stöchiometrisches Gemisch befindet.

In Abb. 7.71 bis Abb. 7.72 ist der turbulente Mischungsprozeß der einströmenden Gasgemisches mit dem im Brennraum sich befindenden Gasgemisch dargestellt.

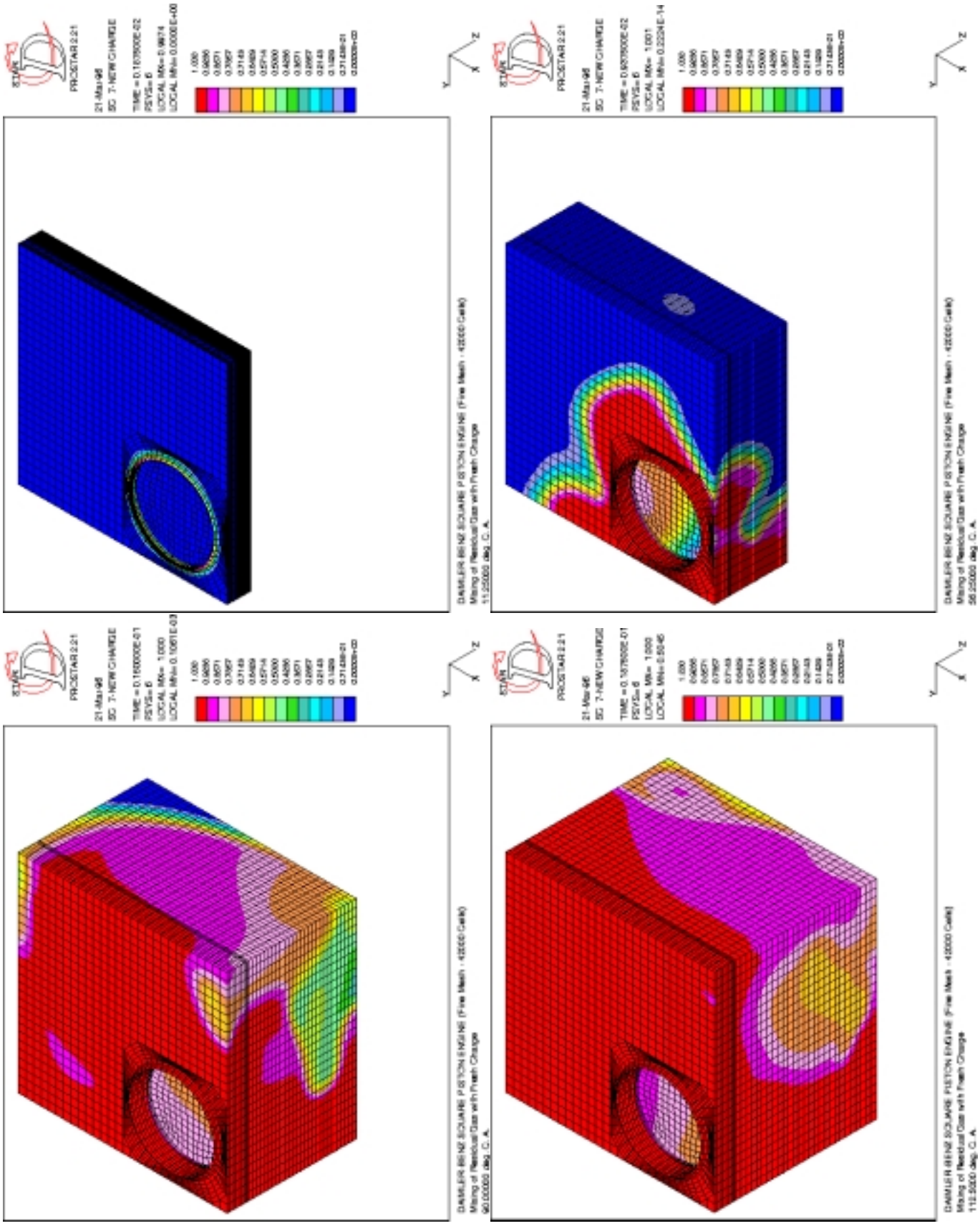

Abbildung 7.71: Turbulenter Mischungsprozeß von Frischgas und Restgas im Quadratischen Forschungsmotor. Dargestellt ist der Frischgasmassenbruch bei 11 °, 56 °, 90 ° und 112 °KW.

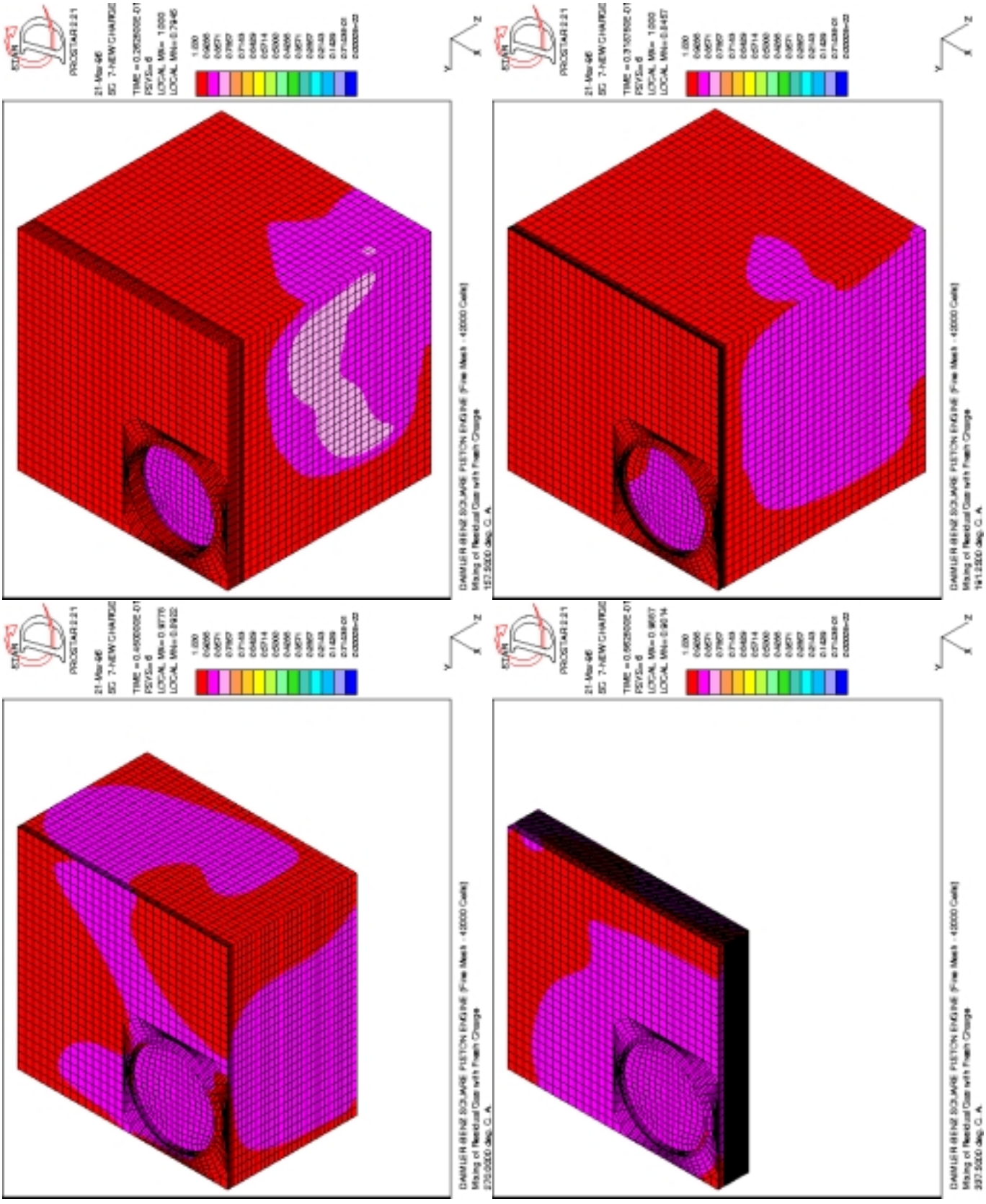

Abbildung 7.72: Turbulenter Mischungsprozeß von Frischgas und Restgas im Quadratischen Forschungsmotor. Dargestellt ist der Frischgasmassenbruch bei 157 °, 191 °, 270 ° und 337 °KW.

7.2.3 Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung

Zum Zündzeitpunkt ($ZZP = 340\,°\text{KW}$) weist die Geschwindigkeit in der unmittelbaren Nähe der Zündkerze, die sich auf der senkrechten Symmetrieachse des Quaders befindet, einen relativ kleinen Wert auf ($|\vec{v}_Z| < 1$ m/s) auf. Damit spielt die Konvektion des Flammenkerns keine nennenswerte Rolle. Die turbulente kinetische Energie weist ein schwach ausgeprägtes Maximum in der rechten Brennraumhälfte aus (s. Abb. 7.73). Somit breitet sich die Flammenfront annähernd kugelförmig in dem zur Verfügung stehendenen Raum aus. Die turbulente Flammengeschwindigkeit ist etwas größer in der rechten Brennraumhälfte, und die Flammenfront erreicht die rechte Brennraumwand zuerst.

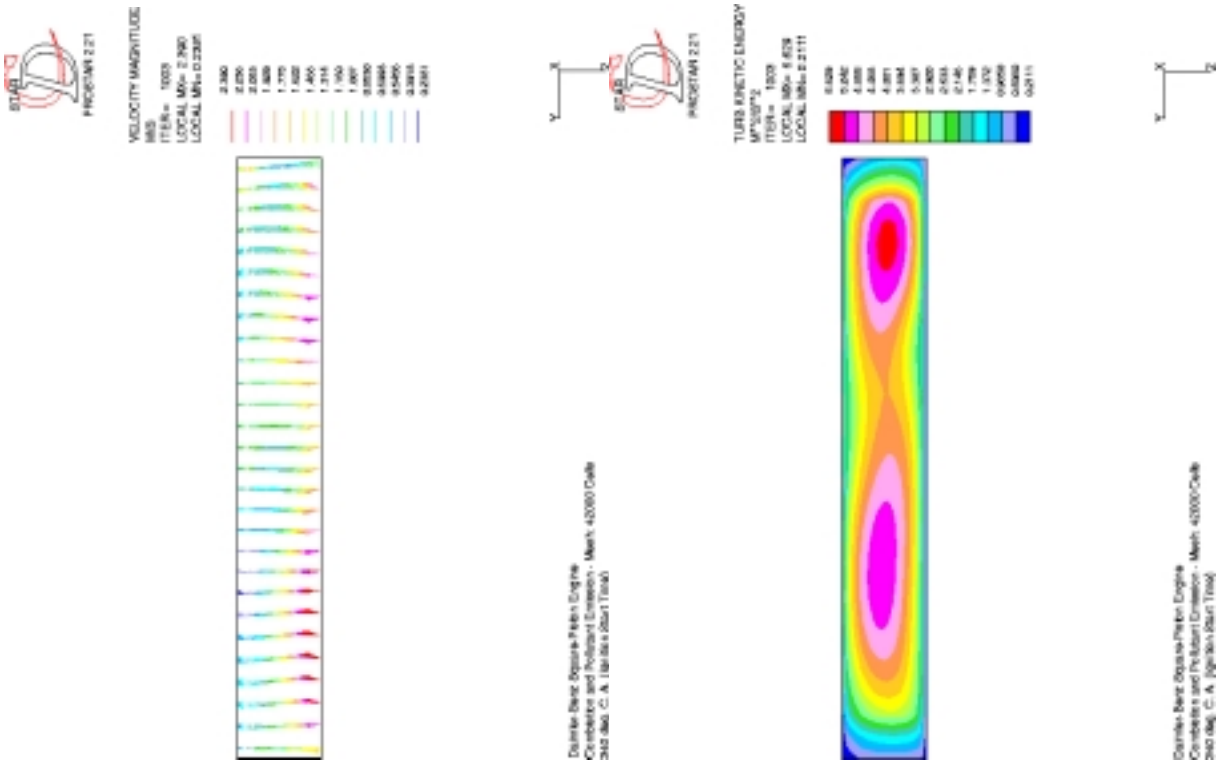

Abbildung 7.73: Geschwindigkeitsfeld und Feld der turbulenten kinetische Energie beim Quadratischen Forschungsmotors zum Zündzeitpunkt (340 °KW) in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze (in der geom. Symmetrieebene).

In Abb. 7.74 bis Abb. 7.76 sind jeweils Temperatur und NO-Mssenbruch für verschiedene Kurbelwinkelstellungen zu sehen. Darauffolgend, in Abb. 7.77 bis Abb. 7.84 sind als Schnittflächen in der senkrechten Symmetrieebene des Motors jeweils Temperatur, der Massenbruch des atomaren Sauerstoffs O und die Massenbrüche des Stickoxids NO und des Kohlenmonoxids CO dargestellt.

Der Netzabhängigkeitsparameter A_{Netz} wurde in der gleichen Weise bestimmt wie im Fall des M112-3V/DZ, indem dieser Parameter bis zur bestmöglichen Übereinstimmung des berechneten Wertes des Spitzendrucks mit dem experimentellen Wert im Referenzfall ($ZZP = 340\,°\text{KW}$) variiert wurde. Der gefundene Wert ist $A_{Netz} = 1{,}65$. Der Vergleich von gemessenem und berechnetem Druckverlauf ist in Abb. 7.85 zu sehen.

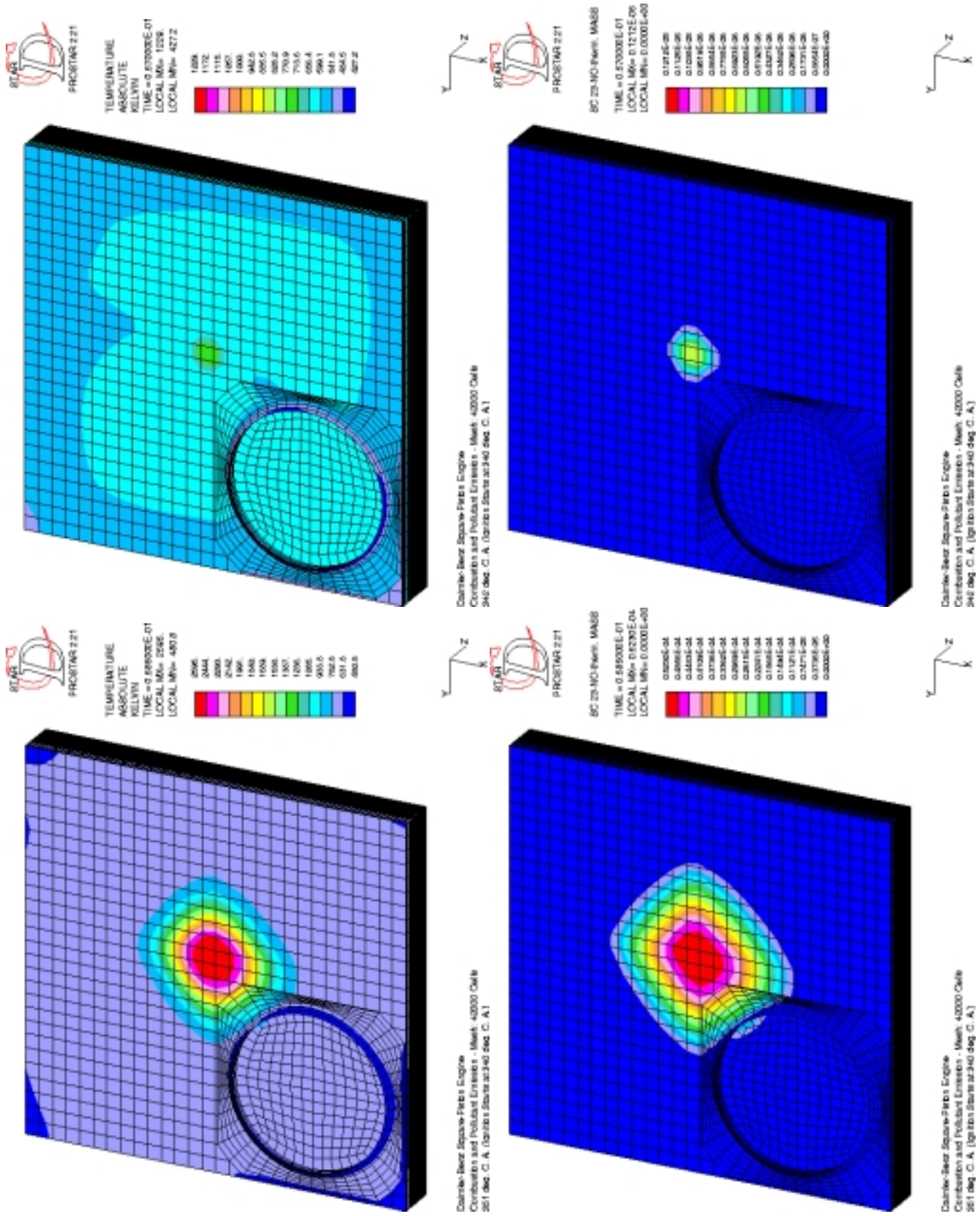

Abbildung 7.74: Bildung des thermischen Stickoxids: Temperatur und NO-Massenbruch bei 342 ° und 351 °KW.

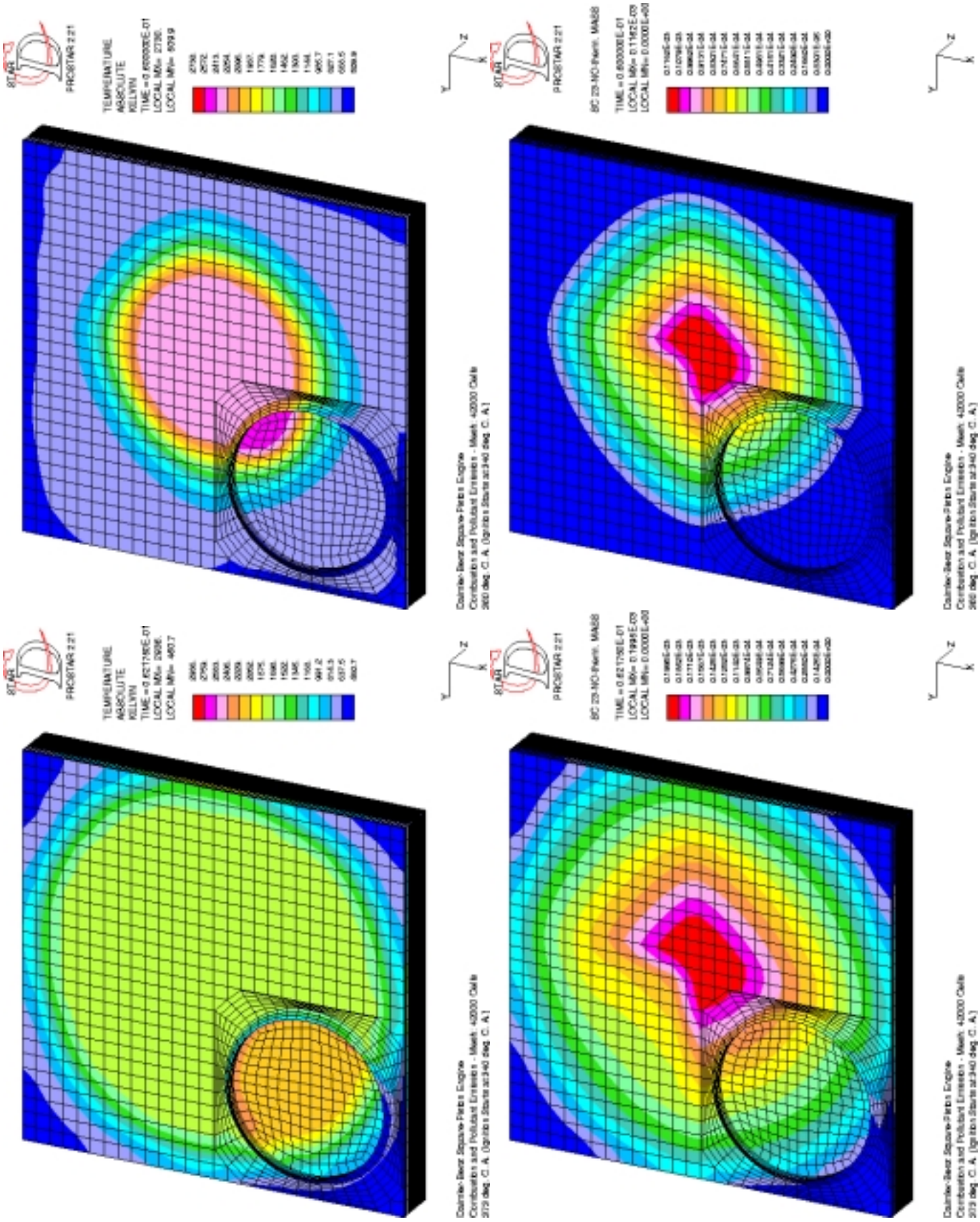

Abbildung 7.75: Bildung des thermischen Stickoxids: Temperatur und NO-Massenbruch bei 360 ° und 373 °KW.

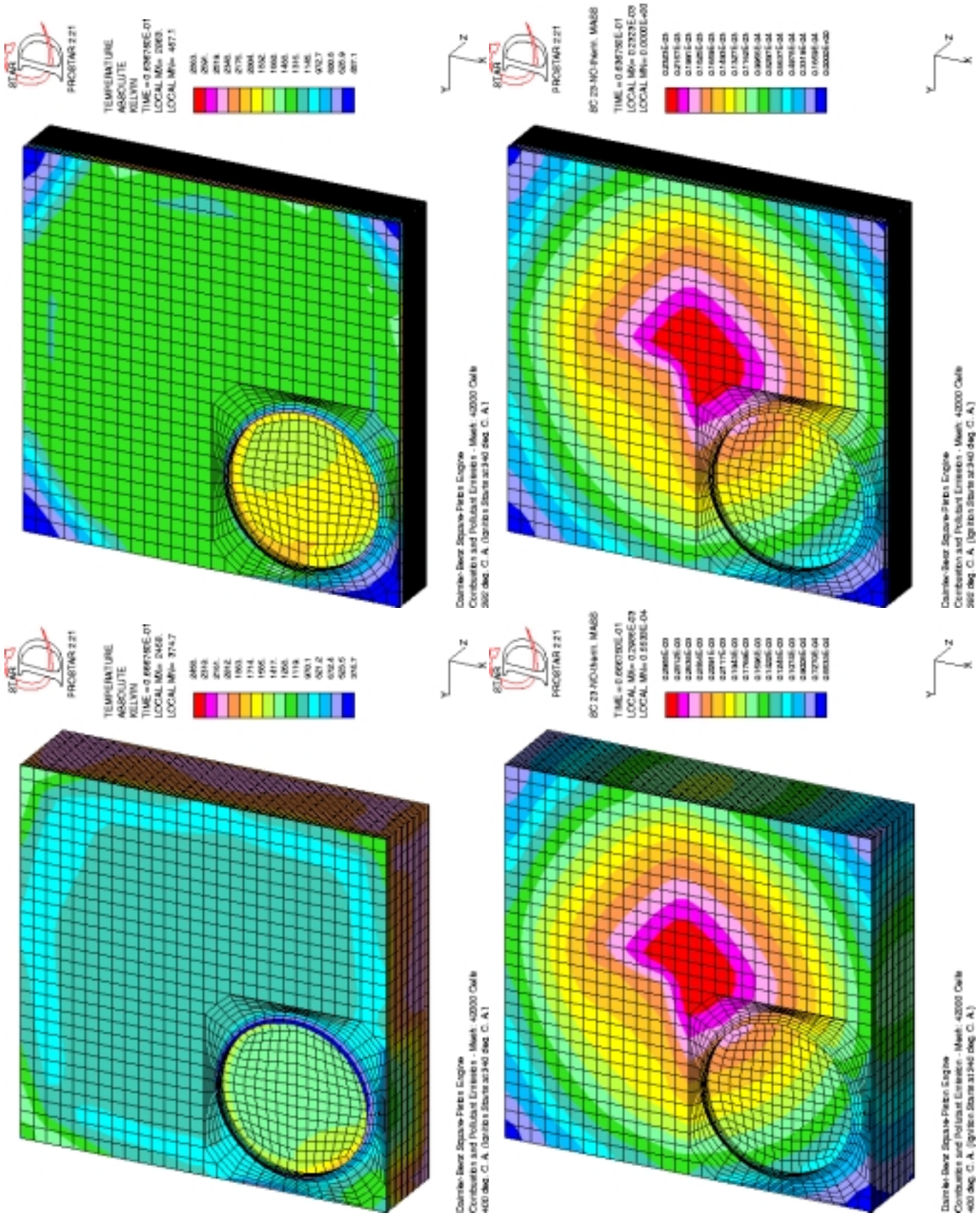

Abbildung 7.76: Bildung des thermischen Stickoxids: NO-Massenbruch bei 382 ° und 400 °KW.

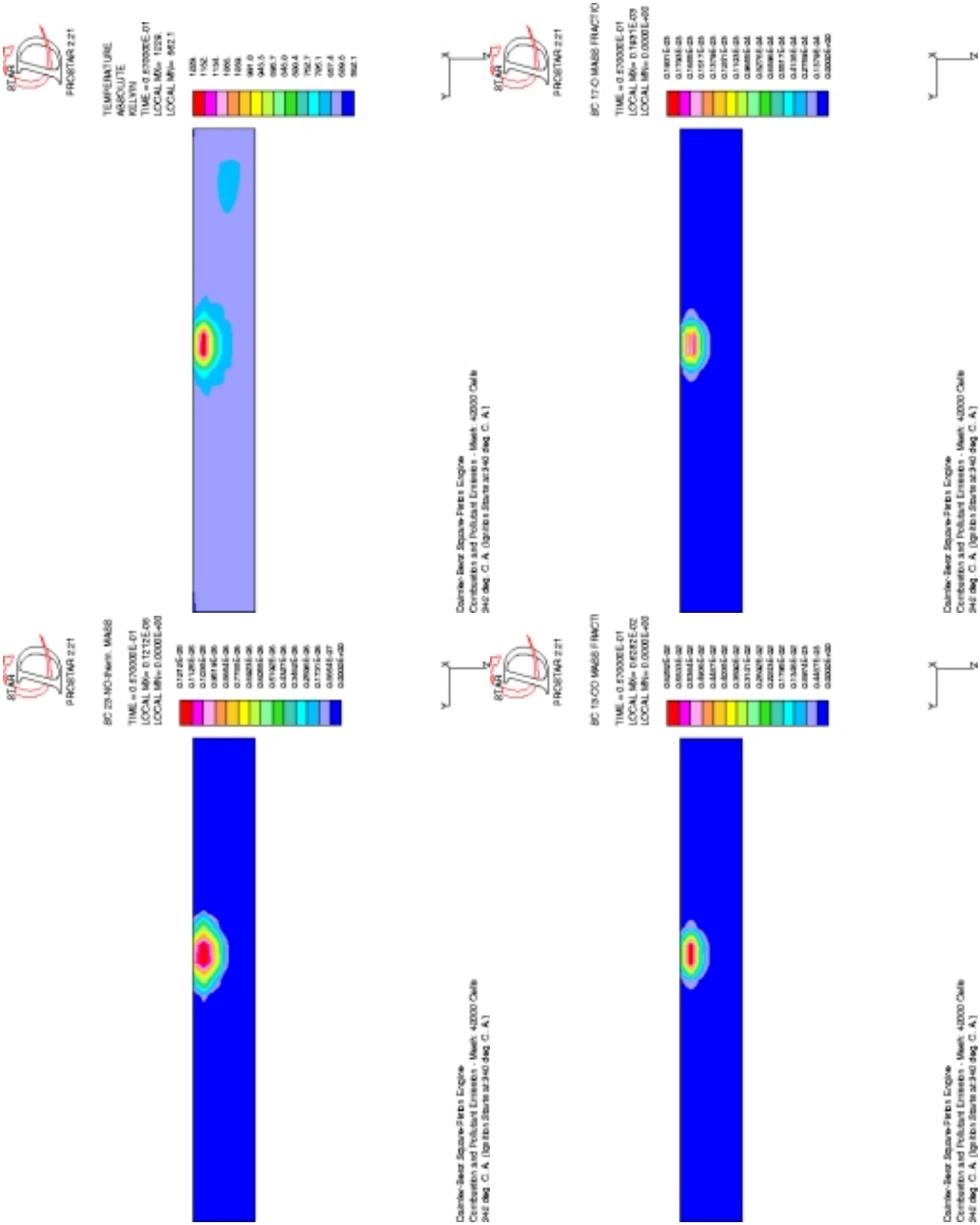

Abbildung 7.77: Bildung des thermischen Stickoxids und des Kohlenmonoxids bei 342 °KW: Temperaturfeld und Massenbrüche der Spezies O, NO, CO in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze.

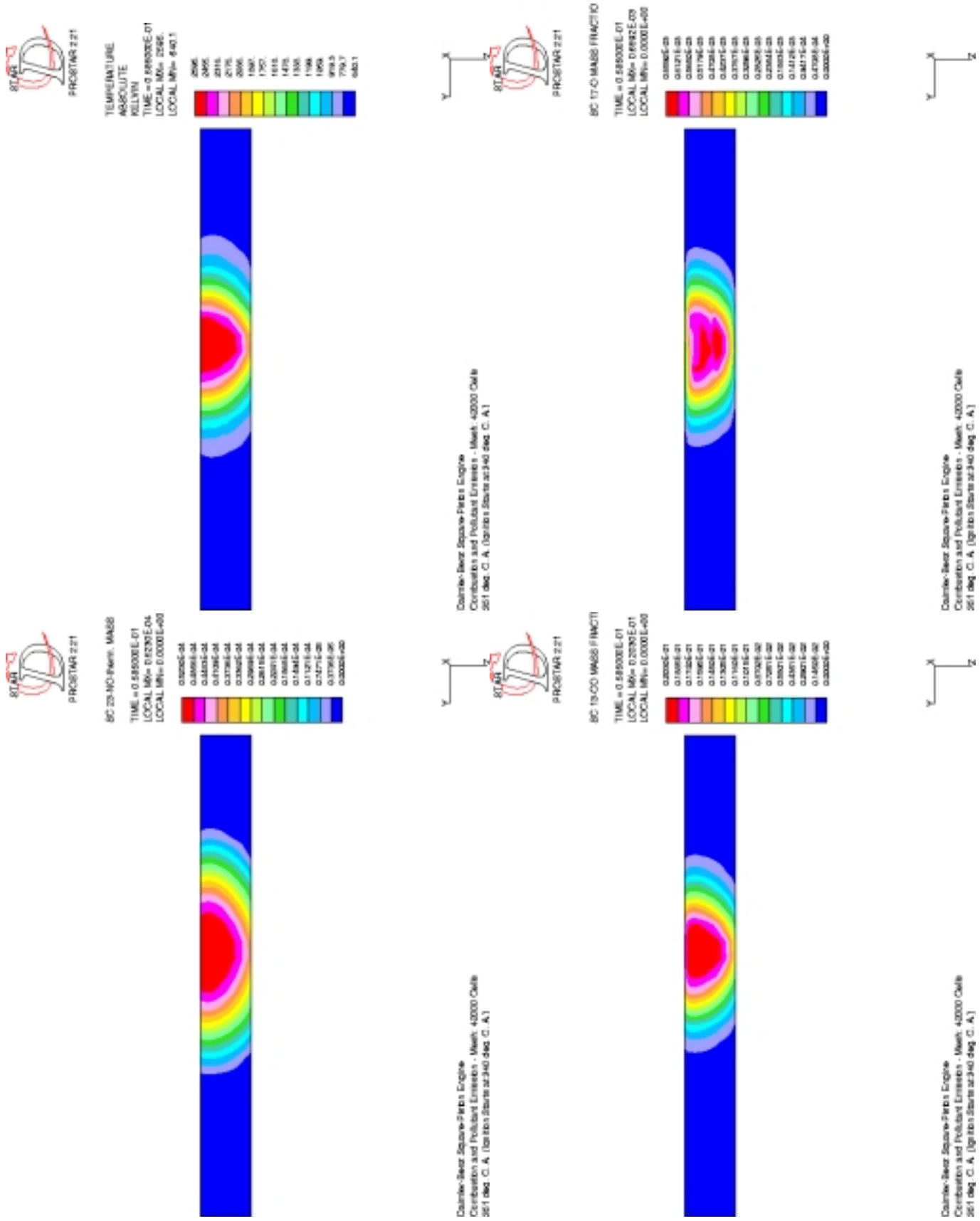

Abbildung 7.78: Bildung des thermischen Stickoxids und des Kohlenmonoxids bei 351 °KW: Temperaturfeld und Massenbrüche der Spezies O, NO, CO in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze.

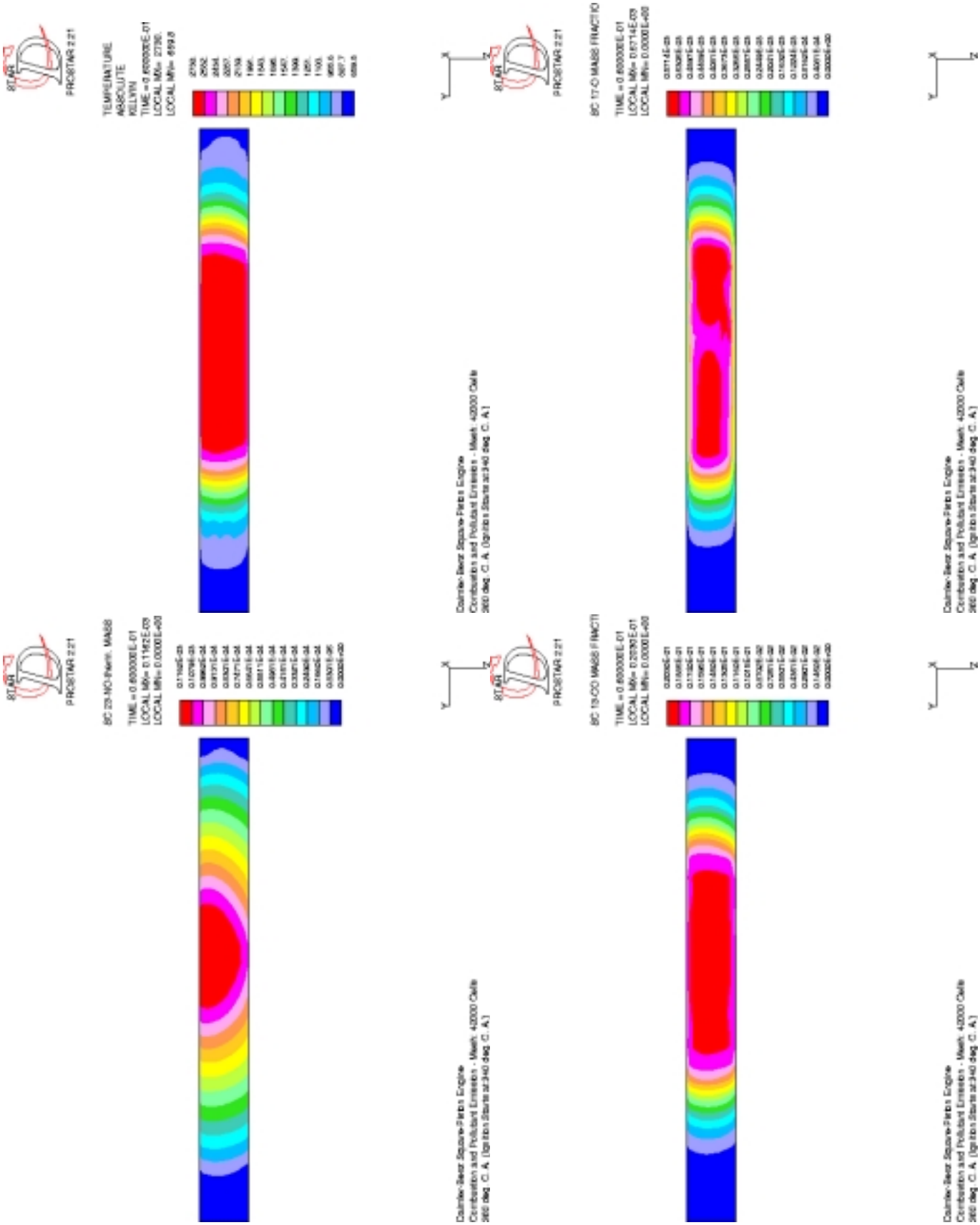

Abbildung 7.79: Bildung des thermischen Stickoxids und des Kohlenmonoxids bei 360 °KW: Temperaturfeld und Massenbrüche der Spezies O, NO, CO in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze.

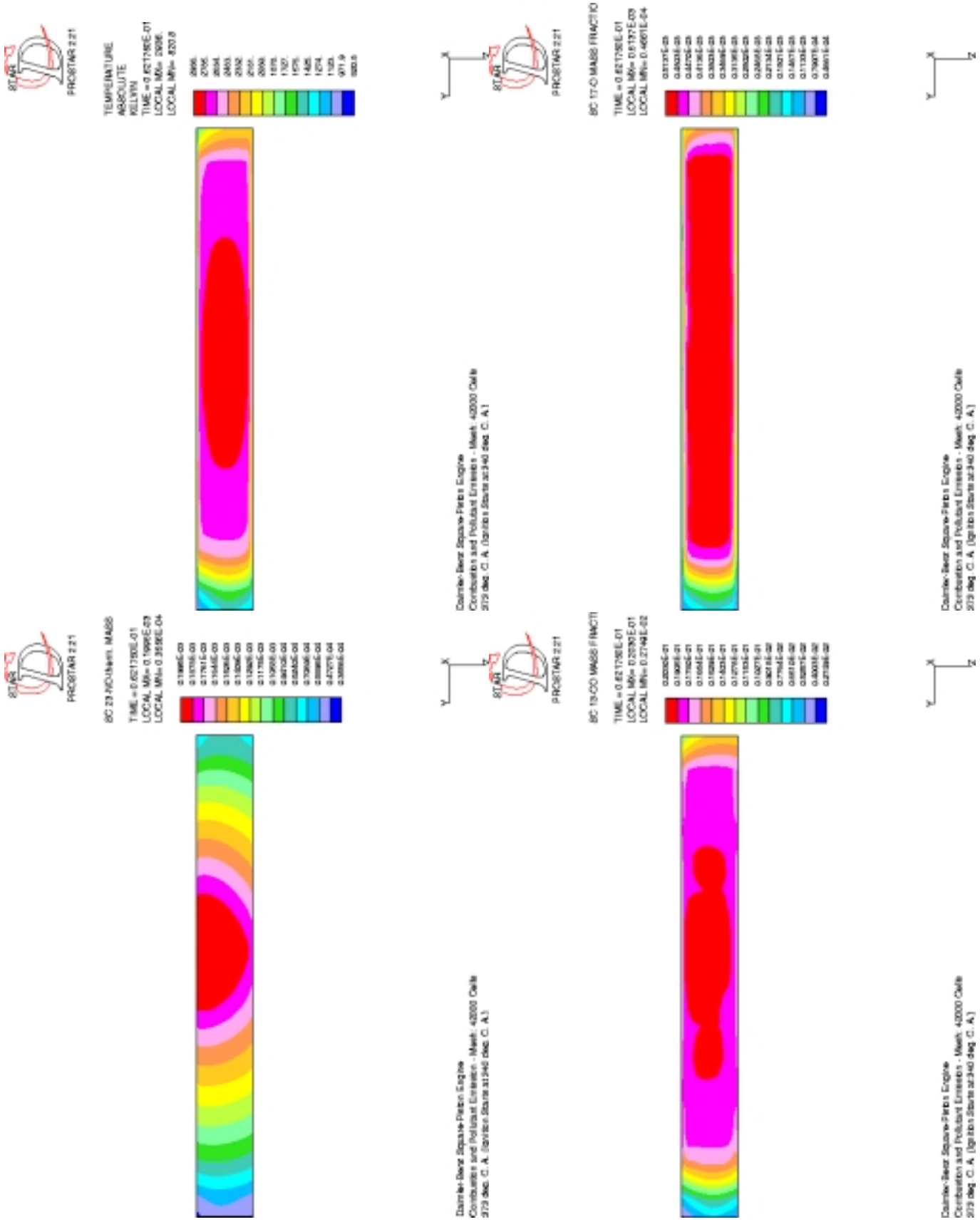

Abbildung 7.80: Bildung des thermischen Stickoxids und des Kohlenmonoxids bei 373 °KW: Temperaturfeld und Massenbrüche der Spezies O, NO, CO in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze.

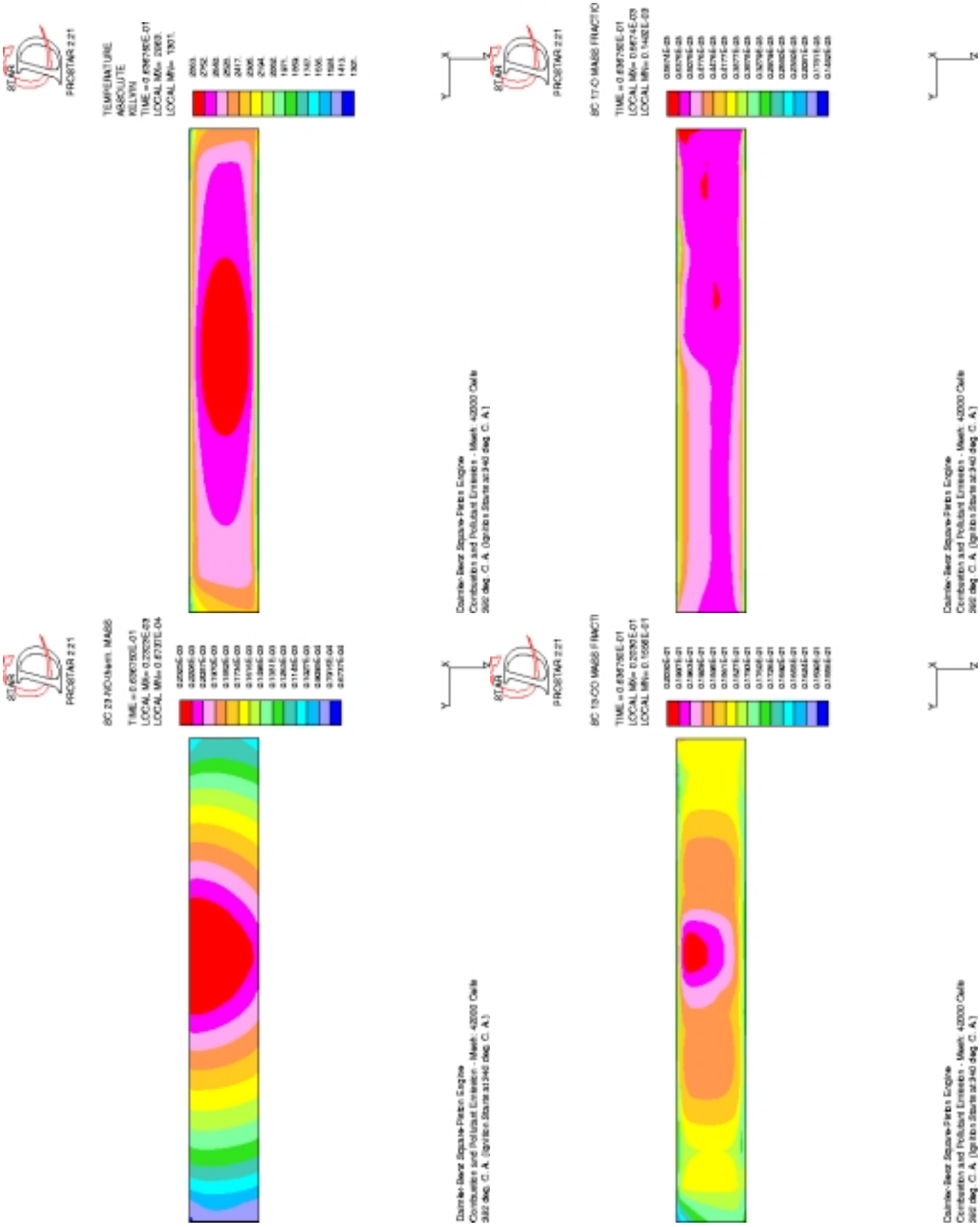

Abbildung 7.81: Bildung des thermischen Stickoxids und des Kohlenmonoxids bei 382 °KW: Temperaturfeld und Massenbrüche der Spezies O, NO, CO in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze.

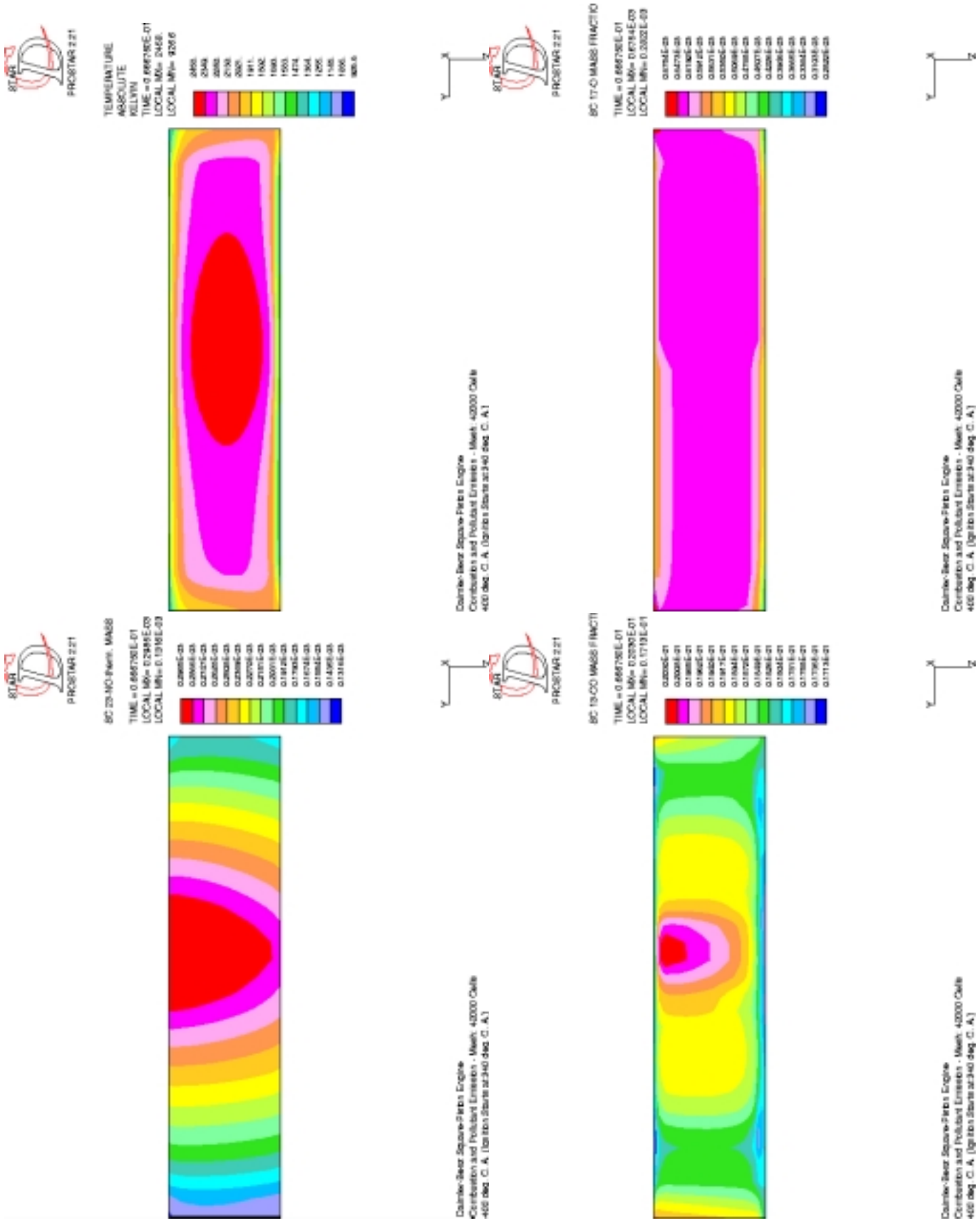

Abbildung 7.82: Bildung des thermischen Stickoxids und des Kohlenmonoxids bei 400 °KW: Temperaturfeld und Massenbrüche der Spezies O, NO, CO in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze.

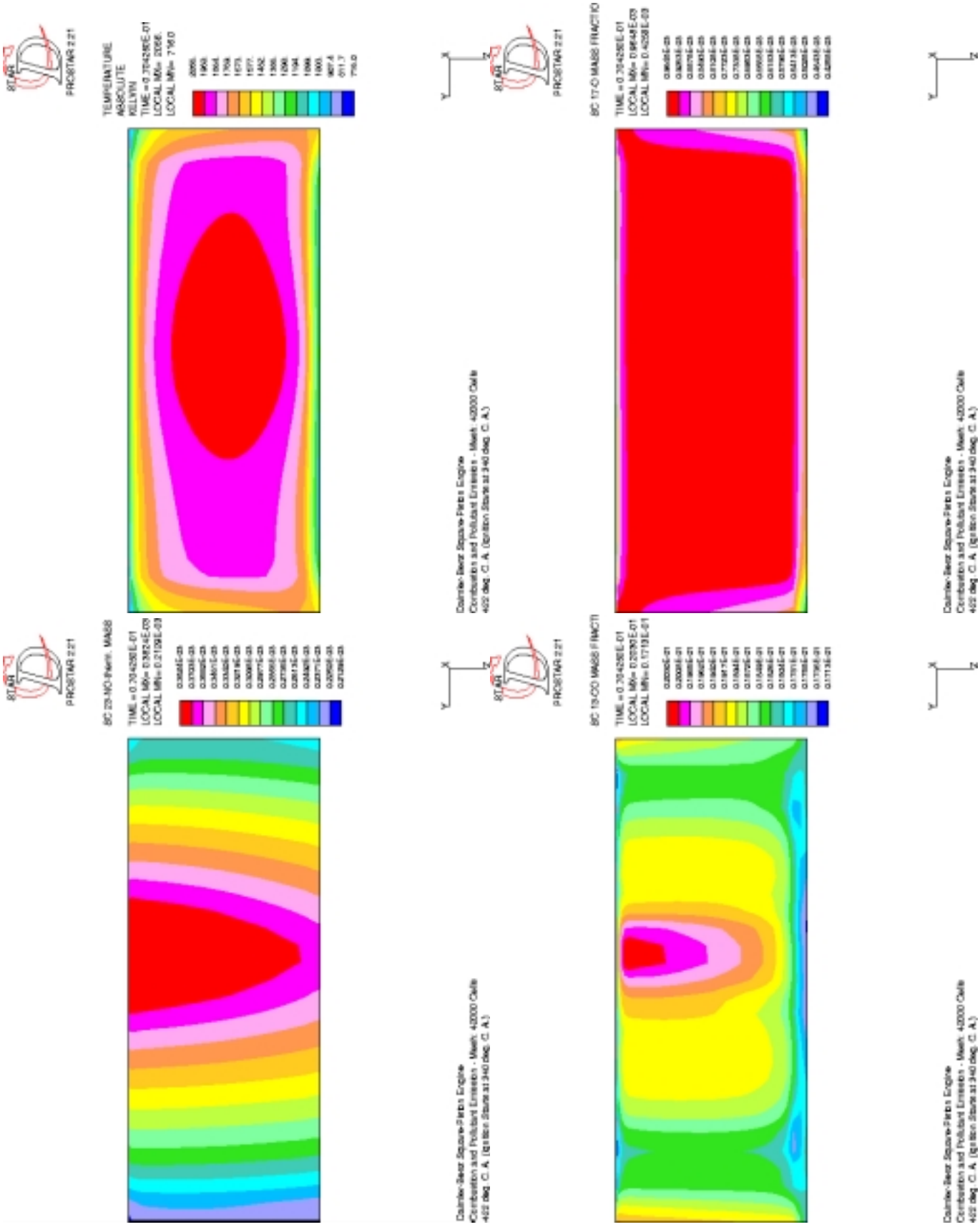

Abbildung 7.83: Bildung des thermischen Stickoxids und des Kohlenmonoxids bei 422 °KW: Temperaturfeld und Massenbrüche der Spezies O, NO, CO in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze.

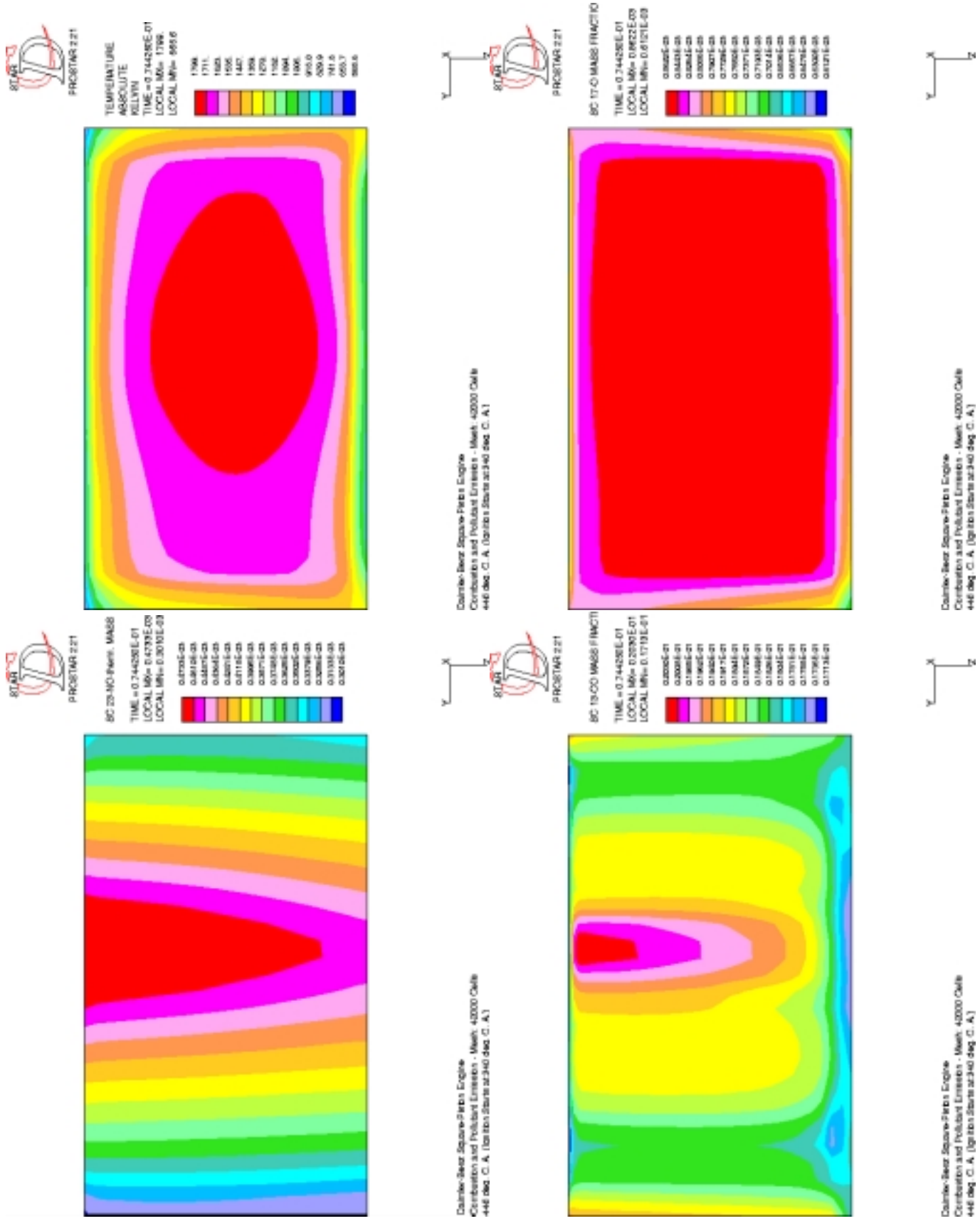

Abbildung 7.84: Bildung des thermischen Stickoxids und des Kohlenmonoxids bei 446 °KW: Temperaturfeld und Massenbrüche der Spezies O, NO, CO in einem senkrechten Schnitt durch die Zündkerze.

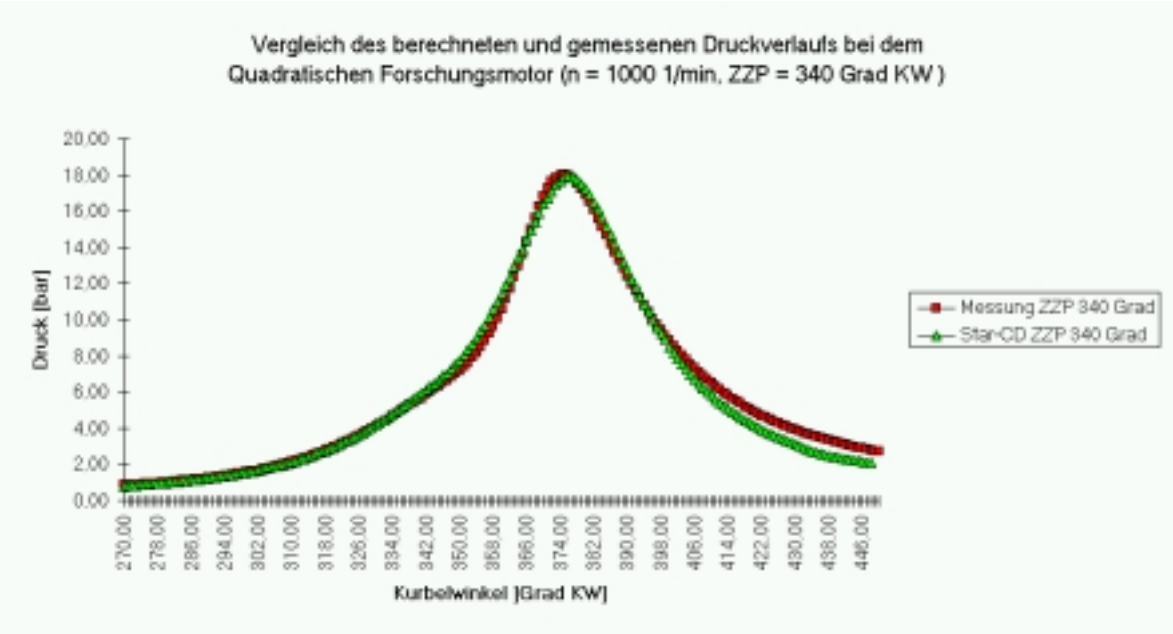

Abbildung 7.85: Vergleich zwischen gemessenem und berechnetem Druckverlauf für den Referenzfall ($ZZP = 340\,°\text{KW}$) bei bester Übereinstimmung - $A_{Netz} = 1,65$).

Mit diesem Wert des Netzabhängigkeitsparameters wurden auch die Verbrennung und die NO-Bildung für die Zündzeitpunkte $ZZP = 330\,°\text{KW}$ und $ZZP = 320\,°\text{KW}$ berechnet. Der Vergleich der berechneten Druckverläufe mit den Meßergebnissen ist in Abb. 7.86 und in Abb. 7.87 zu sehen. Während bei dem Betriebspunkt $ZZP = 330\,°\text{KW}$ die Übereinstimmung von Messung und Rechnung relativ gut ist, ist Abweichung zwischen Messung und Rechnung bei dem Betriebspunkt $ZZP = 320\,°\text{KW}$ schon relativ groß. Die Abweichung im Spitzenwert des Drucks beträgt für diesen Fall ca. 3,6 bar; dies bedeutet einen relativen Fehler von ca. 14,7%.

Der zeitliche Verlauf der Bildung des thermischen Stickoxids ist in Abb. 7.88 dargestellt. Diese Ergebnisse entsprechen einer Verbrennung eines homogenen stöchiometrischen Propan/Luft-Gemisches. Zwecks Minimierung des Einflußes der zyklischen Schwankungen (Ausschluß der inneren Abgasrückführung) wurde nur jeder 15. Zyklus gefeuert.

Beim Vergleich der Rechenergebnisse mit den Messergebnissen wurde jedoch festgestellt, daß sowohl bei der Messungen der globalen NO-Konzentration im Abgas als auch bei der qualitativen NO-Konzentrationmessung mit Hilfe der 2D-LIF-Diagnostik im Brennraum jeder Zyklus gefeuert wurde. Deshalb wurde eine weitere Berechnung der Strömung, der Verbrennung und NO-Bildung durchgeführt, wobei der Einfluß der inneren Abgasrückführung berücksichtigt wurde. Der Zündzeitpunkt ist $ZZP = 340\,°\text{KW}$. Der Netzabhängigkeitsparameter $A_{Netz} = 1,65$ ist bekannt. Geändert wurde der Anfangszustand der Gase im Brennraum (die Gaszusammensetzung entspricht der Zusammensetzung des vollständig verbrannten stöchiometrischen Propan/Luft-Gemisches, die Anfangstemperatur ist $T_{init} = 880\,\text{K}$). In Abb. 7.89 ist der Vergleich zwischen gemessenem und berechnetem Druckverlauf für diesen letzten Betriebspunkt zu sehen. Der Wert des Spitzendrucks ist um ca. ein Drittel niedriger als im Referenzfall. Die Übereinstimmung bezüglich des Werts des Spitzendrucks zw. Messung und Rechnung ist sehr gut.

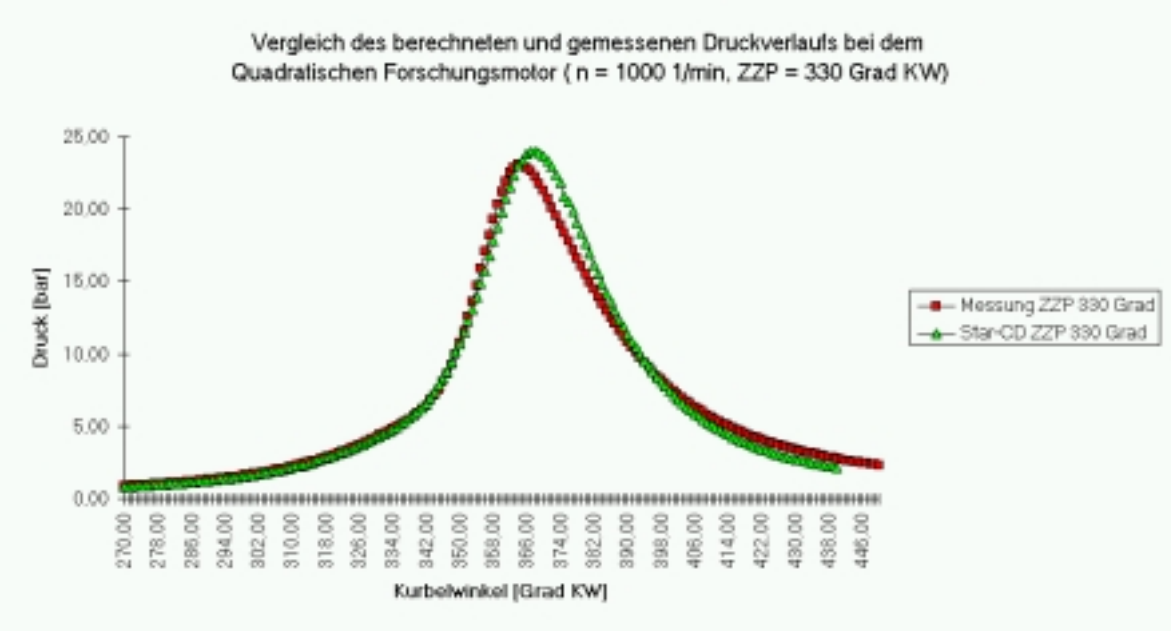

Abbildung 7.86: Vergleich zwischen gemessenem und berechnetem Druckverlauf für den Betriebspunkt $ZZP = 330\,°\mathrm{KW}$.

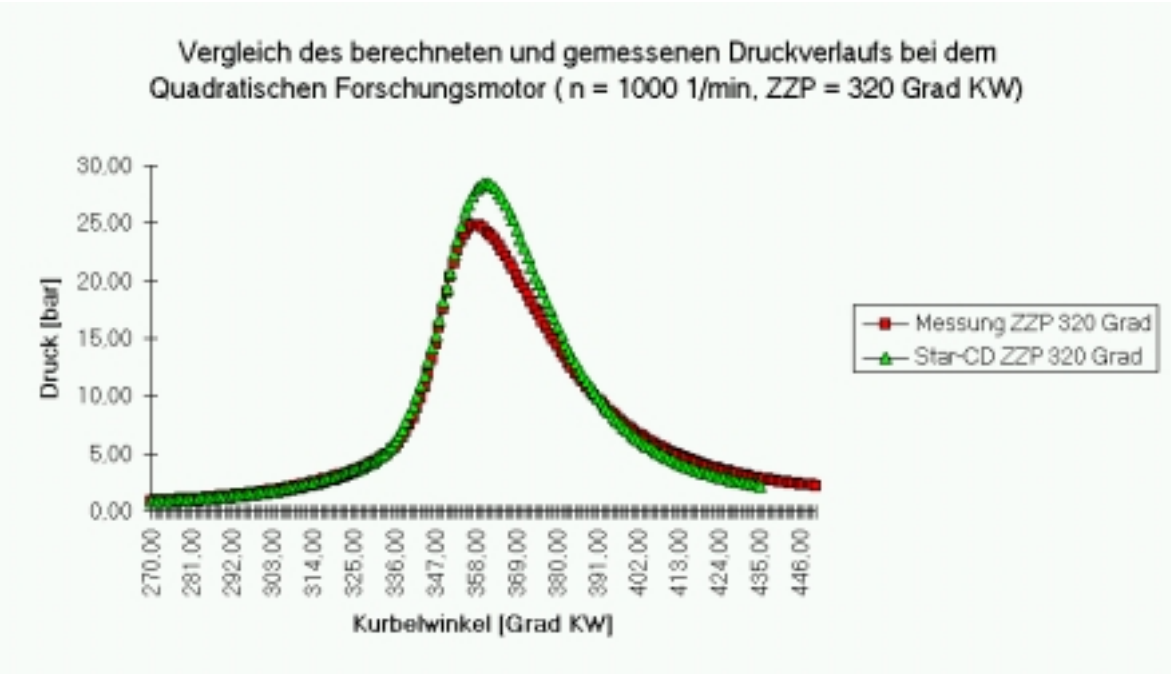

Abbildung 7.87: Vergleich zwischen gemessenem und berechnetem Druckverlauf für den Betriebspunkt $ZZP = 320\,°\mathrm{KW}$.

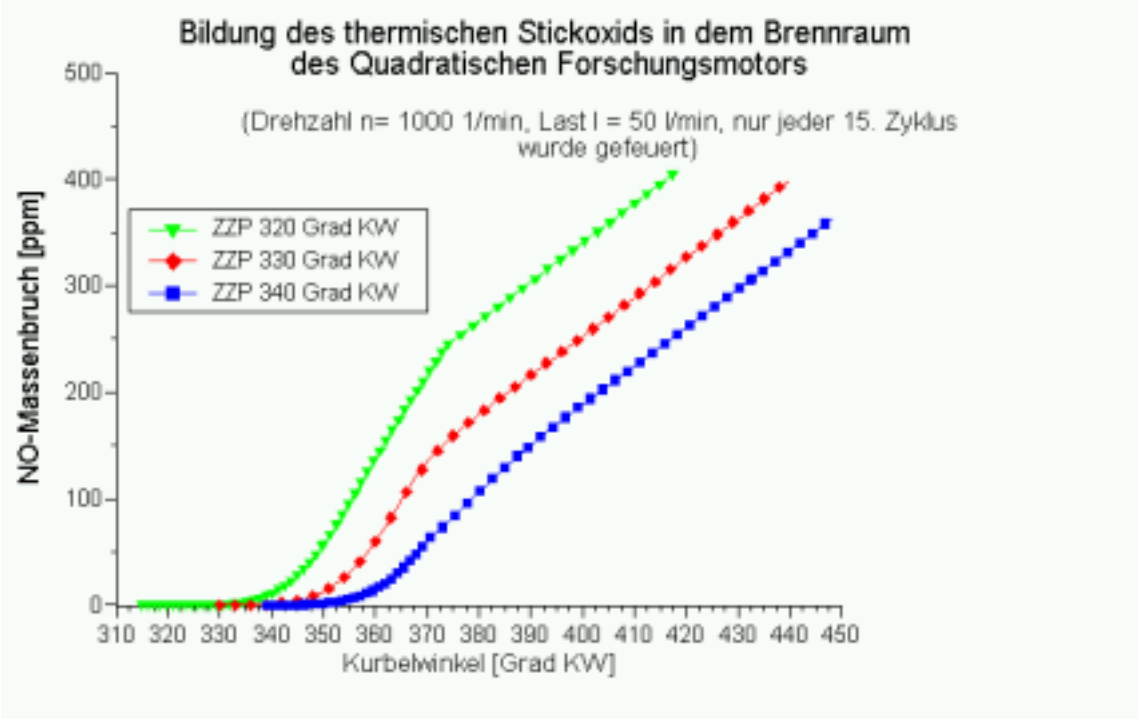

Abbildung 7.88: Bildung des thermischen Stickoxids im Brenraum des Quadratischen Forschungsmotors für die Zündzeitpunkte $ZZP = 320\,°$, $330\,°$ und $340\,°$KW, wobei nur jeder 15. Zyklus gefeuert wurde.

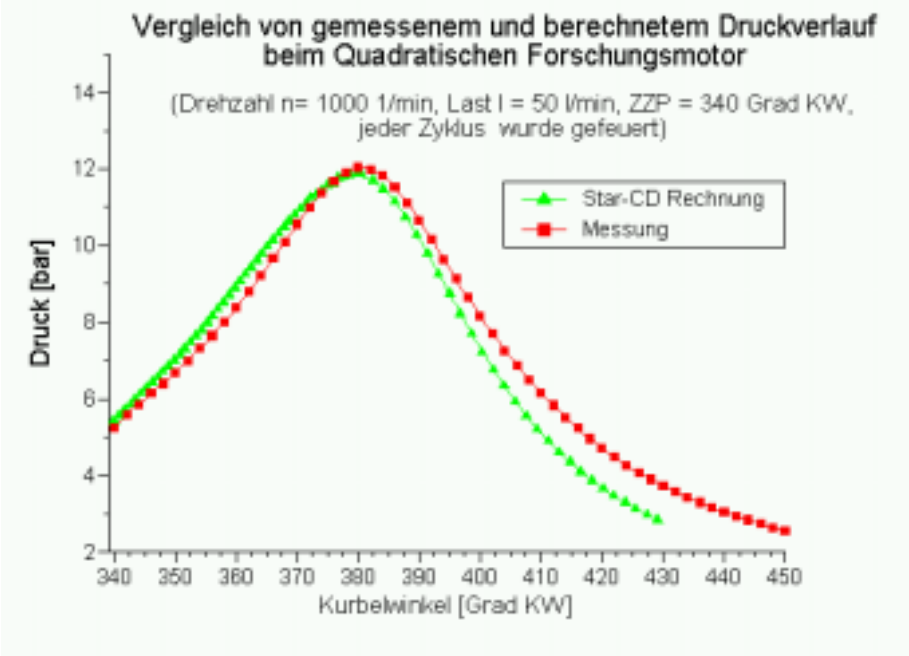

Abbildung 7.89: Vergleich zwischen gemessenem und berechnetem Druckverlauf für den Betriebspunkt $ZZP = 340\,°$KW, wobei jeder Zyklus gefeuert wurde.

Der berechnete zeitliche Verlauf der NO-Bildung in Brennraum ist in Abb. 7.90, zusammen mit dem gemessenen Wert des NO-Massenbruchs im Abgas, dargestellt. Die Rechnung liefert den Massenbruch des thermischen NO mit einem relativen Fehler von ca. 60%. Eine realistische Schätzung des Fehlers bei der quantitativen Berechnung des Stickoxids mit dem vorliegenden Modell für einen beliebigen Motor liefert nach Schätzung des Verfassers den Wert 100% bis 120%. Die Erhöhung der Genauigkeit kann einerseits durch die Wahl eines genauer bestimmten Satzes von Arrhenius-Parameter für den Zeldovich-Mechanismus und andererseits durch die Berücksichtigung der turbulenten Schwankungen der Temperatur erreicht werden. Dafür muß eine Transportgleichung für die Varianz der Temperatur gelöst werden und anschließend eine Mittelung des chemischen Quellterms über eine Gauß-pdf der Temperatur durchgeführt werden.

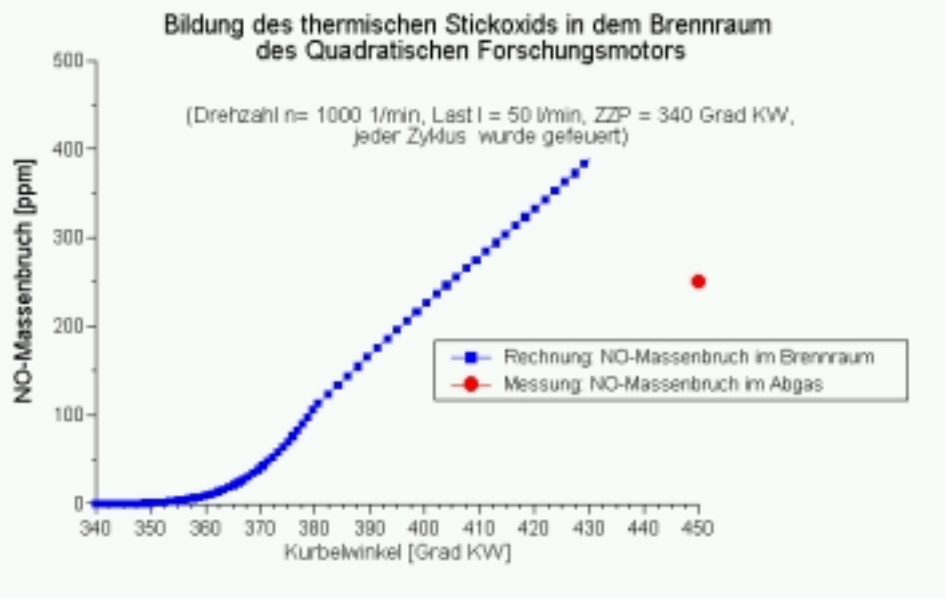

Abbildung 7.90: Bildung des thermischen Stickoxids im Brenraum des Quadratischen Forschungsmotors für den Zündzeitpunkt 340 °KW, wobei jeder Zyklus gefeuert wurde.

Qualitative Aussagen über den Ort der Entstehung und die Verteilung des Stickoxids im Brennraum sind jetzt schon möglich. Es kann eine direkte Gegenüberstellung der Ergebnisse von Rechnung und Messung bezüglich der NO-Verteilung im Brennraum erfolgen. In Abb. 7.91 sind die Ergebnisse der qualitativen NO-Konzentrationsmessungen mittels zweidimensionaler Laser-induzierter Fluoreszenz (Universität Heidelberg in Zusammenarbeit mit Daimler Benz) für vier Kurbelwinkelstellungen (349 °, 355 °, 358 ° und 361 °KW) dargestellt. Dabei wird eine nichtlineare Falschfarbendarstellung (mit Werten zwischen 0 und 255) angewendet. Anschließend sind die Ergebnisse der Star-CD-Rechnung zu sehen, wobei eine einheitliche, lineare Farbskalierung angewendet wird. Darin entspricht das Minimum dem Wert Null und das Maximum dem Wert 85 ppm (der berechnete Maximalwert des NO-Massenbruchs bei 361 °KW). Molenbruch und Massenbruch des Stickoxids sind wegen des annähernd gleichen Wertes der Molmasse des Stickoxiods ($M_{\mathrm{NO}} = 30$) und der mittleren Molmasse des verbrannten Gasgemisches ($\overline{M}_{Gas} = 29,42$) mit ausreichend guter Genauigkeit gleichzusetzen. Messung und Rechnung beziehen sich auf dieselbe senkrechte Schnittebene durch die Zündkerze, die auch in allen vorhergehenden Darstellungen verwendet wurde.

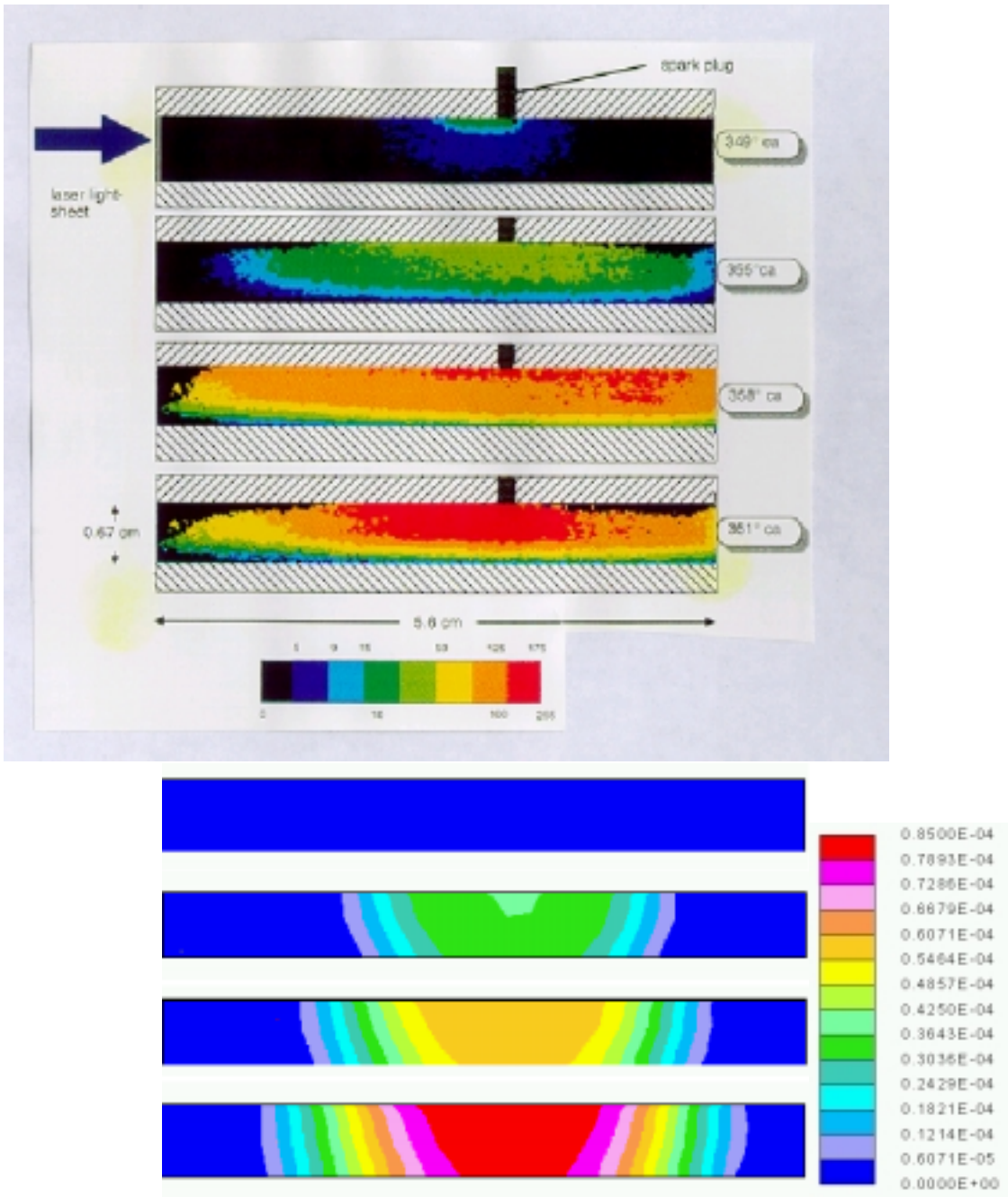

Abbildung 7.91: Ergebnisse aus Messungen mittels Laser-induzierter Fluoreszenz (oben) und Rechnung (unten) zur räumlichen Verteilung des NO-Massenbruchs. Die Bilder entsprechen den Kurbelwinkwelstellungen 349 °, 355 °, 358 ° und 361 °KW. Der Absolutwert des berechneten NO-Massenbruchs für jede der vier Kurbelwinkelstellungen ist in Abb. 7.92 zu sehen. Eine Konvertierung der Farbskalierung zwischen den beiden Falschfarbendarstellungen war leider nicht möglich.

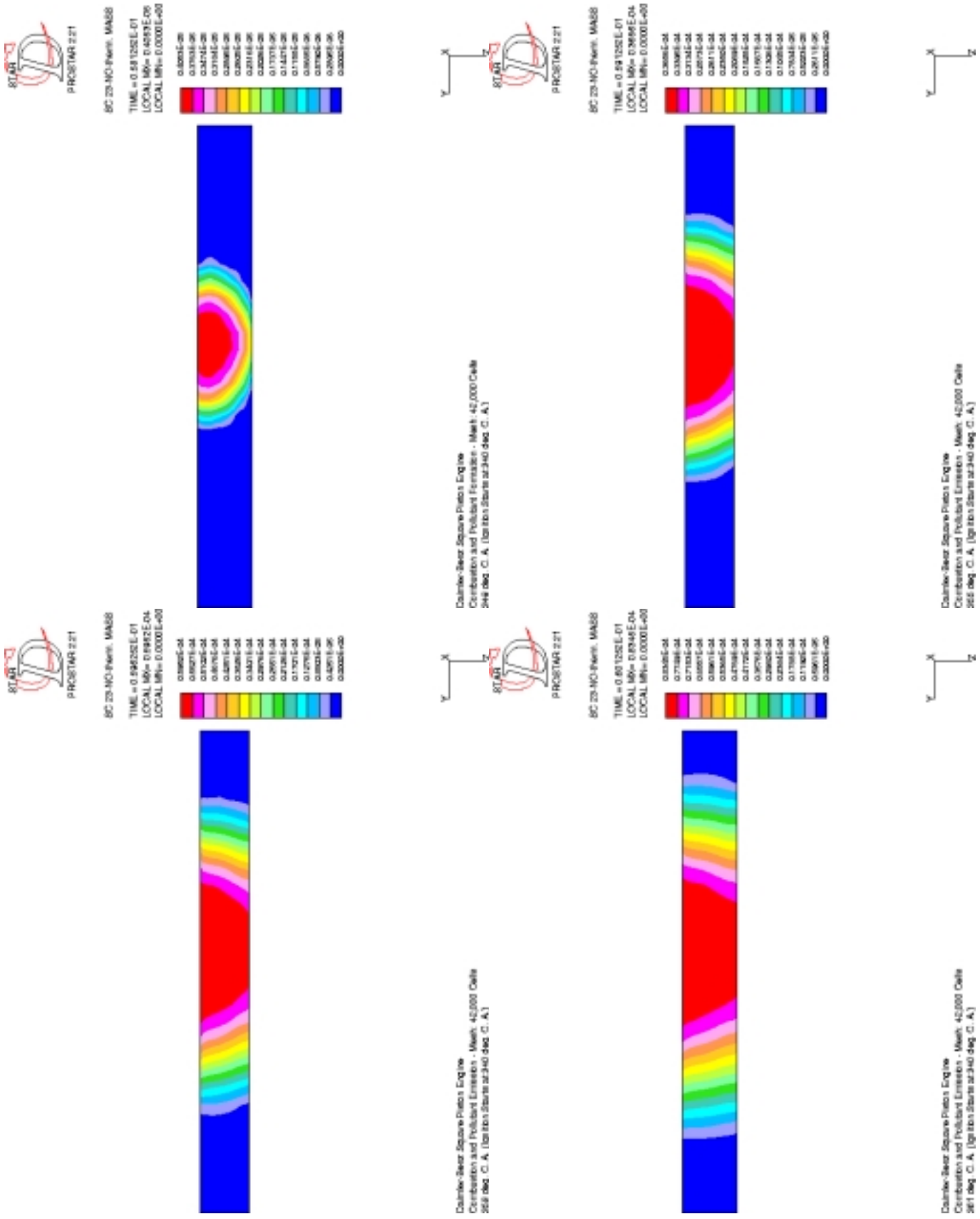

Abbildung 7.92: Absolutwerte des Massenbruchs des thermischen NO, entsprechend den vier Kurbelwinkelstellungen 349 °, 355 °, 358 ° und 361 °KW aus Abb. 7.91.

Kapitel 8

Ausblick

Die vorliegende Arbeit legt den aktuellen Stand, die Möglichkeiten und die Grenzen der mehrdimensionalen Simulation der ottomotorischen Verbrennung und Schadstoffbildung dar. Als Abschluß der Arbeit sollen die hiermit gewonnenen Erkenntnisse und Schlußfolgerungen noch einmal kurz zusammengefaßt und die Wege zu einer weiteren Verbesserung der Berechnungsergebnisse aufgezeigt werden. Dabei muß zwischen den beiden Schwerpunkten physikalisch-chemische Modellierung der Phänomene im Zylinder von Verbrennungsmotoren einerseits und den numerischen Aspekten der Lösung der Transportgleichungen der reaktiven Strömung andererseits unterschieden werden. Diese beiden Einflußfaktoren liefern trotz ihrer sehr unterschiedlichen Natur zur Zeit einen etwa gleich großen Beitrag zum Gesamtfehler der Simulation. Die Auswirkungen der beiden Fehlerquellen müssen gleichzeitig analysiert und in ihrer Wechselwirkung betrachtet werden.

Die Möglichkeiten zur Verbesserung der physikalisch-chemischen Modellierung liegen nach Ansicht des Verfassers in erster Linie in folgenden Ansatzpunkten:

- in der genaueren Berechnung der Turbulenz, z.B. durch Verwendung von Turbulenzmodellen höherer Ordnung, welche die Anisotropie der Turbulenzbewegung während des Ladungswechsels beschreiben können,
- in der Verwendung eines Zweigleichungs-Verbrennungsmodells mit Berücksichtigung von Effekten, welche die Flammenfront stabilisieren, um die modellbedingte Verbreiterung der Reaktionszone, wie sie in dem Eingleichungs-Verbrennungsmodell von H.Weller [50] stattfindet, zu vermeiden,
- in einer verbesserten Modellierung der Phänomene in der unmittelbaren Nähe einer festen Wand, wobei der Modellierung der turbulenten Flammenausbreitung in der Nähe der festen Wand eine besonders große Rolle bei der genauen Berechnung der Temperatur und der Massenbrüche der chemischen Spezies zukommt,
- in der Integration von Korrelationen und Gesetzmäßigkeiten für den turbulenten Wandwärmeübergang, die möglichst eine Funktion ausschließlich der primitiven Variablen des turbulenten Strömungsfeldes sein sollten und deren Gültigkeit auf der Ebene möglichst kleiner Flächenelemente der Zylinderwand überprüft ist,
- in der Verfolgung der relativ langsamen Reaktionskinetik des CO-CO_2-Mechanismus über die Hochtemperaturphase, in welcher die Annahme des chemischen Gleichgewichts

erfüllt ist, hinaus zur exakten Berechnung des Kohlenmonoxid-Massenbruchs während der Expansion und des Ausstoßes,

- in der Verwendung von möglichst präzise bestimmten Arrhenius-Parametern für den erweiterten Zeldovich-Mechanismus zur Bildung des thermischen Stickoxids mit Berücksichtigung der Rückreaktionen (z.B. die Arrhenius-Parameter nach Klaus [56], die voraussichtlich einen qualitativ unterschiedlichen zeitlichen Verlauf des NO-Massenbruchs mit sich bringen) und

- in der Berücksichtigung der Fluktuationen der lokalen Temperatur im vollständig verbrannten Gasgemisch im Brennraum durch Annahme einer Wahrscheinlickkeitsdichtefunktion für die Temperatur als Funktion von Favre-Mittelwert und Favre-Varianz der Temperatur in jedem Volumenelement des Brennraums.

Die Möglichkeiten der Reduzierung von Fehlern, die aus der numerischen Lösung des Gleichungssystems der Transportgleichungen der turbulenten, reaktiven Strömung stammen, sind folgende:

- die Verwendung von hochauflösenden Rechennetzen mit Zellenzahlen der Größenordnung einer Million Zellen für motorische Anwendungen, wobei auf die Qualität der Zellen großer Wert gelegt werden muß,

- die Verwendung von Diskretisierungsansätzen höherer Ordnung zur Reduzierung der numerischen Diffusion und/oder Dispersion,

- der Algorithmus der Netzbewegung sollte wegen der hohen Empfindlichkeit der Turbulenzgrößen möglichst auf einfachen Netzbewegungen (Kompression und Entspannung der Zellen) beruhen, wobei dies besonders in der Phase des Zerfalls des Tumbles in der Endphase der Kompression vor Zünd-OT gilt,

- das Extrapolationsverfahren zur Bestimmung der asymptotischen Werte der Turbulenzgrößen kann anhand von Netzabhängigkeitsstudien weiter verfeinert werden, um somit auf möglichst einfache Weise die exakten Werte der Turbulenzgrößen an das Verbrennungsmodell weiterzugeben,

- Parallelisierung der CFD-Programmpakete und Durchführung der Berechnung auf massiv-parallelen Höchstleistungscomputern, um die Durchlaufzeiten der Simulation auf ein akzeptables Maß (ca. eine Woche) zu reduzieren.

Unter Berücksichtigung all dieser Faktoren und der Voraussetzung der Weiterentwicklung der Rechenleistung mit derselben Geschwindigkeit wie bisher, wird die Anwendung der mehrdimensionalen Strömungsberechnung immer mehr an Bedeutung gewinnen. Gleichzeitig wird das Vertrauen der Motorkonstrukteure in die Qualität der Analyse und die Vorhersagefähigkeit der Ergebnisse zunehmen, so daß eine Begleitung des Motorentwicklungsprozesses durch die CFD-Berechnung als sinnvoll und insgesamt kostensparend angesehen sein wird. Dies gilt zum Teil schon heute, wird sich jedoch in Zukunft sehr viel deutlicher herausstellen.

Literaturverzeichnis

[1] Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F. und Bird, R. B.: *Molecular Theory of Gases and Liquids.*
J. Wiley & Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, 1964.

[2] Warnatz, J. und Maas, U.: *Technische Verbrennung.*
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1993.

[3] Maas, U.: *Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen.*
Dissertation, Naturwissenschaftlich-Mathematische Gesamtfakultät. Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1989.

[4] Bird, R. B., Stewart, W. E. und Lightfoot, E. N.: *Transport Phenomena.*
J. Wiley & Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto, 1960.

[5] Maas, U.: *Numerische Behandlung von Verbrennungsvorgängen.*
Vorlesung WS 1991/1992, Universität Stuttgart, 1991.

[6] Landau, L. D. und Lifshitz, E. M.: *Lehrbuch der theoretischen Physik, Band VI.*
Akademie Verlag Berlin, 1981.

[7] *Star-CD Version 2.2 Manuals.*
Computational Dynamics Ltd., London,1993.

[8] Sull, D. R. und Prophet, F.: *JANAF Thermochemical Tables*, 2nd Ed.
National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1971.

[9] Stephan, K. und Mayinger, F.: *Thermodynamik*, Band I+II.
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1992.

[10] Pflaum, W. und Mollenhauer, J.: *Wärmeübergang in der Verbrennungskraftmaschine.*
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1977.

[11] Peters, N. und Rogg, B. (Eds.): *Reduced Kinetic Mechanisms for Application in Combustion Systems.*
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1985.

[12] Rotta, J.: *Turbulente Strömungen.*
B. G. Teubner Verlag, Stuttgart, 1972.

[13] Launder, B. E. und Spalding, D. B.: *The Numerical Computation of Turbulent Flows.*
Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. **3**:269-289 (1974).

[14] Jones, W. P.: *Turbulence Modelling for Variable Density and Combusting Flows.*
Lecture Notes in „Modelling of Combustion and Turbulence“, Aussois (F), März 1994

[15] Vandromme, D.: *Turbulence Modelling for Compressible Flows and Implementation in Navier-Stokes Solvers.*
Lecture Notes in „Modelling of Combustion and Turbulence“, Aussois (F), März 1994

[16] Oberlack, M.: *Herleitung und Lösung einer Längenmaß- und Dissipations-Tensorgleichung für turbulente Strömungen.*
Dissertation, RWTH Aachen, VDI Verlag, Reihe 7: Strömungstechnik, Nr. 255, Düsseldorf (1994)

[17] Kolmogorov, A.: *The Local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for very large Reynolds' Numbers.*
In S. K. Friedlander und L. Topper (Ed.): *Turbulence - Classic Papers on Statistical Theory*, Interscience Publisher Inc., London, New York, 1961

[18] Kolmogorov, A.: *On Degeneration of Isotropic Turbulence in Incompressible Viscous Liquid.*
In S. K. Friedlander und L. Topper (Ed.): *Turbulence - Classic Papers on Statistical Theory*, Interscience Publisher Inc., London, New York, 1961

[19] Kolmogorov, A.: *Dissipation of Energy in the Locally Isotropic Turbulence.*
S. K. Friedlander und L. Topper (Ed.): *Turbulence - Classic Papers on Statistical Theory*, Interscience Publisher Inc., London, New York, 1961

[20] Peters, N.: *Lenght Scales in Laminar and Turbulent Flames.*
Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 135 (1991)

[21] Warnatz, J.: *Flame Velocity and Structure of Lamianr Hydrocarbon-Air Flames.*
Progress in Astronautics and Aeronautics, Vol. 76, 501-521 (1980)

[22] Warnatz, J.: *The Structure of Laminar Alkane-, Alkene-, and Acetylene Flames.*
18th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981.

[23] Warnatz, J.: *The Mechanism of High Tmperature Combustion of Propane and Butane.*
Combust. Sci. and Tech. **34**:177 (1983).

[24] Peters, N. und Warnatz, J. (Hrsg.): *Numerical Methods in Laminar Flame Propagation.*
Vieweg, Braunschweig, 1982.

[25] Matalon, M.: *On Flame Stretch.*
Combust. Sci. and Tech. **70**:1 (1990).

[26] Candel, S. und Poinsot, T.: *Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area.*
Combust. Sci. and Tech. **70**:1 (1990).

[27] Attia-Shahin, A.-H.: *Modellierung laminarer und turbulenter Vormischflammen unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen.*
Dissertation, Univ. Stuttgart (1996)

[28] Searby, G und Quinard, J.: *Direct and Indirect Measurement of Markstein Numbers of Premixed Flames.*
Combustion and Flame **82**:298 (1990).

[29] Tseng, L.-K., Ismail, M. A. und Faeth, G. M.: *Laminar Burning Velocities and Markstein Numbers of Hydrocarbon/Air Flames.*
Combustion and Flame **95**:410 (1993).

[30] Gülder, Ö.: *Correlation of Laminar Combustion Data for Alternative S.I. Engine Fuels.*
SAE Technical Paper 841000 (1984)

[31] Cant, R. S., Rogg, B. und Bray, K. N. C.: *On Laminar Flamelet Modelling of the Mean Reaction Rate in a Premixed Turbulent Flame.*
Combustion and Flame **95**:410 (1993).

[32] Stahl, G. und Warnatz, J.: *Numerical Investigations of the Time-Dependent Properties and Extinction of Strained Methane- and Propane-Air Flamelets.*
Combustion and Flame **85**:285 (1991).

[33] Pope, S. B.: *The Evolution of Surfaces in Turbulence.*
Int. Journal of Engineering Science **26**:445 (1988)

[34] Abdel-Gayed, R. G., Bradley, D. und Lau, K. C.:
22nd Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988/pp. 731-738.

[35] Peters, N.: *Modeling Approaches in Premixed Turbulent Combustion.*
Euroconference 08.-09.06.1995, Aachen: „Premixed Turbulent Combustion - Introduction to the State of the Art“

[36] Bracco, F. V.: *Structure of Flames in Premixed-Charge IC Engines.*
Combust. Sci. and Tech. **58**:209 (1988).

[37] Poinsot, T., Veynante, D. und Candel, S.: *Quenching Processes and Premixed Combustion Diagrams.*
J. Fluid Mech. **228**:561 (1991)

[38] Meneveau, C. und Poinsot, T.: *Stretching and Quenching of Flamelets in Premixed Turbulent Combustion.*
Combustion and Flame **86**:311 (1991).

[39] Heywood, J. B.: *Combustion and its Modeling in Spark Ignition Engines.*
International Symposium COMODIA 94 (1994).

[40] Veynante, D., Duclos, J. M., Piana, J. und Candel, S.: *Flame Surface Density Models for Turbulent Combustion: Theory and Application.*
Euroconference 08.-09.06.1995, Aachen: „Premixed Turbulent Combustion - Introduction to the State of the Art“

[41] Cant, R. S., Pope, S. B. und Bray, K. N. C.: *Modeling of Flamelet Surface to Volume Ratio in Premixed Turbulent Combustion.*
23nd Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 1990/pp. 809-815.

[42] Cheng, W. K. und Diringer, J. A.: *Numerical Modelling of SI Engine Combustion with a Flame Sheet Model.*
SAE Technical paper 910268 (1991).

[43] Bray, K. N. C., Libby, P. A. und Moss, J. B.: Combust. Sci. and Tech. **41**:143 (1981).

[44] Bray, K. N. C., Libby, P. A. und Moss, J. B.: Combustion and Flame **61**:87 (1987).

[45] Bray, K. N. C., Champion, M. und Libby, P. A.: *The Interaction Between Turbulence and Chemistry in Turbulent Premixed Flames.*
In *Turbulent Reactive Flows, Lecture Notes in Eng., 40, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York*

[46] Mantel, T. und Borghi, R.: *A New Model of Premixed Wrinkled Flame Based on a Scalar Dissipation Equation.*
Combustion and Flame **96**:443 (1994).

[47] Duclos, J. M., Veynante, D. und Poinsot, T.: *A Comparison of Flamelet Models for Prenixed Turbulent Combustion.*
Combustion and Flame **95**:101 (1993).

[48] Anand, M. S. und Pope, S. B.: *Calculation of Premixed Turbulent Flames by PDF Methods.*
Combustion and Flame **67**:127 (1987).

[49] Tatschl, R. und Brandstätter, W.: *The Application of a Hybrid Finite-Volume/ Monte Carlo PDF Method to Engine Combustion Simulation.*

[50] Weller H. G.: *The Development of a New Flame Area Combustion Model Using Conditional Averaging.*
Thermo-Fluids Section Report TF/9307. Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science Technology ans Medicine, 23 March 1993

[51] Gülder, Ö.: *Turbulent Premixed Flame Propagation Models for Different Combustion Regimes.*
23rd Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 1990/pp. 743-750.

[52] Pope, S. B. und Anand, M. S.: *Calculation of Premixed Turbulent Flames by PDF Methods.*
20rd Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 1990/pp. 403.

[53] Heel, B.: *Dreidimensionale Simulation der Strömung und der Verbrennung im Zylinder eines Otto-Forschungsmotors.*
Dissertation, Universität Karlsruhe, vorauss. 1997.

[54] Herweg, R.: *Die Entflammung brennbarer, turbulenter Gemische durch elektrische Zündanlagen - Bildung von Flammenkernen.*
Dissertation, Fakultät Elektrotechnik der Universität Stuttgart, 1992.

[55] Heywood, J. B.: *Internal Combustion Engine Fundamentals.*
McGraw-Hill, Inc. ,New York, 1994.

[56] Klaus, Ph.: *Entwicklung eines Reaktionsmechanismus zur Modelierung der Bildung von Stickoxiden in Flammenfronten.*
Dissertation, Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen, Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1997.

[57] Raine, R. R., Stone, C. R. und Gould, J.: *Modelling of Nitric Oxide Formation in Spark Ignition Engines with a Multizone Burned Gas.*
Combustion and Flame **102**:241 (1995).

[58] Fenimore, J. A.: Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames.
13th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 373-380 (1970).

[59] Miller, J. A.: Theory and Modelling in Combustion Chemistry.
26th Symposium (International) on Combustion. The Combustion Institute, Pittsburgh, pp. 461-480 (1996).

[60] Noll, B.: *Numerische Strömungsmechanik.*
Springer-Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 1993.

[61] Gildein, H., Riegler, U. G. und Rumez, W.: *Simulation der instationären 3D-Strömung am M112 Dreiventil Triebwerk.*
Daimler Benz - Technischer Bericht, F1M/ST **95-0037** (1995).

[62] Klimetzek, F. R. und Breitling, T.: *Reliable Computational Fluid Dynamics at the Research Center of Daimler-Benz AG.*
Invited Lecture at World User Association in CFD, Japanese branch, Tokyo, Nov. 1994.

[63] Issa, R. I.: *Solution of Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-splitting.*
Journal of Computational Physics, **62**:40 (1985).

[64] Issa, R. I., Gosman, A. D. und Watkins, A. P.: *The Computation of Compressible and Incompressible Recirculartıng Flows by a Non-Iterative Implicit Scheme.*
Journal of Computational Physics, **62**:66 (1985).

[65] Glemser, R.: *Einfluß der Brennraum- und Kanalgeometrie ase M112-3V/DZ auf die Verbrennung.*
Diplomarbeit, Fachhochschule für Technik Heilbronn, 1994.

[66] Zahn, M.: *Innermotorische Untersuchungen zur Gemischbildung, Kraftstoff- und NO-Verteilung HC-Quellen mit Laseroptischen Verfahren.* Seminarvortrag am Forschungsinstitut Mercedes-Benz, Daimler Benz AG, August 1995.

[67] Drewes, V., Häcker, H., Heel, B., u. a.: 1st CEC-Workshop „NOx & UHC“, Stuttgart, 16. März 1994.

[68] Drewes, V., Häcker, H., Heel, B., u. a.: 2nd CEC-Workshop „NOx & UHC“, Leeds, 26-28 September 1994.

[69] Drewes, V., Häcker, H., Heel, B., u. a.: 3rd CEC-Workshop „NOx & UHC“, Paris, 27-29 März 1995.

[70] Drewes, V., Häcker, H., Heel, B., u. a.: Final CEC-Workshop „NOx & UHC“, Bad Überklingen, 2. Juni 1995.

Lebenslauf

Name	Udo Günther Riegler
Geburtsdatum	20. April 1967
Geburtsort	Hermannstadt/Rumänien
Staatsangehörigkeit	deutsch
Familienstand	verheiratet
Schulbildung	September 1973 - Juli 1981 Grundschule in Hermannstadt/Rumänien September 1981 - Juli 1985 Gymnasium für Mathematik und Physik Nr. 1, Hermannstadt Abschluß: Abitur
Wehrdienst	September 1985 - Juli 1986
Studium	September 1986 - Juli 1991 Studiengang Physik (Diplom) Universität Bukarest/Rumänien Thema der Diplomarbeit: Die Bestimmung der Wirkungsquerschnitte elementarer Stoßprozesse im anisothermen Tiefdruckplasma
Lehrtätigkeit	September 1991 - März 1992 Physiklehrer an dem Gymnasium für Mathematik und Physik Nr. 1, Hermannstadt
Einreise in die Bundesrepublik	23. April 1992
Promotion	1. Mai 1993 - 1.Juni 1994 Wissenschaftlicher Angestellter am Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart 1. Juni 1994 - 1. März 1996 Doktorand am Forschungsinstitut Mercedes-Benz, Daimler Benz AG Abt. für Thermo- und Fluiddynamische Berechnungen Thema der Dissertation: Modellierung der Verbrennung und der Schadstoffbildung in Ottomotoren unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen
Berufstätigkeit	seit 1. März 1996 Wissenschaftlicher Angestellter am Forschungsinstitut für Kraftfahrwesen und Fahrzeugmotoren Stuttgart