Technische Universität München Institut für Energietechnik

Lehrstuhl für Thermodynamik

Numerische Simulation der Zündung und Verbrennung von mit Diesel pilotierten Erdgasstrahlen

Michael Jud

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR – INGENIEURS

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:

Prof. Dr.-Ing. Dirk Weuster-Botz

Prüfer der Dissertation:

Prof. Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer Prof. Dr. Konstantinos Boulouchos

Die Dissertation wurde am 25.04.2019 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Maschinenwesen am 20.08.2019 angenommen.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Thermodynamik der technischen Universität München. Sie wurde im Rahmen des Forschungsvorhabens *Flexible direkteinspritzende Motoren für die Schifffahrt - FlexDi* durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie gefördert.

Mein besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Herrn Professor Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer für die Betreuung dieser Arbeit und die übernahme des Hauptreferats. Er hat mir durch seine Betreuung eine sehr freie Gestaltung des Forschungsvorhabens ermöglicht, es jedoch nie versäumt richtungsweisende Denkanstöße und Korrekturen einzubringen. Bei Prof. Dr. Konstantinos Boulouchos bedanke ich mich herzlich für die Übernahme des Koreferates und bei Prof. Dr.-Ing. Dirk Weuster-Botz für die Übernahme des Vorsitzes bei der mündlichen Prüfung.

Ein besonderer Dank gilt allen aktuellen und ehemaligen Arbeitskollegen am Lehrstuhls für Thermodynamik für die fachlich wertvollen Diskussionen sowie das stets sehr lockere und angenehme Arbeitsklima. Ausdrücklich danken möchte ich an dieser Stelle meinem Projektkollegen Georg Fink für die außerordentlich erfolgreiche und freundschaftliche Zusammenarbeit sowie für die fachliche Korrektur dieser Arbeit. Michael Boltz möchte ich einerseits für seinen stets sehr wertvollen und ausführlichen fachlichen Input danken und andererseits für die freundschaftliche Zusammenarbeit während der gemeinsamen sehr intensive Zeit als Administratoren des Lehrstuhls. Weiterhin möchte ich mich herzlichst bei Christiane Jud für die sprachliche Korrektur der Arbeit bedanken.

Zuletzt danke ich von ganzem Herzen meiner Familie, die mich unermüdlich unterstützt und mir unabhängig von meinen Entscheidungen in allen Lebenslagen zur Seite steht.

München, im April 2019

Michael Jud

Kurzfassung

Mit Erdgas als alternativem Brennstoff in Verbrennungsmotoren werden sowohl Treibhausgas- als auch Schadstoffemissionen erheblich reduziert. Die Hochdruck-Direkteinblasung von Erdgas mit Diesel-Pilotzündung (HPDF) hat das Potenzial, den Methanschlupf von Gasmotoren zu minimieren und die Brennstoffflexibilität zu erhöhen, während gleichzeitig der hohe Wirkungsgrad eines Dieselmotors erhalten bleibt. Ein effizientes numerisches Modell zur Vorhersage der HPDF-Verbrennung ist einer der wichtigsten Schritte, um das Verbrennungskonzept zu verbessern, den experimentellen Entwicklungsaufwand zu reduzieren und damit den Entwicklungsprozess kostengünstig zu gestalten. Diese Arbeit verfolgt daher das Ziel, ein Simulationsmodell auf Basis detaillierter Chemie zur Vorhersage der Zündung und Verbrennung unterexpandierter Erdgasstrahlen zu entwickeln, zu validieren und anzuwenden. Die Auswahl der benötigten Reaktionskinetik für Diesel und Erdgas erfolgt auf Basis experimenteller und numerischer Untersuchungen an einer schnellen Kompressions-Expansionsmaschine durch getrennte Betrachtung der Dieselzündung und der Einflüsse der Reaktionskinetik auf den Brennverlauf. Bei hohen Kompressionsendtemperaturen kann von der validierten Reaktionskinetik eine vereinfachte Kinetik abgeleitet werden, wodurch eine Verringerung der Rechenzeit um etwa 30% erreicht wird. Die Eignung des numerischen Modells zur Vorhersage der räumlichen sowie zeitlichen Interaktion von Diesel- und Gasstrahl wird anhand des Vergleichs mit experimentellen Daten nachgewiesen.

Abstract

Natural gas as an alternative fuel in internal combustion engines significantly reduces both greenhouse gas and pollutant emissions. Highpressure direct injection of natural gas with diesel pilot ignition (HPDF) has the potential to minimize the methane slip of gas engines and to increase fuel flexibility while maintaining the high efficiency of a diesel engine. An efficient numerical model for predicting HPDF combustion is one of the most important steps to improve the combustion concept, to reduce the experimental development effort and thus to make the development process more cost-effective. The aim of this work is therefore to develop, validate and apply a simulation model based on detailed chemistry for predicting the ignition and combustion of underexpanded natural gas jets. The required reaction kinetics for diesel and natural gas are selected on the basis of experimental and numerical investigations on a rapid compression-expansion machine by means of separate consideration of the diesel ignition and the influences of the reaction kinetics on the combustion process. At high final compression temperatures, a simplified kinetics can be derived from the validated reaction kinetics, which reduces the computing time by about 30%. The suitability of the numerical model for predicting the spatial and temporal interaction of diesel and gas jets is demonstrated by comparison with experimental data.

Inhaltsverzeichnis

Ak	Abbildungsverzeichnis		
Та	belle	verzeichnis	xix
Sy	mbo	erzeichnis	xxi
1	Einl	itung	1
	1.1	Motivation	1
	1.2	Das HPDF-Brennverfahren	3
	1.3	Modellierungsansätze	5
	1.4	Zielsetzung und Struktur der Arbeit	7
2	The	retische Grundlagen	9
	2.1	Gasdynamik unterexpandierter turbulenter Freistrahlen	9
		2.1.1 Gasdynamische Grundlagen	9
		2.1.2 Strahlcharakteristik	12
		2.1.3 Empirische Beschreibung	13
	2.2	Zerfall von Flüssigstrahlen	15
		2.2.1 Primärzerfall	16
		2.2.2 Sekundärzerfall	18
	2.3	Erhaltungsgleichungen reaktiver Strömungen	19
	2.4	Turbulente Verbrennung	21
		2.4.1 Vorgemischte turbulente Verbrennung	22
		2.4.2 Nicht-vorgemischte turbulente Verbrennung	25
	2.5	HPDF-Verbrennung	27
3	Мос	llierung	31
	3.1	Dieselspray	31
		3.1.1 Modellierung des Primärzerfalls	32
		3.1.2 Modellierung des Sekundärzerfalls	32
	3.2	Reynolds-Gemittelte Navier-Stokes Gleichungen	34

	3.3	Turbulenzmodell 36			
	3.4	Thermische Zustandsgleichung realer Gase			
	3.5	5 Reaktionskinetik			
	3.6 Turbulenz-Chemie-Interaktion				
3.6.1 Physikalische Effekte					
		3.6.2 TCI Modelle	44		
	3.7 Solver-Umgebung				
	3.7.1 SAGE-Solver in CONVERGE				
3.7.2 Mehrzonenmodell für Zellen mit ähnlichen thermo-					
		dynamischen Bedingungen			
		3.7.3 Adaptive Netzverfeinerung	49		
4	Valio	lierungsexperiment und Randbedingungen für die numeri-			
	sche	e Simulation	51		
	4.1	Validierungsexperiment und Messaufbau	51		
	4.2	Geometrie und Wärmeverluste	54		
	4.3	Vernetzung	56		
	4.4	Betriebspunkte	58		
	4.5	Randbedingungen der Brennstoffinjektion	58		
5	Gas	- und Dieseleinblasung	63		
	5.1	Gaseinblasung	64		
	5.2	Dieseleinblasung	67		
	5.3	Fazit	70		
6	Dies	elzündung in Luft- und Erdgas/Luft-Atmosphäre	73		
	6.1	Datenerzeugung und Auswertung	76		
	6.2	0D homogen gerührter Reaktor	80		
	6.3	Quasistationäre Bedingungen	85		
	6.4	Transiente Bedingungen	89		
	6.5	Fazit	95		
7	Einf	luss der Reaktionskinetik auf den Verlauf der HPDF-			
	Verb	rennung	97		
	7.1	Einfluss der Reaktionskinetik von Methan auf den Brenn-			
		verlauf	97		
	7.2	Mechanismus-Reduktion	101		

	7.3 Turbulenz-Chemie Interaktion		104	
		den Brennverlauf	107	
	7.5	Fazit	108	
8	Verb	rennung fremdgezündeter Erdgasstrahlen	109	
	8.1	Vorhersage der Gas-Diesel Strahlinteraktion	109	
	8.2 Variation des Vormischgrads			
	8.3	Fazit	119	
9	Zusa	Immenfassung	121	
Literaturverzeichnis				

Abbildungsverzeichnis

2.1	Veranschaulichung der Stoßstruktur in unterexpandierten	
	und stark unterexpandierten Strahlen	14
2.2	Schematische Darstellung der Düseninnenströmung und des Strahlzerfalls von Flüssigstrahlen.	17
2.3	Schematische Darstellung des Zusammenhangs der wich-	10
2.4	Regime des Tropfenzerfalls nach Pilch und Erdmann mit den dazugehörigen Bereichen kritischer Weber-Zahlen für	10
	Diesel.	19
2.5	Veranschaulichung der Verbrennungsregime für die vorge- mischte Verbrennung anhand des Borghi-Diagramms.	23
2.6	Veranschaulichung der Verbrennungsregime für die nicht- vorgemischte Verbrennung anhand des Diagramms nach	
	Poinsot und Veynante.	26
2.7	Charakterisierung eines generischen HPDF-Brennverlaufs anhand der Damköhler-Zahl.	28
3.1	Prinzipskizze des Partially-Stirred Reaktor Modells inner- halb einer Gitterzelle	46
4.1	RCEM-Prüfstand mit optischer Messtechnik (links) und Anordnung der Injektoren (rechts): (1) Antriebsluftver- sorgung, (2) Antriebskolben, (3) Hydrauliköl, (4) Über- strömbohrung, (5) Arbeitskolben, (6) Bypass-Ventil, (7) Brennraum, (8) Gas-Injektor, (9) Diesel-Pilotinjektor, (10) Lichtbogenlampe, (11) UV-Filter, (12) Pinhole, (13) Parabol- spiegel, (14) verspiegelter Zylinderkopf, (15) 50/50 Strahl- teiler, (16) Fokusierlinse, (17) Schatten-Kamera, (18) UV- Strahlteiler, (19) OH*-Filter, (20) Bildverstärker, (21) OH*-	
	Kamera	52

4.2	Reale (links) bzw. für die Simulation vereinfachte Brenn- raumgeometrie (rechts) nahe des oberen Totpunktes	55
4.3	Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Druck- verläufen mit und ohne Berücksichtigung von Spaltverlus- ten (bei gleichem Gesamtvolumen des Brennraums) für ei- ne Kompression und Expansion ohne Verbrennung	56
4.4	Veranschaulichung der Vernetzung des Brennraums in ei- ner Schnittansicht durch die Interaktionsebene der Brenn- stoffstrahlen.	57
4.5	Bestromungsdauer und Massenstromverlauf für die Injek- tion von 3 mg Diesel und 80 mg Erdgas bei 2000 bar bzw. 330 bar.	60
5.1	Veranschaulichung der Strahlerkennung und Berechnung der Eindringtiefe aus den Schattenaufnahmen.	64
5.2	Netzstudie und Validierung der Eindringtiefe für die Ga- seinblasung.	66
5.3	Vergleich zwischen Schattenaufnahmen des Gasstrahls und dem Dichtefeld aus der CFD in einem Schnitt durch die Interaktionsebene der beiden Strahlen für den hohen Betriebspunkt an zwei ausgewählten Zeitpunkten	68
5.4	Netzstudie und Validierung der Eindringtiefe für die Die- seleinblasung.	69
5.5	Vergleich zwischen Schattenaufnahmen des Dieselstrahls und dem Dichtefeld aus der CFD in einem Schnitt durch die Interaktionsebene der beiden Strahlen für die Brenn- raumbedingungen 750 K und 70 bar an zwei ausgewählten Zeitpunkten.	70
6.1	Zeitliche Entwicklung der Intensität im Strahl aus den Schattenaufnahmen (SG) I_{SG} sowie der Intensität des OH* Signals I_{OH} für $\Phi_{HG} = 0$ (links) und $\Phi_{HG} = 1$ (rechts); kom- binierte SG/OH* Bilder für eine mittlere Zündung bei Φ_{HG} = 0 (links) und eine späte Zündung bei $\Phi_{HG} = 1$ (rechts) zu ausgewählten Zeitpunkten.	78

6.2	Erfassung der Vorzündung aus der mittleren Dichte des Dieselstrahls $\overline{\rho}$ sowie der Zündung aus der Wärmefreiset- zungsrate (HRR) \dot{Q} für eine numerisch berechnete mittlere ($\Phi_{HG} = 0$) sowie späte ($\Phi_{HG} = 0.5$) Zündung		
6.3	Zündverzugszeiten für homogene n-Heptan/Luft Mi- schungen bei verschiedenen Temperaturen, einem Druck von 41 bar und einem Äquivalenzverhältnis von 1.0. Die experimentellen Vergleichsdaten wurden von Ciezki <i>et al.</i> gemessen.	83	
6.4	Zündverzugszeiten für homogene Methan/Luft Mischun- gen bei verschiedenen Temperaturen, einem Druck von 40 bar und einem Äquivalenzverhältnis von 1.0. Die expe- rimentellen Vergleichsdaten wurden von Huang <i>et al.</i> bzw. Hashemi <i>et al.</i> gemessen	83	
6.5	Zündverzugszeiten für homogene n- Heptan/Methan/Luft Mischungen bei verschiedenen Temperaturen, einem Druck von 30 bar und einem Äqui- valenzverhältnis von 2.0. Die experimentellen Vergleichs- daten wurden von Herzler <i>et al.</i> für ein n-Heptan/Methan- Molverhältnis von 1/19 gemessen.	84	
6.6	Experimentell ermittelte Zündverzugszeiten der Dieselein- spritzung in Hintergrundgemische mit unterschiedlichem Methananteil Φ_{HG} unter quasistationären Bedingungen in Abhängigkeit von Druck und Temperatur (links) sowie der Vergleich zwischen experimentellen und numerischen Er- gebnissen bei einem konstanten Druck von $p = 80$ bar (rechts).	87	
6.7	Beginn der kalten Flamme und Zündung für verschiedene Äquivalenzverhältnisse Φ_{HG} bei EB 3 ms und 6 ms vor OT. Die thermodynamischen Bedingungen bei OT sind 70 bar und 780 K.	90	
6.8	Veranschaulichung der Mischung, der kalten Flamme, der Strahl-Zündung, der Tropfen-Zündung sowie der Flam- menausbreitung anhand der Schattenaufnahmen für EB -3 ms und -6 ms vor OT (70 bar/780 K) bei Φ_{HG} von 0.556.	92	

6.9	Vergleich zwischen Experiment, Chalmers- und Rahimi- Mechanismus unter transienten Bedingungen bei $\Phi_{HG} =$ 0.556. Beginn der kalten Flamme sowie Zündverzugszei- ten sind für eine Variation des EB von 1ms bis 6ms vor OT dargestellt.	94
7.1	Laminaren Flammengeschwindigkeiten für verschiedene Äquivalenzverhältnisse berechnet mit dem Chalmers- und dem Rahimi-Mechanismus.	99
7.2	Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Ein- blaszeitpunkte, berechnet mit dem Chalmers- und dem Rahimi-Mechanismus für den hohen Betriebspunkt und ei- nem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen	100
7.3	Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Einblaszeitpunkte, berechnet mit dem Chalmers- und dem Rahimi-Mechanismus für den niedrigen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.	101
7.4	Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Einblaszeitpunkte, berechnet mit dem Chalmers- und dem Chalmers _{red} -Mechanismus für den hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.	104
7.5	Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Ein- blaszeitpunkte, berechnet mit und ohne TCI Modell für den hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.	105
7.6	Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Ein- blaszeitpunkte, berechnet mit und ohne TCI Modell für den hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.	106
7.7	Wärmefreisetzungsraten (HRR) berechnet mit dem Chalmers- und dem NANCY-Mechanismus im Vergleich mit Messdaten für den teilvorgemischten Fall beim hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen	
	den Strahlen	107

8.1	Veranschaulichung der Interaktion zwischen Gas- und Die-	
	selstrahl an zwei Zeitpunkten für den hohen Betrieb-	
	spunkt. Von Links nach Rechts sind die Überlagerung der	
	experimentellen OH*- und Schattenaufnahmen (SG), das	
	berechnete Dichtefeld sowie die Verteilung von Wasser-	
	stoffperoxid dargestellt.	111
8.2	Veranschaulichung der Interaktion zwischen Gas- und Die-	
	selstrahl an zwei Zeitpunkten für den niedrigen Betrieb-	
	spunkt. Von links nach rechts sind die Überlagerung der	
	experimentellen OH*- und Schattenaufnahmen (SG), das	
	berechnete Dichtefeld sowie die Verteilung von Wasser-	
	stoffperoxid dargestellt.	113
8.3	Vergleich der numerisch und experimentell ermittelten	
	Wärmefreisetzungsraten (HRR) für EB Gas 1.5 ms und	
	0.5 ms vor bzw. 0.5 ms und 1.5 ms nach EB Diesel beim	
	hohen Betriebspunkt und einem Winkel von 10° zwischen	
	den beiden Strahlen.	116
8.4	Vergleich der numerisch und experimentell ermittelten	
	Wärmefreisetzungsraten (HRR) für EB Gas 1.5 ms und	
	0.5 ms vor bzw. 0.5 ms und 1.5 ms nach EB Diesel beim	
	niedrigen Betriebspunkt und einem Winkel von 10° zwi-	
	schen den beiden Strahlen.	118

Tabellenverzeichnis

3.1	Konstanten des Standard und RNG k - ϵ -Turbulenzmodells.		
3.2	Kriterien für die Gruppierung von Zellen im Mehrzonen-		
	modell	49	
3.3	Parameter für die adaptive Netzverfeinerung.	50	
4.1	Geometrische Abmessungen, Randbedingungen und Be- triebspunkte der RCEM.		
7.1	Zusammenfassung der Parameter zur Mechanismus- Reduktion	103	

Symbolverzeichnis

Lateinische Buschstaben

Α	Fläche	[m ²]
а	Schallgeschwindigkeit	[m/s]
D	Diffusionskoeffizient	$[m^2/s]$
d	Durchmesser	[m]
E_A	Aktivierungsenergie	[J/mol]
F	Kraft	[N]
f	Reaktiver Massenanteil	[-]
8	Gravitationskonstante	$[m/s^2]$
h	Spezifische Enthalpie	[J/kg]
Δh_f^0	Spezifische Standardbildungsenthalpie	[J/kg]
Ι	Intensität	[-]
k	Reaktionsrate	$[m^3/(mol s)]$
k	Spezifische turbulente kinetische Energie	[J/kg]
1	Länge	[m]
l_f	Laminare Flammendicke	[m]
'n	Massenstrom	[kg/s]
N	Anzahl	[-]
п	Stoffmenge	[mol]
р	Druck	[Pa]
Ż	Wärmefreisetzungsrate	[J/s]
q	Wärmestromdichte	$[W/m^2]$
R	Spezifische Gaskonstante	[J/(kg K)]
R_u	Universelle Gaskonstante	[J/(mol K)]
r	Radius	[m]
S	Flammengeschwindigkeit	[m/s]
Т	Temperatur	[K]
t	Zeit	[s]
U	Relativgeschwindigkeit	[m/s]
и	Geschwindigkeit	[m/s]

V	Volumen	[m ³]
υ	Geschwindigkeit	[m/s]
V	Spezifisches Volumen	[m ³ /kg]
\mathbf{v}'	Stöchiometrischer Koeffizient der Reaktanten	[-]
v''	Stöchiometrischer Koeffizient der Produkte	[-]
Χ	Molanteil	[-]
x	Koordinate	[m]
x	Eindringtiefe	[m]
Y	Massenanteil	[-]
Ζ	Realgasfaktor	[-]

Griechische Buchstaben

α	Winkel	[]
δ_{ij}	Kronecker-Delta	[-]
e	Turbulente Dissipationsrate	$[m^2/s^3]$
η	Länge kleinster Wirbel	[m]
κ	Isentropenexponent	[-]
Λ	Wellenlänge	[m]
λ	Thermische Leitfähigkeit	[W/(m K)]
ν	Kinematische Viskosität	$[m^2/s]$
μ	Dynamische Viskosität	[kg/(m s)]
ρ	Dichte	[kg/m ³]
σ	Oberflächenspannung	[N/m]
$ au_{ij}$	Spannungstensor	$[N/m^2]$
τ	Zündverzugszeit	[s]
τ	Charakteristische Zeit	[s]
ϕ	Äquivalenzverhältnis	[-]
χ	Skalare Dissipationsrate	[1/s]
Ω	Wachstumsrate	[1/s]
ŵ	Quellterm	[1/s]

Tiefgestellte Indizes

() ₀	Ruhezustand
-----------------	-------------

- $()_0$ Anfangszustand
- $()_{\infty}$ Umgebungsbedingungen
- $()_B$ Brennstoff
- ()_{BB} Bestromungsbeginn
- $()_c$ Chemisch
- ()_d Tropfen (droplet)
- ()_{drag} Widerstand (drag)
- $()_{EB}$ Einblasbeginn
- ()_{ext} Auslöschung (extinction)
- ()_{fl} Flamme (flame)
- $()_{g}$ Gasphase
- $()_{HG}$ Hintergrundgemisch
- $()_k$ k-te Spezies
- $()_k$ Zustand am kritischen Punkt
- ()_{*KH*} Kelvin-Helmholz
- $()_L$ Luft

()_l Laminar

- ()_l Flüssigphase (liquid)
- () $_{lfa}$ Annahme laminarer Flamme (laminar flame approach)
- $()_{R}$ Reaktion
- $()_{RT}$ Rayleigh-Taylor
- $()_{S}$ Spezies
- $()_s$ Sensibel
- ()_{st} Stöchiometrisch
- ()_t Turbulent

Hochgestellte Symbole

- ()['] Fluktuierender Anteil
- ()⁰ Initial
- ()* Reaktionszone
- () Ensemble-Mittelung
- () Favre-Mittelung

()^{*n,m*} Reaktionsordnung

Dimensionslose Kennzahlen

- CFL Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl
- Da Damköhler-Zahl
- *Ka* Karlovitz-Zahl
- Ma Machzahl
- *Oh* Ohnesorge-Zahl
- *Pr* Prandtl-Zahl
- *Re* Reynolds-Zahl
- Sc Schmidt-Zahl
- Ta Taylor-Zahl
- *We* Weber-Zahl

Abkürzungen

Abgasrückführung
Adaptive Netzverfeinerung (adaptive mesh refinement)
Bestromungsbeginn
Numerische Strömungsmechanik
(computational fluid dynamics)
Dual-Fuel
Direkte numerische Simulation (direct numerical simulation)
Einblasbeginn
Extended coherent flame model
Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen
Hochdruck Direkteinblasung mit Diesel-Pilotzündung
(high-pressure dual-fuel)
Wärmefreisetzungsrate (heat release rate)
International Maritime Organisation
Großskalensimulation (large eddy simulation)
Oberer Totpunkt
Teilgerührter Reaktor (partially-stirred reaktor)
Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

	(probability density function)
RANS	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes
	(Reynolds-averaged Navier-Stokes)
RCEM	Schnelle Kompressions-Expansionsmaschine
	(rapid compression expansion machine)
RNG	Re-Normalization Group
SG	Schattenaufnahmen (shadowgraphy)
TCI	Turbulenz-Chemie-Interaktion
UDF	User-defined function
UHC	Unverbrannte Kohlenwasserstoffe (unburned hydrocarbons)

1 Einleitung

1.1 Motivation

Aufgrund der zunehmenden Globalisierung wächst auch das weltweite Handelsvolumen. Ein großer Teil des globalen Transports wird dabei durch den Schiffsverkehr bewältigt. Dies macht die zivile Schifffahrt, mit über 10 Mrd. Tonnen transportierten Gütern pro Jahr in 2014 [52], nach Industrie und Straßenverkehr zum drittgrößten Verursacher von Stickoxiden (NO_x) weltweit [49]. CO₂-Emissionen aus der Schifffahrt betragen etwa 3% des globalen Ausstoßes [39]. Zudem tragen Schwefeloxid-Emissionen (SO_x) auf offener See signifikant zur Absenkung des pH-Wertes auf viel befahrenen Schifffahrtswegen bei und beeinflussen damit das marine Ökosystem [30].

Die Regulierung und Reglementierung von Emissionen auf offener See und in küstennahen Gebieten erfolgt durch die Internationale Maritime Organisation (IMO), eine Unterorganisation der UNO. Die für 2016 geplante und voraussichtlich 2021 in Kraft tretende Verschärfung der Emissionsrichtlinien durch die Vorschrift IMO Tier III sieht eine Vermeidung von SO_x-Emissionen sowie eine Absenkung der Stickoxidemissionen um 75% im Vergleich zu der bisher gültigen Reglementierung vor [39]. Diese Regelung gilt vorerst jedoch nur in küstennahen Gebieten Nordamerikas und Europas. Für die Zukunft ist eine sukzessive Verschärfung der Richtlinien, eine Erweiterung auf andere Emissionen wie das Treibhausgas CO₂, sowie eine Ausweitung auf weitere Gebiete geplant.

Die Senkung bzw. Vermeidung von SO_x -Emissionen kann laut einer Studie der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) [2] durch den Einsatz alternativer, schwefelfreier Brennstoffe wie Erdgas, Ethanol, DME oder Methanol vorangetrieben werden. Zudem kann der Einsatz regenerativ erzeugter Brennstoffe überproportional zur Senkung der CO_2 -Emissionen beitragen. Als vielversprechendster Energieträger wird in den kommenden Jahren Erdgas gesehen. Grund dafür ist einerseits das massiv gewachsene Angebot und die daraus resultierenden niedrigen Gaspreise. Andererseits wird durch das günstige C/H-Verhältnis bei der Verbrennung von Erdgas im Vergleich zu Diesel ca. 25% weniger CO_2 freigesetzt [104]. Zudem können auch die NO_x-Emissionen durch die im Vergleich zum Diesel leicht niedrigeren Flammentemperaturen gesenkt werden.

Erdgas wird heute hauptsächlich in Otto-Gasmotoren verwendet, in denen ein homogenes Erdgas/Luft-Gemisch mittels einer Zündkerze entflammt wird. Aufgrund des lokal begrenzten Energieeintrags der Zündkerze ist jedoch eine Zündung von mageren Gemischen über λ =1.8 nicht zuverlässig möglich. Eine Möglichkeit, diese Limitierung zu umgehen, bieten Dual-Fuel (DF) Motoren. Bei diesen wird eine kleine Menge Diesel als Zündquelle in das verdichtete Erdgas/Luft-Gemisch eingespritzt, wodurch magere Gemische bis zu λ =2.3 noch zuverlässig gezündet werden können [27]. Dieses Motorkonzept ist jedoch mit einigen Nachteilen verbunden. Das Potenzial für zukünftige Effizienzsteigerung durch Erhöhung des Mitteldrucks ist wegen der Klopfneigung des homogenen Gemisches begrenzt. Auch die Drosselverluste während des Ladungswechsels wirken sich im Teillastbereich negativ auf die Effizienz aus. Vor allem aber führen Ventilüberschneidung und Flammenlöschen des mageren Gemisches an der Wand zu einem signifikanten Erdgas-Schlupf von bis zu 6.7 g/kWh [3]. Diesen gilt es zu vermeiden, da Methan, der Hauptbestandteil von Erdgas, über eine 100-Jahres-Betrachtung ein 28 mal höheres Treibhauspotential als CO2 aufweist [3, 94] und durch katalytische Oxidation kaum aus dem Abgas entfernt werden kann.

Hochdruck-Direkteinblasung von Erdgas mit Dieselpilotzündung (highpressure dual-fuel - HPDF) kann, im Gegensatz zu homogener Vormischung, eine räumlich begrenzte Mischzone erzeugen und somit Methan-Emissionen aufgrund von Schlupf und Quenching vermindern. Zudem sind dadurch unter dieselmotorischen Randbedingungen höhere Wirkungsgrade erreichbar, ohne dass die Gefahr des Klopfens besteht [28]. Im Gegensatz zu homogen betriebenen Otto- oder DF-Gasmotoren bietet diese Technologie zudem ein Höchstmaß an Flexibilität in Bezug auf Brennstoffqualität sowie Vormischgrad und Zündzeitpunkt [20,57].

1.2 Das HPDF-Brennverfahren

Laut Karim [41] bezieht sich der Begriff Dual-Fuel Motor im Allgemeinen auf einen Motor mit Kompressionszündung, in welchem gleichzeitig zwei, hinsichtlich ihrer Zündwilligkeit völlig verschiedene Brennstoffe, in unterschiedlichen Anteilen verbrannt werden. Durch die Selbstzündung des sogenannten Pilotkraftstoffs wird der zündunwillige Hauptkraftstoff, welcher für einen Großteil der bei der Verbrennung freigesetzten Energie verantwortlich ist, entflammt. Nach der Art der Gemischbildung des Hauptkraftstoffs kann zwischen DF Motoren mit externer Gemischbildung und jenen mit Hochdruck-Direkteinblasung (HPDF) unterschieden werden.

Bei HPDF Motoren wird der Hauptkraftstoff unter hohem Druck direkt in den Brennraum eingedüst und durch Interaktion mit dem Pilotkraftstoff gezündet. Der Anteil des Pilotkraftstoffs an der gesamten Energiemenge liegt dabei typischerweise im einstelligen Prozentbereich. Im Unterschied zum klassischen Dieselmotor können durch die Variation der Einblaszeitpunkte von Haupt- und Pilotkraftstoff der Vormischgrad und der Zündzeitpunkt unabhängig voneinander variiert werden. Dieser zusätzliche Freiheitsgrad erlaubt eine gezielte Beeinflussung des Brennverlaufs. Der Einblasdruck muss, im Gegensatz zum DF Motor mit externer Gemischbildung, jedoch über den im Brennraum auftretenden Spitzendrücken liegen. Für Erdgas als Hauptbrennstoff wurden in der Vergangenheit Drücke bis 600 bar angewendet [54]. Aufgrund des sich dadurch einstellenden hohen Druckverhältnisses zwischen Düse und Brennraum bildet sich ein unterexpandierter Strahl aus.

Hodgins, Gunawan und Hill [35] haben im Jahr 1992 erstmals ein Konzept für das HPDF-Brennverfahren vorgestellt. Der Schlüssel dafür war ein neu entwickelter Hochdruckinjektor für die simultane Erdgasund Dieseleinblasung. Erste Tests an einem Einzylindermotor zeigten das hohe Potenzial des Brennverfahrens hinsichtlich der Reduktion von Partikel- (PM), NO_x- und CO₂-Emissionen im Vergleich zum Dieselbetrieb bei annähernd gleicher Effizienz [36]. Weitere Optimierungen hinsichtlich Effizienz, Gasdruck und Emissionsverhalten wurden bis zum Jahr 2002 ausschließlich an einem Zweitakt-Versuchsmotor durchgeführt [17, 18, 28]. McTaggart-Cowan et al. untersuchten das HPDF Konzept ab 2003 an einem Viertaktmotor hinsichtlich einer NO_x-Reduktion durch gekühlte Abgasrückführung (AGR) [55]. Die Untersuchungen zeigen ein massives Reduktionszpotenzial, wobei die NO_x-Emissionen unabhängig von Last und Drehzahl in einem weiten Bereich linear mit der AGR-Rate korrelieren. Nachteilig wirkt sich dieses Vorgehen jedoch auf das Emissionsverhalten von Kohlenmonoxyd (CO) und unverbrannten Kohlenwasserstoffen (unburned hydrocarbons - UHC) aus [53]. Der Einfluss der Brennstoffzusammensetzung auf den Brennverlauf und das Emissionsverhalten wurde von McTaggart-Cowan durch Zugabe von Ethan, Propan, Wasserstoff und Stickstoff zu Erdgas experimentell untersucht [57, 58]. Die Ergebnisse zeigen, dass diese Additive keinen signifikanten Einfluss auf die Leistung oder den Brennstoffverbrauch des Motors haben. Die UHC-Emissionen werden im Fall aller untersuchten Additive durch verbessertes Zünd- oder Brennverhalten reduziert. Die PM-Emissionen werden durch Zugabe von Ethan und Propan erhöht, jedoch durch Stickstoff oder Wasserstoff im Brennstoff praktisch eliminiert. Durch die Erhöhung des Gasdrucks bis hin zu 600 bar ist laut den experimentellen Untersuchungen von McTaggartCowan eine signifikante Reduktion der PM-Emissionen sowie eine deutliche Steigerung der Effizienz möglich [54,56]. Die sich bei gleichbleibender Last und höheren Drücken ergebende kürzere Einblasdauer wirkt sich negativ auf die Druckanstigsraten im Brennraum aus, welche jedoch durch kleinere Düsenbohrungen bzw. durch Abgasrückführung reduziert werden können [54]. Faghani et al. [20] untersuchten den Einfluss des Gas-Vormischgrads anhand der Variation das Einblasbeginns zwischen Gas und Diesel. Sofern der Einblasbeginn des Gases vor dem Einblasbeginn des Diesels liegt, wird die Mischung zwischen Gas und Luft soweit verbessert, dass unabhängig von der AGR-Rate die PM-Emissionen auf ein Minimum reduziert werden. Durch das lokale Übermischen steigt der Methanschlupf dabei jedoch signifikant an. Dem kann durch eine globale Anfettung im Brennraum entgegengewirkt werden. Auf Basis dieser Erkenntnisse untersuchte Faghani die Aufteilung der Gaseinblasung in eine Haupteinblasung und eine späte Nacheinblasung, wobei maximal 25% der Gasmasse 1ms nach der Haupteinblasung eingebracht wurde [19]. Bei minimaler Verschlechterung des Wirkungsgrads konnte dabei eine deutliche Reduktion der PM-Emissionen bei gleichbleibenden Methanemissionen erreicht werden.

1.3 Modellierungsansätze

Aus den Freiheitsgraden des Brennverfahrens sowie den in den letzten Jahrzehnten durchgeführten experimentellen Untersuchungen, lassen sich folgende Anforderungen an ein HPDF-Simulationsmodell ableiten:

- Aufgrund der zeitlichen Variation des Einblasbeginns von Gas- und Dieselkraftstoff ergeben sich zahlreiche verschiedene Mischungszustände zwischen den beiden Brennstoffen und der Luft. Eine akkurate Vorhersage der Brennstoffverteilung im Brennraum muss daher durch das Modell zu jedem Zeitpunkt sichergestellt sein.
- Zeitpunkt und Ort der Dieselzündung beeinflussen die Entflammung des Gasstrahls und den weiteren Brennverlauf. Aus diesem Grund ist eine robuste Vorhersage der Selbstzündung eine essentielle Anforderung an das HPDF-Simulationsmodell. Aufgrund der zahlreichen möglichen Mischungszustände zwischen den Brennstoffen und der Luft muss daher auch der Einfluss von Erdgas auf die Dieselzündung berücksichtigt werden.
- Durch die Variation des Einblasbeginns sowie durch eine mögliche Aufteilung der Erdgas- bzw. Dieseleinblasung in eine Vor- und Nacheinblasung, ergeben sich im Brennraum Bereiche in denen Erdgas vorgemischt bzw. nicht-vorgemischt verbrennt. Eine klare zeitliche sowie räumliche Trennung dieser Zustände ist dabei meist nicht möglich. Bei der Verbrennungsmodellierung muss dies berücksichtigt werden.
- AGR ist im HPDF-Brennverfahren ein probates Mittel zur Reduktion von NO_x-Emissionen. Da sich das zurückgeführte Abgas aus Verbrennungsprodukten zusammensetzt, ist eine akkurate Modellie-

rung nur dann möglich, wenn alle relevanten Verbrennungsprodukte im Modell berücksichtigt werden.

- Eine Vorhersage der Abgasemissionen ist für eine Bewertung des Brennverfahrens und den Vergleich verschiedener Betriebsstrategien zwingend erforderlich. Wichtig sind deshalb die korrekte Vorhersage von NO-, NO₂-, CO-, CH₄- sowie weiterer unverbrannter Kohlenwasserstoffe.
- Nahezu alle bisher zum HPDF-Brennverfahren durchgeführten experimentellen und numerischen Untersuchungen beziehen sich auf die Brennstoffkombination Erdgas/Diesel, jedoch ist im HPDF-Brennverfahren grundsätzlich jede Kombination eines zündunwilligen Brennstoffs (z.B. Erdgas, Methanol, Ethanol) mit einem zündwilligen Brennstoff (z.B. Diesel, DME) einsetzbar. Dies gilt es bei der Wahl des Modellierungsansatzes ebenfalls zu berücksichtigen.

Über die letzten Jahrzehnte wurden zur Berechnung des HPDF-Brennverfahrens zahlreiche Simulationsmodelle entwickelt, wobei die oben genannten Anforderungen in den meisten Fällen nur teilweise erfüllt werden konnten. Mtui und Hill [60] beispielsweise gingen bei der Verbrennungsmodellierung auf Basis einer Mischungszeitskala davon aus, dass ihr Forschungsmotor nicht teilvorgemischt betrieben wird bzw. dieser Anteil an der Verbrennung vernachlässigt werden kann. Ouellette und Mtui [60] erweiterten diesen Modellansatz später zwar um eine chemische Limitierung der Verbrennung unter Verwendung einer Zweischrittchemie, beschränkten ihre Simulationen jedoch weiterhin auf minimal vorgemischte Untersuchungen. Auch der chemische Einfluss von Erdgas auf die Dieselzündung blieb in der Modellierung vollkommen unberücksichtigt. Die von Munshi et al. [61] verfolgte, deutlich rechenintensivere Simulationsstrategie auf Basis einer Großstruktursimulation (large eddy simulation - LES) unter Berücksichtigung von detaillierter Chemie und Turbulenz-Chemie-Interaktion, lieferte zwar gute Ergebnisse für den Bereich der nicht-vorgemischten Gasverbrennung, versagte jedoch im teilvorgemischten Bereich völlig [19, 20]. Eine Begründung dafür liefern die Autoren nicht. Wang et al. [99] setzten das ECFM-3Z Modell für HPDF Untersuchungen ein. Das ECFM Modell (extended coherent flame model - ECFM), ein Flamelet Modell für die Berechnung der vorgemischten Verbrennung, basiert auf einer Transportgleichung für die Flammenoberflächendichte und verwendet zur Berechnung der Reaktionsraten eine Zweischrittchemie. Die Erweiterung für den Bereich der nicht-vorgemischten Verbrennung erfolgt durch die Kombination des ECFM Modells mit einem drei-Zonen (3Z) Mischungsmodell auf Zellebene. Die Autoren kalibrierten das Modell anhand eines einzigen Brennverlaufs mit sehr geringem Anteil vorgemischter Verbrennung. Theoretische Überlegungen zeigen, dass die Ergebnisse maßgeblich vom eingesetzten Zündmodell und von der Kalibrierung des Mischungsmodells auf Zellebene abhängen. Dadurch ergibt sich im Modell ein Freiheitsgrad, welcher nicht rein physikalisch begründet werden kann. Zoldak et al. [105] verwendeten einen Ansatz, bei welchem die Reaktionsraten für Zündung und Verbrennung in jeder Zelle direkt auf Basis detaillierter Chemie berechnet werden, um verschiedene Einblasstrategien für das HPDF-Brennverfahren zu untersuchen. Der Vorteil dieser Herangehensweise ist einerseits, dass nicht direkt zwischen den Zuständen Zündung, vorgemsichter- und nicht-vorgemischter Verbrennung unterschieden werden muss und andererseits, dass keine zusätzlichen Modelle zur Emissionsvorhersage nötig sind. Eine Validierung des Modells durch experimentelle Daten wurde von den Autoren nicht durchgeführt.

1.4 Zielsetzung und Struktur der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist es, ein Simulationsmodell zur Vorhersage der Zündung und Verbrennung von unterexpandierten Erdgasstrahlen zu entwickeln, zu validieren und anzuwenden. Die Zündung der Erdgasstrahlen soll mithilfe von Diesel-Pilotstrahlen erfolgen. Die im vorigen Abschnitt genannten Anforderungen an das Modell müssen dabei erfüllt werden. Der Ansatz von Zoldak *et al.* [105] auf Basis detaillierter Chemie wird für die Verbrennungsmodellierung als am vielversprechendsten sowie weitestgehend alternativlos angesehen und daher in dieser Arbeit verfolgt. Bei diesem Ansatz muss im Vergleich zu den anderen vorgestellten Ansätzen einerseits in der Modellierung nicht direkt zwischen den Zuständen Zündung, vorgemsichter- und nicht-vorgemischter Verbrennung unterschieden werden und andererseits werden keine zusätzlichen Modelle zur Emissionsvorhersage benötigt. Beim Ansatz auf Basis detaillierter Chemie wird zunächst zu jedem Zeitpunkt das Strömungs- und Mischungsfeld mithilfe der RANS-Gleichungen berechnet und anschließend in jeder Gitterzelle unter der Annahme eines homogen gerührten, adiabaten Konstantvolumenreaktors der Reaktionsfortschritt ermittelt.

Im Rahmen der Einleitung wurde ein Überblick über die in der Vergangenheit durchgeführten experimentellen und numerischen Arbeiten gegeben. Daraus wurden Anforderungen an das Simulationsmodell sowie ein vielversprechender Simulationsansatz auf Basis detaillierter Chemie abgeleitet. Die physikalischen Grundlagen unterexpandierter turbulenter Freistrahlen und des Zerfalls von Flüssigstrahlen werden in Kapitel 2 beschrieben. Zudem werden in diesem Kapitel die Grundlagen der turbulenten Verbrennung behandelt. Aufbauend auf den physikalischen Grundlagen werden in Kapitel 3 Modelle zu deren Berücksichtigung in einem RANS-CFD-Modell vorgestellt. In Kapitel 4 wird zunächst ein Validierungsexperiment auf Basis einer schnellen Kompressions-Expansionsmaschine (rapid compression expansion machine - RCEM) beschrieben. Daraus werden anschließend Randbedingungen für das Simulationsmodell abgeleitet. In Kapitel 5 erfolgt anschließend die Validierung des nicht reagierenden Gas- und Dieselstrahls anhand des Eindringund Mischungsverhaltens. Da das Know-How der Verbrennungsmodellierung auf Basis detaillierter Chemie im Reaktionsmechanismus steckt, wird in Kapitel 6 zunächst anhand der Dieselzündung in Luft und Erdgas/Luft Atmosphäre eine Untersuchung von Reaktionsmechanismen durchgeführt und mithilfe von Validierungsexperimenten ein Reaktionsmechanismus ausgewählt. Anschließend wird in Kapitel 7 der Einfluss der Methankinetik sowie der Turbulenz-Chemie-Interaktion (TCI) auf den Brennverlauf untersucht. Anschließend wird aufbauend auf den gewonnenen Erkenntnissen eine Vereinfachung des Reaktionsmechanismus für hohe Druck- und Temperaturniveaus vorgestellt. In Kapitel 8 wird das numerische Modell verwendet, um die Gasstrahlverbrennung im Detail zu untersuchen und vorherzusagen. Dazu wird die räumliche Interaktion zwischen Gas- und Dieselstrahl sowie der Gas-Vormischgrad variiert.

2 Theoretische Grundlagen

Dieses Kapitel fasst die physikalischen Grundlagen des HPDF-Brennverfahrens zusammen, auf welchen die in Kapitel 3 beschriebenen Modelle beruhen. Zudem werden in den einzelnen Abschnitten Informationen bereitgestellt, welche zur Interpretation der Ergebnisse nötig ist. In den ersten beiden Abschnitten werden zunächst die Grundlagen der Gasdynamik unterexpandierter Freistrahlen sowie der Zerfall von Flüssigkeitsstrahlen beschrieben. In den weiteren Abschnitten werden die Erhaltungsgleichungen reaktiver Strömungen eingeführt und Phänomene der turbulenten Verbrennung vorgestellt.

2.1 Gasdynamik unterexpandierter turbulenter Freistrahlen

In diesem Abschnitt werden die Grundlagen unterexpandierter turbulenter Freistrahlen behandelt. Um zu verstehen, unter welchen Randbedingungen es zu einer Nachexpansion außerhalb der Düse kommt, werden zuerst kurz einige gasdynamische Grundlagen zusammengefasst, welche in [38,90] im Detail nachgelesen werden können. Darauf aufbauend werden die bei der Nachexpansion auftretenden physikalischen Phänomene anhand des Druckverhältnisses zwischen Düse und Umgebung diskutiert. Abschließend werden empirische Korrelationen zur Beschreibung der Stoßstrukturen bzw. der Eindringtiefe von unterexpandierten turbulenten Freistrahlen vorgestellt.

2.1.1 Gasdynamische Grundlagen

Die Gasdynamik setzt sich mit Strömungen dichteveränderlicher Medien auseinander. Für die Beschreibung der gasdynamischen Vorgänge am unterexpandierten turbulenten Freistrahl wird zunächst von einer quasieindimensionalen, stationären, reibungsfreien, kompressiblen, nicht reaktiven sowie adiabaten Strömung ausgegangen. Ein dimensionsloses Maß dafür, ab welcher Geschwindigkeit eine Strömung als kompressibel betrachtet wird, ist die Machzahl *Ma*. Sie beschreibt das Verhältnis aus Strömungsgeschwindigkeit *u* und Schallgeschwindigkeit *a*.

$$Ma = \frac{u}{a} = \frac{u}{\sqrt{\kappa RT}} \tag{2.1}$$

Werden ideales Gasverhalten und konstante Fluideigenschaften angenommen, so lässt sich die Schallgeschwindigkeit direkt aus dem Isentropenexponenten κ , der spezifischen Gaskonstante R und der Temperatur T der Strömung berechnen. Der Isentropenexponent ist dann über das Verhältnis der Wärmekapazitäten $\kappa = c_p/c_v$ bestimmt. Im Allgemeinen wird eine Strömung für Ma > 0.3 als kompressibel angesehen. Unter den zuvor getroffenen Annahmen lassen sich Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie entlang eines Stromfadens wie folgt formulieren:

$$\dot{m} = \rho u A = \text{const}$$
 (2.2a)

$$p + \rho u^2 = \text{const} \tag{2.2b}$$

$$h + \frac{u^2}{2} = \text{const} \tag{2.2c}$$

Mit diesen Zusammenhängen kann die Strömung des Massenstroms *m* eines Fluids mit spezifischer Enthalpie *h* über eine Fläche *A* beschrieben werden. Erfährt diese Strömung eine Zustandsänderung von Zustand 1 nach Zustand 2, so folgen für ein ideales Gas die thermodynamischen Größen der Isentropenbeziehung

$$\frac{1 + \frac{\kappa - 1}{2}Ma_1^2}{1 + \frac{\kappa - 1}{2}Ma_2^2} = \frac{T_2}{T_1} = \left(\frac{p_2}{p_1}\right)^{\frac{\kappa - 1}{\kappa}} = \left(\frac{\rho_2}{\rho_1}\right)^{\kappa - 1}.$$
(2.3)
Wird diese Strömung isentrop auf eine vernachlässigbar kleine Geschwindigkeit verzögert, sodass u = 0 angenommen werden kann, werden die sich einstellenden Zustandsgrößen als Ruhegrößen bezeichnet und mit Index 0 gekennzeichnet. Für die Ruhegrößen ergeben sich in Abhängigkeit von der Machzahl folgende Zusammenhänge:

$$\frac{T_0}{T} = \left(1 + \frac{\kappa - 1}{2}Ma^2\right) \tag{2.4a}$$

$$\frac{p_0}{p} = \left(1 + \frac{\kappa - 1}{2}Ma^2\right)^{\frac{\kappa}{\kappa - 1}}$$
(2.4b)

$$\frac{\rho_0}{\rho} = \left(1 + \frac{\kappa - 1}{2}Ma^2\right)^{\frac{1}{\kappa - 1}}.$$
(2.4c)

Für Ma = 1 werden diese Zusammenhänge als *kritische Verhältnisse* bezeichnet. Mit diesen Zusammenhängen lässt sich nun, unter Zuhilfenahme der Erhaltungsgleichungen (Gleichung 2.2), der Massenstrom über einen Querschnitt *A* in Abhängigkeit der Ruhegrößen und der Machzahl herleiten:

$$\dot{m} = A \frac{p_0}{\sqrt{T_0}} Ma \left(1 + \frac{\kappa - 1}{2} Ma^2 \right)^{-\frac{\kappa + 1}{2(\kappa - 1)}} \sqrt{\frac{\kappa}{R}}.$$
(2.5)

Der Massenstrom in Gleichung 2.5 wird bei Ma = 1 maximal.

Für eine stationär und reibungsfrei durchströmte Düse ergeben sich dadurch zwei Bedingungen. Wird in der Düse abhängig von Geometrie und Ruhegrößen Ma = 1 erreicht, so muss dies im engsten Querschnitt passieren. Ist der Zustand Ma = 1 erreicht, kann der Massenstrom durch die Düse nur durch Erhöhung des Ruhedrucks p_0 gesteigert werden, nicht jedoch durch die Absenkung des Gegendrucks p_{∞} . Dieses Verhalten der Düse wird als *sperren* bezeichnet.

Für die Gaseinblasung im HPDF-Brennverfahren ergeben sich daraus folgende Erkenntnisse. Ist das Verhältnis aus Gasdruck und Brennraumdruck deutlich größer als das kritische Druckverhältnis bei Ma = 1 in Gleichung 2.4b, so wird der Massenstrom durch die Düse von einem veränderlichen Brennraumdruck nicht beeinflusst.

2.1.2 Strahlcharakteristik

Im nachfolgenden Abschnitt wird eine konvergente, gesperrte Düse mit Ruhedruck p_0 vor der Düse, dem Druck p im engsten Querschnitt und dem Umgebungsdruck p_{∞} weit stromab der Düse betrachtet. Ist das Druckverhältnis p_0/p kleiner als das kritische Druckverhältnis für die gegebenen Randbedingungen, so ist die Strömungsgeschwindigkeit innerhalb der Düse kleiner als die Schallgeschwindigkeit und die resultierende Strahl wird als Unterschallstrahl bezeichnet. Entspricht das Druckverhältnis p_0/p dem kritischen Druckverhältnis, so ist p gleich dem Umgebungsdruck p_{∞} . Diese Konfiguration wird als angepasste Düse bezeichnet. Wird bei einer angepassten Düse der Umgebungsdruck p_{∞} unter den Druck pim Austrittsquerschnitt abgesenkt beziehungsweise der Ruhedruck entsprechend erhöht, so erfolgt eine Druckanpassung außerhalb der Düse. Abhängig vom Druckverhältnis wird der dabei resultierende Düsenstrahl in der Literatur als unterexpandierter oder stark unterexpandierter Strahl bezeichnet. Nachfolgend angegebene Druckverhältnisse am Beispiel von Luft beziehen sich auf einen Isentropenexponenten von $\kappa = 1.4$. Für Methan bzw. Erdgas ergeben sich für die Selben Bereiche leicht andere Werte.

Der Unterschallstrahl ist durch einen ungestörten keilförmigen Kern gekennzeichnet, einer Zone konstanter Geschwindigkeit, in der keine viskose Vermischung mit Umgebungsfluid stattfindet. Dieser Kern ist von einem Bereich umgeben, in welchem eine Vermischung zwischen Strahl und Umgebungsfluid stattfindet. Wenige Düsendurchmesser stromab des Düsenaustritts hat sich der Mischbereich bis zur Mittellinie nach innen ausgebreitet und der Kernbereich verschwindet. Über diesen Punkt hinaus breitet sich der Mischbereich weiter aus und über den Zusammenhang der axialen Impulserhaltung fällt die Geschwindigkeit immer weiter ab. In diesem Teil des Strahls nähern sich die mittleren Geschwindigkeitsprofile einer selbstähnlichen Form an. Ein solcher Strahl existiert im Fall von Luft für ein Düsendruckverhältnis p_0/p_{∞} von 1 bis ca. 1.9. Bei Erreichen des kritischen Druckverhältnisses bildet sich am Düsenausgang ein sehr schwacher, senkrechter Stoß, welcher mit steigendem Druckverhältnis p_0/p_{∞} zu einem System aus schrägen Stößen und Expansionsfächern, sogenannten Stoßzellen, wird. Die Stöße dienen der Druckanpassung innerhalb des Strahls hin zu Umgebungsbedingungen. Der ungestörte Kern der Strömung wird durch die Stoßstrukturen definiert und begrenzt. Die nach innen gerichtete Diffusion des Mischbereichs setzt sich stromab immer weiter fort und führt schließlich zur Auflösung des Stoßkerns. Diese Konfiguration ist in Abbildung 2.1a dargestellt.

Bei einem Düsendruckverhältnis p_0/p_{∞} von mehr als etwa 4.0 (für Luft) beginnt sich die Form der Stoßstruktur in der ersten Stoßzelle zu verändern. Der schräge Stoß, welcher zunehmend flacher wird und sich der Düsenachse nähert, führt nun zu einer immer größeren Strömungsumlenkung. Dadurch nähern sich die Stromlinien der Mittellinie des Strahls in einem Winkel, welcher größer ist als die maximal mögliche Ablenkung durch einen schrägen Stoß. Es entsteht eine sogenannte Mach-Reflexion und ein senkrechter Stoß, auch Mach-Scheibe genannt, bildet sich aus. Weiter stromab löst sich diese Struktur von schrägen Stößen wie im vorigen Absatz beschrieben auf. Der Mischbereich umgibt den Kern, wobei die radiale Diffusion gering ist, so dass der Kern des stark unterexpandierten Strahls länger bestehen kann als bei nur leicht unterexpandierten Strahlen. Dadurch verschlechtert sich die Mischung im Düsennahbereich. Diese Konfiguration ist in Abbildung 2.1b dargestellt.

2.1.3 Empirische Beschreibung

Für die Charakterisierung unterexpandierter bzw. stark unterexpandierter Freistrahlen wurden in der Vergangenheit zahlreiche empirische Korrelationen entwickelt. Die hier aufgeführten Zusammenhänge stellen eine Auswahl der für Methan bzw. Erdgas gültigen Korrelationen dar und sind unter der Annahme idealen Gasverhaltens aufgestellt worden. Für weitere Beziehungen wird auf die Literatur verwiesen [7,13,66]

Niessen [64] und Young [102] formulierten empirische Korrelationen für den Abstand *l* der ersten Mach-Scheibe vom Düsenaustritt. Die beiden Korrelationen unterscheiden sich im Wesentlichen nur durch ihren Vor-



(b) stark unterexpandierter Strahl

Abbildung 2.1: Veranschaulichung der Stoßstruktur in unterexpandierten und stark unterexpandierten Strahlen nach [16].

faktor *C*, welchen Niessen konstant zu *C* = 0.667 setzte, während Young einen von κ abhängigen Vorfaktor definierte und dessen Gültigkeit für verschiedene Gase zeigte. Die Formulierung nach Young ist in Gleichung 2.6 dargestellt.

$$\frac{l}{d} = C(\kappa) \sqrt{\frac{p_0}{p_\infty}}$$
(2.6a)

$$C(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2.2}} \left[\kappa(\kappa+1) \right]^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\kappa+1}{2\kappa} \right)^{\frac{1}{2(\kappa-1)}} \left(\frac{4\kappa}{(\kappa+1)^2} \right)^{\frac{\kappa}{2(\kappa-1)}}$$
(2.6b)

Für die empirische Ermittlung der Eindringtiefe des transienten unterexpandierten Freistrahls haben Hill und Ouellette [33,67] experimentelle und numerische Untersuchungen für die Eindüsung von Methan in Luft durchgeführt. Sie konnten die Annahme von mehreren Autoren bestätigen und zeigen, dass sich der Strahl ab einer Eindringtiefe von etwas $20 \cdot d$ stromab der Düse selbstähnlich verhält und die Stoßstrukturen aus dem Düsennahbereich dann keinen Einfluss mehr haben. Bei Selbstähnlichkeit nimmt das Verhältnis aus maximalem Strahldurchmesser zur Eindringtiefe d/x einen konstanten Wert von 0.25 ± 0.05 an. Hill und Ouellette beschreiben die zeitliche Änderung der Eindringtiefe auf Basis einer Impulsanalyse mit

$$x = \Omega \left(\frac{\dot{M}}{\rho_{\infty}}\right)^{\frac{1}{4}} t^{\frac{1}{2}}.$$
(2.7)

Die Koordinate x entlang der Düsenachse bezeichnet die Eindringtiefe und Ω bezeichnet eine Konstante, welche sich aus dem Verhältnis d/xherleiten lässt und experimentell gestützt zu 3 ± 0.1 festgesetzt wurde. Die Eindringtiefe wird nicht direkt mit den Ruhegrößen korreliert, sondern mit der Impulsstromdichte \dot{M} am Düsenaustritt, welche wie folgt formuliert werden kann:

$$\dot{M} = u^2 \rho A. \tag{2.8}$$

Diese Korrelationen werden in Abschnitt 5 für erste Abschätzungen vor Beginn der Modellierung der Gaseinblasung verwendet.

2.2 Zerfall von Flüssigstrahlen

Die Einspritzung des flüssigen Dieselkraftstoffs in den Brennraum erfolgt unter hohen Drücken von bis zu 2500 bar [77]. Der dadurch hervorgerufene Zerfall in Tropfen und deren anschließende Verdampfung haben einen großen Einfluss auf den Verlauf der Mischung mit der Luft, die Selbstzündung sowie die Verbrennung. Nach erfolgter Einspritzung müssen Verdampfung sowie Gemischbildung in kürzester Zeit (wenige Millisekunden) abgeschlossen sein. Dafür ist ein sehr schneller Zerfall des Flüssigstrahls in viele kleine Tropfen zur Maximierung der Oberfläche Erforderlich. Die Limitierung der Tropfenverdampfung ist dabei durch die Enthalpiezufuhr in den Strahl (entrainment) und nicht durch den Tropfenzerfall selbst bedingt [62]. Tropfenverdampfung und Gemischbildung laufen dabei weitestgehend parallel ab. Unter gegebenen geometrischen Randbedingungen lässt sich die Gemischbildung maßgeblich durch die Erhöhung der strahlinduzierten Turbulenz verbessern, was durch eine Erhöhung des Einspritzdrucks erreicht werden kann. Eine Erhöhung des Einspritzdrucks verbessert nicht nur die Einmischung von Luft in den Brennstoffstrahl, sondern fördert auch den Zerfall in kleinere Tropfen.

In der Literatur [23,78,79,93] wird der Zerfall von Flüssigstrahlen grundlegend in einen primären und einen sekundären Zerfall unterteilt. In Abbildung 2.2 sind der Strahlzerfall sowie die Düseninnenströmung am Beispiel eines Dieselstrahls dargestellt. Der Primärzerfall umfasst den Aufbruch des zusammenhängenden Flüssigkeitsstrahls in einzelne Tropfen. Die weitere Aufspaltung der Tropfen wird als Sekundärzerfall bezeichnet. Beide Prozesse lassen sich anhand einer dimensionslosen Kennzahl, der Weber-Zahl *We*, charakterisieren. Diese ist an einem Tropfen als das Verhältnis aus Trägheitskraft zur Oberflächenkraft definiert

$$We = \frac{\rho_g d_l U^2}{\sigma},\tag{2.9}$$

wobei ρ_g die Dichte der Gasphase, d_l eine charakteristische Länge (z.B. den Düsendurchmesser), U die relative Geschwindigkeit der Flüssigphase zur umgebenden Gasphase und σ die Oberflächenspannung der Flüssigphase beschreiben.

2.2.1 Primärzerfall

Der primäre Strahlzerfall kann in die drei Regime Rayleigh-Zerfall, windinduzierter Zerfall und Atomisierung eingeteilt werden [93]. Der Rayleigh-Zerfall beruht hauptsächlich auf dem Effekt der Oberflächenspannung, die zu einem Zerreißen des Flüssigkeitsstrahls bei niedrigen Geschwindigkeiten bzw. Weber-Zahlen führt. Bei einer Zunahme der Differenzgeschwindigkeit zwischen Strahl und Umgebung spielen aerodynamische Effekte wie die Kelvin-Helmholz-Instabilität eine zunehmende Rolle. Dabei können Tropfen mit einem deutlich kleineren Durch-



Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Düseninnenströmung und des Strahlzerfalls von Flüssigstrahlen nach [23].

messer als jenem der Düse entstehen. Gleichzeitig nimmt die Eindringtiefe des zusammenhängenden Flüssigkeitsstrahls ab. Bei einer weiteren Erhöhung der Geschwindigkeit, und damit der Weber-Zahl, beginnt der Aufbruch der Strahloberfläche direkt an der Düsenöffnung, wobei ein kurzer flüssiger Strahlkern bestehen bleiben kann. Die initiale Tropfengröße liegt im Bereich des Düsendurchmessers. Für die Dieseleinspritzung mit hohen Einspritzdrücken und Einspritzgeschwindigkeiten ist das Regime der Atomisierung zutreffend.

Obwohl anhand der Weber-Zahl eine anschauliche qualitative Einteilung des Primärzerfalls in die drei genannten Regime möglich ist, reicht für eine quantitative Beschreibung des Primärzerfalls die Weber-Zahl allein nicht aus. Zur Berücksichtigung aller Einflussfaktoren und für eine vollständige Charakterisierung werden häufig die Reynolds-Zahl in der Flüssigphase, die Ohnesorge-Zahl, welche das Verhältnis von Zähigkeitskräften zu Oberflächenspannung beschreibt, sowie das Dichteverhält-



Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Zusammenhangs der wichtigsten Einflussgrößen auf den Primärzerfall nach Stiesch [93].

nis von Gas und Flüssigkeit verwendet. Der Zusammenhang dieser drei Größen ist in Abbildung 2.3 schematisch veranschaulicht.

2.2.2 Sekundärzerfall

Nach dem Primärzerfall sind die Tropfen in der Regel noch zu groß, um direkt und vollständig zu verdampfen. Es folgt ein weiterer Zerfall der Tropfen. Dieser sogenannte Sekundärzerfall ist von aerodynamischen Kräften und deren Gleichgewicht mit der Oberflächenspannung der einzelnen Tropfen bestimmt. Konkret passiert der Tropfenzerfall dann, wenn die auf den Tropfen wirkenden Kräfte aufgrund des Luftwiderstands jene der Oberflächenspannung übersteigen. In diesem Fall reicht zur quantitativen Beschreibung der Zerfallsmechanismen die Weber-Zahl allein aus. Eine Einteilung anhand der Weber-Zahl nach Pilch und Erdmann [71] mit typischen Werten für einen Dieselspray nach Krüger [47] ist in Abbildung 2.4 dargestellt. Im Falle der Dieseleinspritzung sind in der Nähe der Düsenöffnung die relativen Geschwindigkeiten und damit die Weber-Zahlen der Tropfen nach dem Primärzerfall noch sehr hoch, sodass es vorwiegend zu einer sogenannten chaotischen Zerlegung kommt. Mit zunehmendem Abstand von der Düse sinkt die Weber-Zahl sowohl aufgrund der Verringerung des Tropfendurchmessers als auch aufgrund der Abnahme der Tropfengeschwindigkeit. So werden im Verlauf der Eindüsung zum Teil auch die anderen Zerfallsmechanismen durchlaufen.



Abbildung 2.4: Regime des Tropfenzerfalls nach Pilch und Erdmann [71] mit den dazugehörigen Bereichen kritischer Weber-Zahlen für Diesel nach Krüger [47].

2.3 Erhaltungsgleichungen reaktiver Strömungen

Reaktive turbulente Strömungen lassen sich im Allgemeinen mithilfe der Navier-Stokes Gleichungen beschreiben. Unter Vernachlässigung von Volumenkräften (z.B. Gravitation) sowie unter Verwendung der einsteinschen Summenkonvention lassen sich diese wie folgt formulieren [72]. Massenerhaltung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \tag{2.10}$$

Impulserhaltung:

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}$$
(2.11)

Energieerhaltung:

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i h_s}{\partial x_i} = \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij} u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \rho \dot{\omega}_{h_s}$$
(2.12)

Darin beschreibt ρ die Dichte, u die Geschwindigkeit, p den Druck, τ_{ij} den Spannungstensor und h_s die spezifische sensible Enthalpie.

Der Term q_i beschreibt die Wärmestromdichte und ist über die als Fourier'sches Gesetz bekannte Beziehung

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \tag{2.13}$$

definiert, wobe
i λ die thermische Leitfähigkeit und T die Temperatur repräsentiert.

In reaktiven Strömungen bleibt zwar die Gesamtmasse nach Gleichung 2.10 erhalten, jedoch ist der Massenanteil Y_k einer Spezies S_k im Allgemeinen nicht konstant. Zusätzlich zu den Erhaltungsgleichungen ist daher für jede Spezies eine Speziestransportgleichung nötig.

Speziestransport:

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \tag{2.14}$$

Diffusionskoeffizient und Produktionsrate werden dabei mit D_k bzw. $\dot{\omega}_k$ beschrieben.

Der Quellterm $\dot{\omega}_{h_s}$ in Gleichung 2.12 kann dann mithilfe der Änderung der spezifischen Standardbildungsenthalpie $\Delta h_{f,k}^0$ als Summe über alle Spezies nach

$$\dot{\omega}_{h_s} = -\sum_{k=1}^n \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \tag{2.15}$$

berechnet werden.

2.4 Turbulente Verbrennung

Die Verbrennung in turbulenten Strömungen ermöglicht, verglichen mit der laminaren Verbrennung, eine deutliche Erhöhung der Umsatzraten. Für die Verbrennung in motorischen Anwendungen ist die Turbulenz daher eine wichtige Einflussgröße, um eine schnelle Umsetzung des Brennstoffs und damit die heute üblichen Leistungsdichten und Wirkungsgrade zu erreichen. Im Rahmen dieser Arbeit wird die turbulente Verbrennung von gasförmigem Dieselkraftstoff und Erdgas mit Luft untersucht.

Anhand des Äquivalenzverhältnisses ϕ lässt sich ein Verbrennungsvorgang als magere ($\phi < 0$), stöchiometrische ($\phi = 0$) oder fette ($\phi > 0$) Verbrennung beschreiben. ϕ ist als das Verhältnis der stöchiometrischen Luft- und Brennstoffmassen zum tatsächlichen Verhältnis dieser Massen definiert.

$$\phi = \frac{1}{\lambda} = \frac{(m_L/m_B)_{\rm st}}{(m_L/m_B)}.$$
 (2.16)

Häufig wird anstelle von ϕ auch dessen Kehrwert, die Luftzahl λ , verwendet.

Des weiteren kann eine Unterscheidung in vorgemischte bzw. nichtvorgemischte Verbrennung vorgenommen werden. Im Fall der vorgemischten Verbrennung werden Brennstoff und Oxidator zuerst technisch vorgemischt und reagieren anschließend miteinander, während im Fall der nicht-vorgemischten Verbrennung Mischung und Reaktion weitestgehend gleichzeitig ablaufen. Im Rahmen der in dieser Arbeit durchgeführten Untersuchungen treten im Brennraum, abhängig von den Einblaszeitpunkten für Diesel und Erdgas, sowohl Bereiche mit fetter und magerer, als auch mit vorgemischter und nicht-vorgemischter Verbrennung auf. Eine möglichst allgemeingültige, theoretische Charakterisierung der HPDF-Verbrennung wird in den nächsten Abschnitten vorgenommen.

2.4.1 Vorgemischte turbulente Verbrennung

Die vorgemischte Verbrennung zeichnet sich im Allgemeinen dadurch aus, dass Brennstoff und Oxidator vor einer chemischen Reaktion vollständig miteinander gemischt werden. Während der vorgemischten Verbrennung müssen jedoch Verbrennungsprodukte und unverbranntes Gemisch weiterhin gemischt werden. Die Verbrennung lässt sich anhand des Borghi-Peters-Diagramms (Abbildung 2.5) nach [70] in Abhängigkeit von den vorherrschenden turbulenten Bedingungen anschaulich in verschiedene Regime unterteilen. Auf der x-Achse ist im Diagramm das Verhältnis aus der turbulenten Längenskala lt und der laminaren Flammendicke l_f aufgetragen, während die y-Achse das Verhältnis aus turbulenter Intensität u' und laminarer Flammengeschwindigkeit s_1 abbildet. Die einzelnen Verbrennungsregime können im Borghi-Diagramm mithilfe von Iso-Linien der turbulenten Reynolds-Zahl Ret, der turbulenten Damköhler-Zahl Dat und der turbulenten Karlovitz-Zahl Kat abgegrenzt werden. Diese dimensionslosen Kennzahlen lassen sich wie folgt berechnen:

$$Re_{t} = \frac{\text{Trägheitskräfte}}{\text{Reibungskräfte}} = \frac{u'l_{t}}{s_{l}l_{f}}$$
(2.17)

$$Da_{t} = \frac{\text{turbulente Zeitskala}}{\text{chemische Zeitskala}} = \frac{\tau_{t}}{\tau_{c}} = \frac{s_{l}l_{t}}{u'l_{f}}$$
(2.18)

$$Ka_{t} = \frac{\text{chemische Zeitskala}}{\text{Kolmogorov Zeitskala}} = \frac{\tau_{c}}{\tau_{\eta}} = \frac{l_{f}^{2}}{\eta^{2}}.$$
 (2.19)



Abbildung 2.5: Veranschaulichung der Verbrennungsregime für die vorgemischte Verbrennung anhand des Borghi-Diagramms; modifiziert aus [70].

Die turbulente Zeitskala in der turbulenten Damköhler-Zahl bezieht sich auf die makroskopischen Größen der turbulenten Strömung, welche vorwiegend durch geometrische Abmessungen bestimmt werden. Im Gegensatz dazu wird in der turbulenten Karlovitz-Zahl auf die kleinste turbulente Skala (Komogorov Zeitskala) Bezug genommen.

Die sich ergebenden Regime werden nachfolgend mit ihrer im Englischen gebräuchlichen Bezeichnung benannt. Die physikalische Interpretation erfolgt unter der Annahme, dass die turbulente Flammenbürste aus einer Vorwärm- und einer Reaktionszone besteht. Die Reaktionszone wird dabei im Vergleich zur turbulenten Flammenbürste als sehr dünn angenommen [70].

laminar flames:

In laminaren Strömungen mit $Re_t < 1$ ist die Flamme von Turbulenz unbeeinflusst.

wrinkled flamelets:

In diesem Regime können die kleinsten turbulenten Wirbel nicht wir-

kungsvoll mit der laminaren Flammenfront interagieren, da die turbulenten Fluktuationen u' kleiner sind als die laminare Flammengeschwindigkeit s_1 . Diese Zone ist daher für die in dieser Arbeit vorliegende Anwendung von geringer praktischer Relevanz.

corrugated flamelets:

Dieses Regime ist durch $Re_t > 1$ und $Ka_t < 1$ abgegrenzt. Daraus ergibt sich mit $l_f < \eta$, dass die gesamte turbulente Flammenbürste, bestehend aus Vorwärmzone und Reaktionszone, in Wirbeln der Größe der Kolmogorov-Skala (Skala der kleinsten Wirbel) eingebettet ist. Da u' nun größer ist als die laminare Flammengeschwindigkeit s_1 , wird die Flammenfront durch die turbulenten Wirbel leicht gefaltet, was zu einer vergrößerung der Flammenoberfläche führt.

thin reaction zones:

Mit $Ka_t > 1$ sind die kleinsten Wirbel hier kleiner als die turbulente Flammenbürste und können in diese eindringen. Dies führt zu einer Aufdickung der Flammenbürste. In diesem Regime sind die kleinsten Wirbel jedoch noch deutlich größer als die Reaktionszone, wodurch diese Zone dünn bleibt und ihren eindimensionalen Charakter behält.

broken reaction zones:

Die Kolmogorov-Wirbel sind nun nicht nur kleiner als die turbulente Flammenbürste sondern auch kleiner als die Reaktionszone und können mit dieser direkt interagieren. Als Folge daraus kann die Chemie durch turbulente Wirbel beeinflusst werden, was beispielsweise zu lokaler Flammenlöschung führen kann.

Anhand der Damköhler-Zahl können im Diagramm zudem zwei Extrembereiche definiert werden. Dies ist zum einen bei hohen Damköhler-Zahlen der Bereich schneller Chemie bei gewellter, schwach turbulenter Flammenfront und zum anderen bei kleinen Damköhler-Zahlen der Bereich schneller Mischung, in welchem die Annahme eines homogen gerührten Reaktors zutreffend ist.

2.4.2 Nicht-vorgemischte turbulente Verbrennung

Die turbulente, nicht-vorgemischte Verbrennung wird durch die Mischung von Brennstoff und Oxidator gesteuert. Der Mischungsprozess wird dabei maßgeblich durch die großskaligen Wirbel der Strömung beeinflusst [48].

Die Charakterisierung der nicht-vorgemischten Verbrennung ist im Vergleich zur vorgemischten Verbrennung deutlich weniger anschaulich. Einerseits ist die Verbrennung zwar primär durch den Mischungsprozess limitiert, kann aber im Fall sehr schneller Mischung oder sehr langsamer Chemie auch chemisch limitiert und damit lokal vorgemischt ablaufen. Der Mischungsprozess ist dabei stark von der technischen Umsetzung und von lokalen und globalen Strömungsbedingungen abhängig [72]. Zudem ist die Definition von dimensionslosen Kennzahlen deutlich schwieriger als für die vorgemischte Verbrennung, da zum einen keine klassische Flammenausbreitung stattfindet und zum anderen die Flammendicke sowie der Reaktionsfortschritt stark von lokalen Strömungsbedingungen abhängt.

Ein Vorschlag für eine möglichst allgemeine Beschreibung der Verbrennungsregime in Diffusionsflammen wurde von Poinsot und Veynante [72] postuliert und ist in Abbildung 2.6 dargestellt. Das Konzept basiert wie bei der vorgemischten Verbrennung auf der turbulenten Damköhler-Zahl, welche sich im nicht-vorgemischten Fall zu

$$Da_{\rm t} = \frac{{\rm turbulente Zeitskala}}{{\rm chemische Zeitskala}} = \frac{\tau_{\rm t}}{\tau_{\rm c}} \approx 2\sqrt{Re_{\rm t}}Da_{\rm fl}$$
 (2.20)

berechnen lässt. Die nachfolgend verwendeten, tiefgestellten Abkürzungen beziehen sich auf die Flamme (flame - fl), die Auslöschung (extinction - ext) sowie die Annahme einer lokal laminaren Flammenstruktur (laminar flame approach - lfa).

Die turbulente Reynolds-Zahl $Re_t = (u'l_t)/\nu$ ist über die kinematische Viskosität ν definiert und die lokale Damköhler-Zahl der nichtvorgemischten Flammenstruktur $Da_{\rm fl} \approx 1/(\chi_{\rm st}\tau_{\rm c})$ wird über die skalare Dissipationsrate einer stöchiometrischen Mischung $\chi_{\rm st}$ approximiert [72].



Abbildung 2.6: Veranschaulichung der Verbrennungsregime für die nicht-vorgemischte Verbrennung anhand des Diagramms nach Poinsot und Veynante [72]. Die verwendeten, tiefgestellten Abkürzungen beziehen sich auf die Flamme (flame - fl), die Auslöschung (extinction - ext) sowie die Annahme einer lokal laminaren Flammenstruktur (laminar flame approach lfa).

Damit lassen sich vier Verbrennungsregime ableiten, wobei einer diffusiv brennenden Fackel (z.B. einem Diesel- oder Gasstrahl) global nicht ein Regime zugeordnet werden kann, sondern lediglich einzelne lokale Positionen der Flamme damit beschreibbar sind.

laminar:

Für $Re_t < 1$ kann eine laminare Flammenstruktur angenommen werden, welche von turbulenten Effekten unbeeinflusst ist.

extinction:

Für kleine Damköhler-Zahlen, welche einer sehr langsamen chemischen Umsetzung entsprechen, führen große turbulente Re-Zahlen zu einem Auslöschen der Flamme (extinction - ext).

flamelet:

Sobald die Chemie im Vergleich zur Mischung sehr schnell wird ($Da_t > Da_{lfa}$), kann lokal eine laminare Flammenstruktur angenommen werden (laminar flame approach - lfa).

unsteady effects:

Ist die turbulente Damköhler-Zahl größer als der Schwellwert unter dem Löschung auftritt, jedoch kleiner als jene, ab der eine laminare Flammenstruktur angenommen werden kann ($Da_{lfa} > Da_t > Da_{ext}$), befindet man sich in einem Bereich, welcher von instationären Strömungseffekten dominiert wird.

2.5 HPDF-Verbrennung

Bei der Direkteinblasung von Erdgas in den Brennraum und der Fremdzündung mittels Diesel-Pilotstrahl treten, abhängig von den Einblaszeitpunkten, sowohl Bereiche vorgemischter als auch nichtvorgemischter turbulenter Verbrennung auf. Eine lokale Einteilung der Verbrennung in die einzelnen Verbrennungsregime der vorgemischten bzw. nicht-vorgemischten Verbrennung ist zwar grundsätzlich denkbar, jedoch für eine globale Charakterisierung der Verbrennung wenig sinnvoll. Mit Blick auf die zuvor beschriebenen Verbrennungsregime lässt sich die Verbrennung jedoch sowohl für die vorgemischte als auch für die nicht-vorgemischte Verbrennung anhand der turbulenten Damköhler-Zahl in verschiedene Bereiche aufteilen. Auch wenn zu einem bestimmten Zeitpunkt lokal unterschiedliche Damköhler-Zahlen auftreten, kann global zu jedem Zeitpunkt ein dominierender Verbrennungszustand identifiziert werden. Allgemein gilt, dass bei sehr kleinen turbulente Damköhler-Zahlen ($Da_t << 1$, bzw. $\tau_t << \tau_t$) die Mischung viel schneller erfolgt als die chemische Reaktion und der Verbrennungsfortschritt dadurch chemisch limitiert ist. Umgekehrt sind bei sehr großen turbulenten Damköhler-Zahlen ($Da_t >> 1$, bzw. $\tau_t >> \tau_c$) die chemischen Reaktionen viel schneller als die Mischung, wodurch sich eine Limitierung des Verbrennungsfortschritts durch den Mischprozess ergibt. Nachfolgend wird eine solche Charakterisierung für die HPDF-Verbrennung anhand des Brennverlaufs vorgenommen.

Abbildung 2.7 zeigt einen generischen Verlauf der Wärmefreisetzungsrate (heat release rate - HRR) der HPDF-Verbrennung. Dieser lässt sich anhand der Damköhler-Zahl in die folgenden Abschnitte einteilen:



Abbildung 2.7: Charakterisierung eines generischen HPDF-Brennverlaufs anhand der Damköhler-Zahl.

Zündung ($Da_t \ll 1$):

Während der Selbstzündung des Diesels limitiert die langsame Zündchemie den Verbrennungsfortschritt. In diesen Bereichen ist daher die Abbildung der chemischen Vorgänge entscheidend, während turbulente Mischungsprozesse eine eher untergeordnete Rolle spielen. Eine ausführliche Untersuchung der Zündkinetik erfolgt deshalb in Kapitel 6. Die Entflammung des Gasstrahls durch heiße Dieselprodukte ist hingegen vielmehr durch die geometrische Interaktion der Strahlen beeinflusst und limitiert als durch chemische Vorgänge.

vorgemischte Verbrennung ($Da_t \ge 1$):

Der Anteil des Gasstrahls, welcher zum Zeitpunkt kurz nach der Entflammung auf molekularer Ebene bereits mit ausreichend Luft gemischt ist, brennt teilweise vorgemischt ab. Ob sich hier eine kinetische Limitierung des Verbrennungsfortschritts ergibt, ist maßgeblich von der strahlinduzierten Turbulenz und den Reaktionsgeschwindigkeiten abhängig. Eine gute Abbildung der Wechselwirkung zwischen Turbulenz und Chemie (TCI) ist deshalb in diesem Bereich sehr wichtig. Dieser Abschnitt des Brennverlaufs wird in Kapitel 7 im Detail untersucht.

nicht-vorgemischte Verbrennung ($Da_t >> 1$):

Die Phase der Diffusionsverbrennung wird durch den turbulenten Transport von Brennstoff und Luft zur Reaktionszone bestimmt und beginnt typischerweise nachdem die Verbrennung der teilweise vorgemischten Zonen abgeschlossen ist. Aufgrund der fortgeschrittenen Verdichtung und Verbrennung sind die Temperaturen nun deutlich höher als während der vorgemsichten Verbrennung. Dies führt zu einer Beschleunigung der chemischen Vorgänge und insgesamt zu einer mischungskontrollierten Verbrennung. In diesem Bereich ist daher eine korrekte Abbildung der Mischungsvorgänge entscheidend. Diese werden für den Fall der nichtreagierenden Strömung in Abschnitt 5 untersucht.

Ausbrand ($Da_t >> 1 \rightarrow Da_t < 1$):

Mit dem Ende der Gasinjektion und der damit einhergehenden Abnahme des Strahlimpulses nimmt die treibende Kraft für die Mischung innerhalb kurzer Zeit ab. Weiterhin liegt zwar eine stark mischungslimitierte Verbrennung vor ($Da_t >> 1$), die Umsatzraten nehmen jedoch aufgrund der reduzierten Einmischung deutlich ab. Mit fortschreitender Expansion nehmen Druck und Temperatur im Brennraum ab, sodass die Chemie langsamer wird und sich ein Übergang zu $Da_t < 1$ ergibt.

3 Modellierung

Aufbauend auf den in Kapitel 2 beschriebenen theoretischen Grundlagen und physikalischen Phänomenen, werden in diesem Kapitel Modelle zur Beschreibung dieser vorgestellt.

3.1 Dieselspray

Die Aufgabe der Spray-Modellierung ist es, die in Kapitel 2.2 beschriebenen physikalischen Vorgänge des primären und sekundären Strahlzerfalls für den Diesel-Pilotstrahl möglichst akkurat und mit geringem Rechenaufwand nachzubilden. Für die Beschreibung der flüssigen Tropfen wird ein Lagrange-Ansatz verwendet. Die zeitliche Entwicklung der Geschwindigkeit eines Einzeltropfens ist durch

$$\rho_{\rm l} V_{\rm d} \frac{du}{dt} = F_{\rm drag} + F_{\rm g} = C_D A \frac{\rho_{\rm g} |U|}{2} U + \rho_{\rm l} V_{\rm d} g$$
(3.1)

mit der Geschwindigkeit u, der Flüssigkeitsdichte ρ_1 und dem Tropfenvolumen V_d gegeben. F_{drag} beschreibt die auf den Tropfen wirkenden Widerstandskräfte, welche aus der Tropfen-Frontalfläche A, der Dichte des umgebenden Fluids ρ_g , der Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Umgebung U und einer Konstante C_D berechnet werden. F_g berücksichtigt die auf den Tropfen wirkenden Gravitationskräfte auf Basis der Gravitationskonstante g.

Da ein Dieselspray Millionen von Flüssigkeitstropfen unterschiedlicher Größe und Geschwindigkeit enthält, ist es nicht denkbar eine Transportgleichung für jeden dieser Tropfen zu lösen. In der Spray-Modellierung werden daher Tropfen ähnlicher Größe und Geschwindigkeit zu Tropfenansammlungen, sogenannten Parcels, zusammengefasst. Parcels werden dann wie Einzeltropfen behandelt und transportiert.

3.1.1 Modellierung des Primärzerfalls

Aufgrund der heutzutage üblichen hohen Einblasdrücke in Dieselmotoren von bis zu 2500 bar ergeben sich am Düsenaustritt hohe Strahlgeschwindigkeiten und damit sehr hohe Weber-Zahlen. Die physikalische Beschreibung des Primärzerfalls nach [93] in Kapitel 2.2.1 hat gezeigt, dass in diesem Fall eine Tropfenbildung direkt am Düsenaustritt erfolgt. Der Flüssigkeitsstrahl fächert sich zwar direkt am Austritt durch die starke Wechselwirkung mit dem umgebenden Gas auf, es bleibt jedoch ein Bereich großer diskreter Flüssigkeitspartikel in der Nähe der Düse erhalten.

Reitz [79] modelliert diese Art des Zerfalls indem er am Düsenaustritt Flüssigkeitspakete (sogenannten Blobs) mit einer charakteristischen Größe initialisiert, anstatt am Düsenaustritt einen intakten Flüssigkeitsstrahl anzunehmen. Die Modellierung des Primärzerfalls der Dieseleinspritzung kann mit diesem sogenannten Blob-Modell stark vereinfacht werden. Die initiale Tropfengröße und -geschwindigkeit ergibt sich durch den Massenstrom, die Flüssigkeitsdichte und den Düsendurchmesser. Der Geschwindigkeitsvektor der Tropfen wird mittels einer statistischen Verteilung unter der Vorgabe eines Aufbruchwinkels des Sprays berechnet. Dieser vereinfachte Ansatz ist für die Modellierung des Primärzerfalls der Dieseleinspritzung weit verbreitet und wird so auch in dieser Arbeit verwendet. Der weitere Aufbruch der Tropfen wird durch Modelle des Sekundärzerfalls abgebildet.

3.1.2 Modellierung des Sekundärzerfalls

Aufgrund der hohen Einblasdrücke und der damit verbundenen hohen Weber-Zahlen erfolgt, aufgrund von Kelvin-Helmholz- und Rayleigh-Taylor-Instabilitäten, ein schneller und chaotischer Zerfall der initial eingebrachten Tropfen [79] (siehe Abbildung 2.4). Kelvin-HelmholzInstabilitäten beschreiben das Anwachsen kleiner Störungen an der Tropfenoberfläche aufgrund der Differenzgeschwindigkeit, während unter Rayleigh-Taylor-Instabilitäten die Störungen aufgrund des Dichteunterschieds der beiden Fluide zusammengefasst werden. Der Tropfenzerfall erfolgt als Folge dieser beiden Instabilitäten.

Die Kelvin-Helmholz-Instabilität lässt sich durch die Wellenlänge Λ_{KH} und die Wachstumsrate Ω_{KH} der instabilsten Oberflächenwellen ausdrücken [79].

$$\Lambda_{\rm KH} = \frac{9.02r(1+0.45\sqrt{Oh})(1+0.4Ta^{0.7})}{(1+0.87We^{1.67})^{0.6}}$$
(3.2a)

$$\Omega_{\rm KH} = \frac{0.34 + 0.38We^{0.5}}{(1+Oh)(1+1.4Ta^{0.6})} \sqrt{\frac{\sigma}{\rho_{\rm l}r^3}}$$
(3.2b)

Die Ohnesorge-Zahl $Oh = \sqrt{We}/Re$ eines Tropfens mit Radius r und Oberflächenspannung σ beschreibt den Einfluss der Zähigkeit auf die Deformation des Tropfens. Sie kann als ein Maß für die Art des Strahlzerfalls herangezogen werden, da die kritischen Weber-Zahlen für die Abgrenzung der Zerfallsregime (Abbildung 2.4) eine Funktion der Ohnesorge-Zahl sind. Die Taylor-Zahl $Ta = Oh\sqrt{We}$ kann dann aus Ohnesorge- und Weber-Zahl berechnet werden.

Die Änderungsrate des Tropfenradius *r*, welcher initial durch das Blob-Modell vorgegeben ist, ergibt sich durch

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{r_0 - r_{\rm KH}}{\tau_{\rm KH}} \tag{3.3}$$

mit dem Tropfenradius vor dem Zerfall r_0 , dem nach dem Zerfall resultierenden Kelvin-Helmholz Tropfenradius $r_{\rm KH} = B_0 \Lambda_{\rm KH}$, der charakteristischen Zeit $\tau_{\rm KH} = (3.726B_1r_0)/(\Lambda_{\rm KH}\Omega_{\rm KH})$ sowie den Konstanten B_0 und B_1 . Die Bedingung für den Tropfenzerfall ist jeweils dann gegeben, wenn

$$B_0 \Lambda_{\rm KH} \le r_0 \tag{3.4}$$

erfüllt ist.

Die Modellierung des Zerfalls aufgrund von Rayleigh-Taylor-Instabilitäten basiert auf den Untersuchungen von Bellmann und Pennignton [6]. Sie erfolgt analog zur Modellierung des Zerfalls aufgrund von Kelvin-Helmholz-Instabilitäten. Die Beschreibungen der Wellenlänge $\Lambda_{\rm RT}$ und der Frequenz $\Omega_{\rm RT}$ der Tropfeninstabilität ergibt sich nach Patterson und Reitz [69] zu

$$\Lambda_{\rm RT} = 2\pi \sqrt{\frac{2\sigma}{a\rho_{\rm l}}} \tag{3.5a}$$

$$\Omega_{\rm RT} = \sqrt{\frac{2a}{3}} \left(\frac{a\rho_{\rm l}}{3\sigma}\right)^{0.25},\tag{3.5b}$$

worin die Tropfenbeschleunigung

$$a = \frac{3}{8} C_D \frac{\rho_g u_d^2}{\rho_l r} \tag{3.6}$$

ist. Die Änderungsrate des Tropfenradius sowie das Zerfallskriterium werden analog zu den Gleichungen 3.3 und 3.4 formuliert. Die charakteristische Zeit sowie der Tropfenradius für den Tropfenzerfall nach Rayleigh-Taylor sind gegeben durch $\tau_{\text{RT}} = B_2/\Omega_{\text{RT}}$ und $r_{\text{RT}} = 0.5 B_3 \Lambda_{\text{RT}}$. Mit den Konstanten B_2 und B_3 kann daraus ein Zerfallskriterium analog zu dem zuvor beschriebenen formuliert werden.

3.2 Reynolds-Gemittelte Navier-Stokes Gleichungen

Das Lösen der in Abschnitt 2.3 vorgestellten Erhaltungsgleichungen mittels direkter numerischer Simulation (direct numerical simulation - DNS) auf einem diskreten Gitter, dessen Zellgröße klein genug ist um die kleinsten turbulenten Wirbel aufzulösen, liefert die genaueste numerische Beschreibung einer turbulenten Strömung. Die vollständige Auflösung aller turbulenten Wirbelstrukturen ist jedoch, aufgrund der begrenzten Rechenleistung, nur für einfache Geometrien und vergleichsweise langsame Strömungen möglich. Deshalb werden für die Berechnungen in dieser Arbeit die Reynolds-Gemitteleten Navier-Stokes (reynolds-averaged navier-stokes - RANS) Gleichungen verwendet. Diese werden aus den Navier-Stokes Gleichungen durch die Aufteilung jeder Transportgröße f in eine Ensemble gemittelte Komponente \overline{f} und eine fluktuierende Komponente f' gebildet [100]. Für kompressible Strömungen hat sich zudem eine Gewichtung mit der Dichte zur Vermeidung von unerwünschten Produktionstermen durchgesetzt. Dadurch ergibt sich die sogenannte Favre-Mittelung zu

$$\widetilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\overline{\rho}} \tag{3.7}$$

und die Aufteilung einer Strömungsgröße zu $f = \tilde{f} + f'$ mit $\tilde{f'} = 0$.

Durch die Aufteilung und Mittelung ergeben sich in den RANS-Gleichungen, welche in ihrer vollständigen Form in [72] oder [97] nachvollzogen werden können, mehrere ungeschlossene Terme.

Die ungeschlossenen Terme der turbulenten Fluktuationen von Spezies $\overline{\rho u'_i Y'_k}$ bzw. Enthalpie $\overline{\rho u'_i h'_s}$ werden über einen Gradientenansatz

$$\overline{\rho}\widetilde{\mu_i'Y_k'} = -\frac{\mu_t}{Sc_t}\frac{\partial\widetilde{Y_k}}{\partial x_i} \quad \text{bzw.} \quad \overline{\rho}\widetilde{\mu_i'h_s'} = -\frac{\mu_t}{Pr_t}\frac{\partial\widetilde{h_s}}{\partial x_i'}, \quad (3.8)$$

modelliert, worin Pr_t die turbulente Prandtl-Zahl, Sc_t die turbulente Schmidt-Zahl und μ_t die turbulente (dynamische) Viskosität ist. Die turbulente Viskosität beschreibt nach Boussinesq den Transfer von Impuls durch turbulente Wirbel, analog der Beschreibung des Transfers von Impuls durch molekulare Diffusion [34].

Eine Schließung für den Term der Reynolds-Spannungen ($\overline{\rho}u'_iu'_j$) in der Impulserhaltung kann unter Verwendung der turbulenten Viskosität μ_t wie folgt formuliert werden [75]:

$$\overline{\rho}\widetilde{u'_{i}u'_{j}} = -\mu_{t}\left(\frac{\partial\widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial\widetilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial\widetilde{u}_{k}}{\partial x_{k}}\right) + \frac{2}{3}\overline{\rho}k.$$
(3.9)

Neben dem Kronecker-Delta δ_{ij} enthält Gleichung 3.9 die mit Wirbeln assoziierte, massebezogene turbulente kinetische Energie k, welche über $\frac{1}{2}\widetilde{u'_iu'_j}$ definiert ist.

3.3 Turbulenzmodell

Das Schließungsproblem in den RANS-Gleichungen wurde durch die von Boussinesq eingeführte turbulente Viskosität μ_t auf eben diese Größe reduziert. Turbulenzmodelle, welche auf dieser Größe zur Beschreibung der Reynolds-Spannungen basieren, werden allgemein als Wirbelviskositätsmodelle bezeichnet. Diese können nach der Anzahl an Transportgleichungen zur Berechnung von μ_t in algebraische (keine zusätzliche Transportgleichung), Eingleichungsund Zweigleichungs-Turbulenzmodelle unterteilt werden. Für instationäre turbulente Freistrahlen haben sich nahezu ausschließlich Zweigleichungs-Turbulenzmodelle, basierend auf Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie k und die turbulente Dissipationsrate ϵ , durchgesetzt [100]. Nach Jones und Launder [40,72] lassen sich diese Gleichungen wie folgt formulieren:

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}k\right)}{\partial t} \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}k\right)}{\partial x_{i}} = \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{k}}\right) \frac{\partial k}{\partial x_{i}} \right] - \overline{\rho}\widetilde{u_{i}'u_{j}'} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} - \overline{\rho}\epsilon.$$
(3.10)

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\epsilon\right)}{\partial t} \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\epsilon\right)}{\partial x_{i}} = \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\left(\mu + \frac{\mu_{t}}{\sigma_{\epsilon}}\right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_{i}} \right] - C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} \overline{\rho} \widetilde{u'_{i}u'_{j}} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} - C_{\epsilon 2} \overline{\rho} \frac{\epsilon^{2}}{k} + c_{s} S_{\epsilon} \frac{\epsilon}{k} - \overline{\rho} R_{\epsilon}$$

$$(3.11)$$

Vereinfacht ausgedrückt beschreiben diese beiden Gleichungen den Prozess des graduellen Energietransports von den größten zu den kleinsten turbulenten Skalen und der anschließenden Dissipation durch Reibung. Die turbulente Viskosität lässt sich dann aus dem Zusammenhang

$$\mu_{\rm t} = C_{\mu} \rho \frac{k^2}{\epsilon} \tag{3.12}$$

ermitteln. Der Quellterm S_{ϵ} repräsentiert die Wechselwirkungen mit der diskreten Phase (z.B. Dieselspray). In der Formulierung, welche allgemein als Standard *k*- ϵ -Modell bezeichnet wird, wird $R_{\epsilon} = 0$ angenommen. In einer weit verbreiteten Abwandlung dieser Formulierung nach Yakhot und Smith [101], welche als RNG (re-normalization group - RNG) *k*- ϵ -Modell bezeichnet wird, wird R_{ϵ} durch

$$R_{\epsilon} = \frac{C_{\mu}\eta^{3} \left(1 - \eta/\eta_{0}\right)}{\left(1 + \beta\eta^{3}\right)} \frac{\epsilon^{2}}{k} \quad \text{mit} \quad \eta = \frac{k}{\epsilon} \left| \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial \widetilde{u}_{j}}{\partial x_{i}} \right) \right|$$
(3.13)

beschrieben. Gegenüber der Standardformulierung ergeben sich laut den Autoren folgende Vorteile. Zum einen wird die Genauigkeit für schnelle Scherströmungen deutlich verbessert und zum anderen werden dadurch Wirbeleffekte im Modell besser berücksichtigt [68].

Aufgrund der durch Gas- und Dieseleinspritzung in ein quasi ruhendes Medium zu erwartenden hohen Scherströungen, wird in dieser Arbeit das RNG *k*- ϵ -Modell verwendet. Die Modellkonstanten für das Standard bzw. RNG *k*- ϵ -Modell sind in Tabelle 3.1 zusammengefasst. Für Strömungen, in welchen eine erhöhte mittlere Streckungsrate erwartet wird, kann zu deren Berücksichtigung der Wert der Konstante $C_{\epsilon 1}$ angehoben werden [68, 101].

	$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	C_{μ}	σ_ϵ	σ_k	β	η_0
Standard	1.44	1.92	0.09	0.7692	1.0	-	-
RNG	1.42	1.68	0.0845	1.39	1.39	0.012	4.38

Tabelle 3.1: Konstanten des Standard und RNG *k*-*\varepsilon*-Turbulenzmodells.

3.4 Thermische Zustandsgleichung realer Gase

Für einen geschlossenen Satz an Erhaltungsgleichungen wird neben den Gleichungen zur Massen-, Impuls- und Energieerhaltung eine Gleichung benötigt, welche den Zusammenhang zwischen den thermischen Zustandsgrößen beschreibt. In vielen technisch relevanten Problemstellungen ist für die Beschreibung dieses Zusammenhangs die Annahme eines idealen Gasverhaltens gerechtfertigt. Dazu werden die Gasmoleküle als Massepunkte angenommen, welche ausschließlich über ideal elastische Stöße miteinander interagieren. Die kinetische Energie bleibt dabei während des Stoßes vollständig erhalten. Das Eigenvolumen der Moleküle sowie die intermolekularen Kräfte werden vernachlässigt. Bei Annäherung von Druck und Temperatur an die Werte des kritischen Punktes (für Methan bei ca. 190 K und 46 bar) gewinnt der Anteil der anziehenden und abstoßenden Kräfte zwischen den Molekülen jedoch zunehmend an Bedeutung und muss berücksichtigt werden [5]. Im Düsennahbereich von unterexpandierten turbulenten Freistrahl findet aufgrund der Nachexpansion eine starke Temperaturabsenkung statt, sodass sich die Temperatur jener am kritischen Punkt annähert. Diese Abweichung vom idealen Gasverhalten wird zudem durch die hohen Gasdrücke von mehreren 100 bar verstärkt.

Das abweichende Verhalten von der idealen Gasannahme kann vereinfacht über einen sogenannten Realgasfaktor Z mit

$$Z = \frac{pv}{RT} \tag{3.14}$$

modelliert werden, wobei für ideale Gase Z = 1 gilt. v bezeichnet das spezifische Volumen.

Für eine präzisere Beschreibung dienen sogenannte kubische Zustandsgleichungen. Die häufig verwendete Zustandsgleichung nach Van-der-Waals korrigiert die thermische Zustandsgleichung idealer Gase zu

$$p = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2} \tag{3.15a}$$

$$a = 3p_k v_k^2 \tag{3.15b}$$

$$b = \frac{v_{\rm k}}{3}.\tag{3.15c}$$

Durch den Kohäsionsdruck *a* sollen die intermolekularen Kräfte und durch die Größe *b* das Eigenvolumen ergänzt werden. Die Zustände am kritischen Punkt werden durch p_k und v_k beschrieben.

Die Übereinstimmung der Van-der-Waals Korrektur mit Messwerten ist qualitativ gut, quantitativ jedoch meist unzureichend [5]. Deshalb hat sich für gasförmige Freistrahlen in den meisten Fällen die etwas akkuratere Korrektur nach Redlich und Kwong durchgesetzt [5]. Die Verbesserung der Genauigkeit in Gleichung 3.16 ist dabei maßgeblich auf die eingeführte Abhängigkeit des Kohäsionsdrucks *a* von der kritischen Temperatur T_k zurückzuführen.

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{T^{0.5}v(v + b)}$$
(3.16a)

$$a = 0.42748 \frac{R^2 T_{\rm k}^{2.5}}{p_{\rm k}} \tag{3.16b}$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_{\rm k}}{p_{\rm k}}$$
 (3.16c)

In der vorliegenden Arbeit wird, sofern nicht anders gekennzeichnet, die Korrektur nach Redlich und Kwong verwendet.

Für die kalorische Zustandsgleichung wird keine Realgas-Korrektur verwendet. Die spezifischen Wärmekapazitäten der einzelnen Spezies werden für die Berechnung der Änderung der spezifischen Enthalpie aus polynomialen Zusammenhängen ermittelt.

3.5 Reaktionskinetik

In vielen technischen Verbrennungsprozessen wird der Verbrennungsfortschritt durch die chemische Reaktionsgeschwindigkeit limitiert oder beeinflusst. Wie in Abschnitt 2.5 beschrieben, ist bei der HPDF-Verbrennung vor allem die Zündung, der Anteil an vorgemischter Verbrennung sowie der Ausbrand durch chemische Prozesse beeinflusst bzw. limitiert. Zudem bestimmt in nahezu allen Verbrennungsprozessen, selbst in technischen Anwendungen in denen die Mischung den Umsatz limitiert, die Chemie die Schadstoffbildung. Zur Beschreibung dieser Vorgänge werden elementare chemische Reaktionen mit den entsprechenden Reaktionsraten, den sogenannten chemischen Kinetiken, verwendet [96].

Eine globale Beschreibung von chemischen Reaktionsprozessen mittels einer einzigen Reaktionsgleichung (Globalreaktion) kann zwar ein anschauliches Verständnis für den Gesamtprozess liefern, sie ist jedoch für eine Modellierung der im Detail ablaufenden Vorgänge unzureichend. In der Realität existiert eine solche, globale Reaktionsgleichung nämlich nicht. Während eines Oxidationsprozesses laufen viele Einzelreaktionen, in welchen zahlreiche Zwischenspezies involviert sind, ab. Die Gesamtheit all dieser Einzelreaktionen und Reaktionsraten wird als Reaktionsmechanismus bezeichnet.

Allgemein lässt sich eine Elementarreaktion zweier Moleküle *A* und *B*, aus welchen zwei neue Moleküle *C* und *D* hervorgehen, als

$$A + B + M \to C + D + M \tag{3.17}$$

schreiben. M ist dabei ein an der Reaktion unbeteiligter Stoßpartner. Für eine beliebige Anzahl N_R an Elementarreaktionen und eine beliebige An-

zahl *N*^{*S*} an Spezies lässt sich die Gesamtheit der im Reaktionsmechanismus enthaltenen Elementarreaktionen kompakt wie folgt schreiben [96]:

$$\sum_{k=1}^{N_S} v'_{ki} S_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_S} v''_{ki} S_k, \quad \text{für} \quad i = 1, 2, ..., N_R.$$
(3.18)

Für die *k*-te Spezies S_k und die *i*-te Reaktion R_i sind v'_{ki} und v''_{ki} die stöchiometrischen Koeffizienten auf der Edukt- bzw. Produktseite. Die beschriebenen Reaktionen können jeweils in beide Richtungen ablaufen. Die Produktionsrate $\dot{\omega}_k$, welche zur Berechnung der Wärmefreisetzungsraten $\dot{\omega}_{h_s}$ und damit zur Schließung der Transportgleichung 2.14 nötig ist, kann dann aus der Summe der Produktions- bzw. Abbauraten aller Teilreaktionen berechnet werden:

$$\dot{\omega}_k = \sum_{i=1}^{N_R} (v_{ki}'' - v_{ki}') \cdot q_i, \quad \text{für } k = 1, 2, ..., N_S.$$
 (3.19)

Die Fortschrittsvariable q_i der Elementarreaktion wird dabei aus den molaren Konzentrationen der Spezies $[X_k]$ durch

$$q_i = k_{f,i}(T) \prod_{k=1}^{N_S} [X_k]^{v'_{ki}} - k_{r,i}(T) \prod_{k=1}^{N_S} [X_k]^{v''_{ki}}, \qquad (3.20)$$

mit den Reaktionsraten $k_{fi}(T)$ und $k_{ri}(T)$ der Hin- und Rückreaktionen berechnet. Die für diese Gleichung im Allgemeinen starke nichtlineare Temperaturabhängigkeit der Reaktionsrate k(T) lässt sich in Arrhenius-Form als

$$k(T) = AT^{b}exp(-E_{A}/R_{u}T)$$
(3.21)

mit drei reaktionsabhängigen Koeffizienten darstellen. A ist ein Häufigkeitsfaktor, b eine empirische Konstante und E_A die für den Start der Reaktion notwendige Aktivierungsenergie. Die molare Konzentration $[X_k]$ der Spezies S_k lässt sich aus deren Molmenge n_k über

$$[X_k] = \frac{n_k}{V} \quad \text{mit} \quad X_k = \frac{n_k}{n_{ges}} \tag{3.22}$$

berechnen.

Die Anzahl an Einzelreaktionen und Spezies in einem Reaktionsmechanismus ist stark vom Brennstoff abhängig. Zur Beschreibung des Oxidationsprozesses von n-Heptan, einem typischen Modellbrennstoff für Diesel, kann ein Reaktionsmechanismus mehrere hundert verschiedene Spezies und mehrere tausend Elementarreaktionen umfassen, während für Methan etwa 50 Spezies und mehrere hundert Reaktionsgleichungen für eine detaillierte Beschreibung ausreichen. In der Literatur werden Reaktionsmechanismen oft nach der Anzahl an berücksichtigten Spezies und Einzelreaktionen in detaillierte, skelettartige und reduzierte Mechanismen unterteilt.

3.6 Turbulenz-Chemie-Interaktion

Der Begriff Turbulenz-Chemie-Interaktion (TCI) wird in der Literatur häufig mit zwei unterschiedlichen Definitionen verwendet. Streng genommen beschreibt TCI die beidseitige physikalische Wechselwirkung zwischen turbulenten Wirbeln und der turbulenten Flammenbürste. Von vielen Autoren wird der Begriff TCI jedoch im RANS bzw. LES Kontext anders verwendet. In diesem Kontext beschreibt er den Einfluss der Verwendung von gemittelten bzw. gefilterten Größen für die Berechnung der Produktionsraten [15,51]. Im RANS-Kontext bedeutet dies folgendes: Durch die in Abschnitt 3.2 eingeführte Favre-Mittelung wird auch der Produktionsterm $\dot{\omega}_k(T, Y_k)$ in der Speziestransportgleichung 2.14 gemittelt und damit zu $\tilde{\omega}_k(T, Y_k)$. Eine Approximation dieses gemittelten Produktionsterms durch die Verwendung von gemittelten thermodynamischen Größen $\tilde{\omega}_k(T, Y_k) \approx \dot{\omega}_k(\tilde{T}, \tilde{Y}_k)$ kann die Produktionsraten, abhängig von der Stärke der Fluktuationen um den Mittelwert, signifikant beeinflussen. Die TCI-Definition im RANS-Kontext ist deshalb naheliegend, da ohne Mittelung und bei Auflösung aller turbulenten und chemischen Zeitskalen die beidseitige physikalische Wechselwirkung von turbulenten Wirbeln mit der turbulenten Flammenbürste direkt berücksichtigt wird. Auch in dieser Arbeit wird diese TCI-Definition verwendet.

3.6.1 Physikalische Effekte

Aus der Charakterisierung der turbulenten Verbrennung in Abschnitt 2.4 geht hervor, dass sowohl die Turbulenz als auch die Chemie ein breites Spektrum an Längen- und Zeitskalen umfassen können. In turbulenten Strömungen korrelieren die größten Längenskalen mit den geometrischen Abmessungen. Die kleinsten Längenskalen sind durch die Dissipation von turbulenter Energie aufgrund viskoser Effekte gegeben (Kolmogorov-Längenskala) [8]. Nach [74] sind die kleinsten Zeitskalen der Mischung nicht kleiner als 1×10^{-3} s bzw. 1×10^{-4} s, während die chemischen Zeitskalen typischerweise einen Bereich von 1×10^{-9} s bis zu 1s und mehr umfassen. Eine Wechselwirkung entsteht vor allem dann, wenn sich die Zeitskalen von Mischung und Chemie überlappen. Die Intensität der Wechselwirkungen ist laut [8] dabei von der Größe der Überlappung abhängig. Eine direkte Berücksichtigung der Wechselwirkung kann nur durch die Auflösung aller Skalen erreicht werden. Während bei der vorgemischten Verbrennung durch turbulentes Mischen Zonen kalter Edukte und heißer Produkte entstehen, können bei der nicht vorgemischten Verbrennung zusätzlich brennstoffreiche und brennstoffarme Zonen gebildet werden.

Der Einfluss der Turbulenz auf die chemischen Produktionsraten ist maßgeblich von den großskaligen Wirbeln geprägt, welche im Brennraum die Mischung zwischen Brennstoff und Luft durch Erhöhung des Grenzflächenkontaktes verbessern. Die daraus resultierende Streckung und Krümmung der turbulenten Flammenbürste erhöht die Transportraten für Spezies und Energie [98]. Dies wiederum erhöht den chemischen Umsatz, welcher auf molekularer Ebene abläuft. Darüber hinaus erzeugen die turbulenten Bewegungen große Variationen in Spezieszusammensetzung und Temperatur, wodurch die mittleren Reaktionsraten stark an die molekulare Diffusion auf den kleinsten Skalen der Turbulenz gekoppelt werden. Die Qualität der Approximation des gemittelten bzw. mittleren Produktionsterms $\tilde{\omega}_k(T, Y_k)$ durch den Produktionsterm aus gemittelten thermodynamischen Größen $\omega_k(\tilde{T}, \tilde{Y}_k)$ ist daher von der Größe dieser Variationen abhängig.

Der Einfluss der chemischen Reaktionen auf die Turbulenz erfolgt durch die damit verbundene lokale Wärmefreisetzung. Diese erzeugt einerseits große Dichteunterschiede, welche sich direkt auf den Impulstransport auswirken und die Intensität der Turbulenz erhöhen können. Andererseits ergibt sich durch die lokale Wärmefreisetzung aufgrund der Temperatur- und Dichteänderung eine Expansion der Verbrennungsprodukte, welche sich als Senkenterm auf die turbulente Intensität auswirkt. Die Nettowirkung der Wärmefreisetzung auf die turbulente Intensität hängt von den spezifischen lokalen Bedingungen ab, unter denen chemische Reaktionen in turbulenten Strömungen stattfinden. Eine Beschreibung dieser Effekte durch eigene Modelle ist nicht üblich und meist auch nicht notwendig.

3.6.2 TCI Modelle

Ohne Berücksichtigung von TCI werden im RANS CFD Modell die Produktionsraten der Spezies in jeder Gitterzelle mit der Annahme einer homogenen Verteilung von Spezies und Temperatur innerhalb der Zelle berechnet. Streng genommen gilt dieser Ansatz jedoch nur, wenn auch tatsächlich eine homogene Verteilung von Temperatur und Mischung vorliegt. Dies ist in der Regel jedoch nicht der Fall. Zur Berücksichtigung dieser Diskrepanz sind in der Literatur unterschiedliche Ansätze vorherrschend. Auf die zwei gängigsten Ansätze wird nachfolgend näher eingegangen.

PDF Modell

Dieser Ansatz verfolgt die Strategie, die turbulenten Mischungs- und Temperaturfluktuationen auf der Basis statistischer Betrachtung durch sogenannte Wahrscheinlichkeitsdichte-Funktionen (probability density functions - PDF) zu approximieren und bei der Berechnung der Produktionsraten für Spezies und Enthalpie zu berücksichtigen [98]. Die PDF gibt dabei die Wahrscheinlichkeit an, mit welcher eine RANS-Größe (z.B. die Temperatur oder der Massenanteil) einen vom Mittelwert abweichenden Wert annimmt. Die Modellierung der PDF sowie dafür getroffene Annahmen werden an dieser Stelle nicht im Detail erläutert, können jedoch in [31,72] nachvollzogen werden.

Dieser Ansatz wird in der Literatur für die Berechnung der Reaktionsraten auf Basis detaillierter Chemie nur dann verwendet, wenn die Anzahl an Spezies gering ist, da für jede Spezies zusätzlich zur Speziestransportgleichung eine weitere Transportgleichung für die PDF gelöst werden muss. Der zusätzliche Rechenaufwand korreliert daher mit der Anzahl an transportierten Spezies. Aufgrund der in Abschnitt 1.4 beschriebenen Anforderungen an das Verbrennungsmodell und die damit zu erwartende erhöhte Anzahl an transportierten Spezies, wird dieser Modellansatz nicht weiter verfolgt.

Partially-Stirred Reaktor Modell

Durch eine nicht perfekte Mischung können sich Zonen aus kalten bzw. unverbrannten Gasen bilden. Das Partially-Stirred Reaktor (PaSR) Modell wurde dafür entwickelt, den Effekt dieser Mischungsinhomogenitäten zu berücksichtigen [25]. Die Idee des Modells ist es, jede Gitterzelle in zwei Zonen aufzuteilen; eine Reaktions- und eine Mischungszone. Die Reaktionszone wird als ein homogen gerührter Reaktor angenommen, in welchem alle Spezies perfekt vermischt sind und kein Einfluss der Turbulenz vorhanden ist. In der Mischungszone werden Turbulenzeffekte und Mischung zugelassen, jedoch keine chemische Reaktion. Die globale Zusammensetzung in der Zelle ergibt sich aus der Summe der beiden Zonen. Dieses Konzepts ist in Abbildung 3.1 schematisch dargestellt.

Innerhalb der Zelle wird zwischen dem initialen Massenanteil Y_k^0 der *k*ten Spezies S_k in der nicht reagierenden Zone, dem Massenanteil Y_k^* in der Reaktionszone (reaktiver Massenanteil) und dem finalen, gemittelten Massenanteil \widetilde{Y}_k unterschieden. Der reaktive Massenanteil innerhalb der



Abbildung 3.1: Prinzipskizze des Partially-Stirred Reaktor Modells innerhalb einer Gitterzelle nach [65].

Zelle kann aus den charakteristischen Zeitskalen von Turbulenz τ_t und Chemie τ_c in jeder Zelle nach [65] aus

$$Y_k^* = \frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_t} \tag{3.23}$$

berechnet werden. Die Berechnung des gemittelten Produktionsterms folgt dann direkt aus dem reaktiven Massenanteil der Zelle und dem Produktionsterm, welcher aus den zellgemittelten Größen

$$\widetilde{\dot{\omega}}_k(T, Y_k) = Y_k^* \dot{\omega}_k(\widetilde{T}, \widetilde{Y}_k)$$
(3.24)

berechnet wird [45]. Die chemische Zeitskala ist als jene Zeit definiert, welche eine für den Verbrennungsprozess charakteristische Spezies benötigt, um ihren Gleichgewichtszustand, ausgehend vom Momentanzustand, zu erreichen. Als jene, den Verbrennungsprozess limitierenden charakteristischen Spezies, wurden in dieser Arbeit auf Basis der Untersuchungen nach Kong *et al.* [45] die beiden Brennstoffe n-Heptan (C_7H_{16}) und Methan (CH₄) sowie das während des Ausbrands limitierende Kohlenmonoxid (CO) ausgewählt. Die chemische Zeitskala der charakteristi-
schen Spezies lässt sich aus deren Massenanteil \widetilde{Y}_i und dessen Änderung $\Delta \widetilde{Y}_i$ über eine definierte Zeitspanne Δt zu

$$\tau_{c,i} = \frac{-\widetilde{Y}_i}{\Delta \widetilde{Y}_i} \Delta t \quad \text{für} \quad i = C_7 H_{16}, CH_4, CO$$
(3.25)

berechnen. Das Maximum aus den chemischen Zeitskalen $\tau_{c,i}$ bestimmt in jedem numerischen Zeitschritt die chemische Zeitskala τ_c .

Die turbulente Zeitskala τ_t , auch Mischungszeitskala oder eddy turnover time, beschreibt eine charakteristische Zeit für den Energietransport von großen zu kleinen Wirbeln. Sie kann nach [45] aus den die Turbulenz beschreibenden Größen, der turbulenten kinetischen Energie k und der turbulenten Dissipationsrate ϵ , berechnet werden.

$$\tau_{\rm t} = C_{\rm mix} \frac{k}{\epsilon} \tag{3.26}$$

Die Modellkonstante C_{mix} ist von der turbulenten Intensität abhängig und wird in der Literatur zwischen 0.001 und 0.3 gewählt [4]. Für die HPDF-Verbrennung wird sie zu 0.1 gesetzt, da sich dieser Wert für die Simulation der dieselmotorischen Verbrennung in Kombination mit dem k- ϵ -Turbulenzmodell bewährt hat [4,44].

3.7 Solver-Umgebung

In dieser Arbeit wird für 3D CFD Berechnungen der kommerzielle Strömungslöser des Softwarepakets CONVERGE verwendet [80]. Die in Kapitel 3 beschriebenen numerischen Modelle sind bis auf das PaSR-Modell bereits in den Solver integriert. Das PaSR-Modell wird mithilfe von benutzerdefinierten Funktionen (user-defined functions - UDF) in den Solver integriert.

Für die Berechnung von Zündverzugszeiten in homogenen, adiabaten Reaktoren mit konstantem Volumen (0D Betrachtung) sowie für die Berechnung von laminaren Flammengeschwindigkeiten (1D Betrachtung) wird der Open-Source Kinetiklöser CANTERA [26] verwendet.

3.7.1 SAGE-Solver in CONVERGE

Der sogenannte SAGE-Solver ist ein Lösungsalgorithmus zur Berechnung von Spezies-Produktionsraten auf Basis eines Reaktionsmechanismus. SAGE basiert auf dem CVODES-Solver, der Teil des SUNDIALS (SUite of Nonlinear and DIfferential/ALgebraic equation Solver) Pakets ist. CVODES wurde speziell für die Lösung von Anfangswertproblemen für gewöhnliche Differentialgleichungen entwickelt.

Basierend auf einem Reaktionsmechanismus mit Reaktionsraten in Arrhernius-Form berechnet der SAGE-Solver die Produktionsraten für jede Elementarreaktion wie in Abschnitt 3.5 beschrieben. Für die Lösung der Transportgleichungen mit dem CFD-Solver werden die Produktionsraten aus der Berechnung des SAGE-Solvers als Randbedingung (Gleichung 2.14) verwendet. Die Berechnung von Strömungsfeld und Produktionsraten ermöglicht damit entkoppelt voneinander. Zusammen mit der Berechnung der Produktionsraten auf Basis detaillierter Chemie unter Verwendung des SAGE-Solvers ist eine flexible Handhabung verschiedener Brennstoffe allein durch die Verwendung eines anderen Reaktionsmechanismus möglich.

3.7.2 Mehrzonenmodell für Zellen mit ähnlichen thermodynamischen Bedingungen

Das Mehrzonenmodell stellt einen Ansatz dar, um den Rechenaufwand für die Auswertung des chemischen Fortschritts mit dem SAGE-Solver in jedem Zeitschritt zu reduzieren. Das Modell gruppiert Zellen mit ähnlichem thermodynamischen Zustand sowie ähnlicher Gemischzusammensetzung und berechnet die Produktionsraten der Spezies für die Gesamtheit dieser Zellen nur einmal. Der Gruppierungsprozess wird im Allgemeinen in Abhängigkeit von der Temperatur *T* und dem Äquivalenzverhältnis ϕ durchgeführt. Zusätzlich werden in dieser Arbeit zwei weitere Gruppierungskriterien bezüglich des Massenanteils von n-Heptan $Y_{C_7H_{16}}$ und Methan Y_{CH_4} eingeführt. Für jedes dieser Gruppierungskriterien wird eine Bandbreite spezifiziert. Basierend auf den Gruppenkriterien und deren Bandbreite werden alle Zellen innerhalb dieses Bereichs gebündelt und die thermodynamischen Größen sowie der Mischungszustand für jede Zone anhand der gemittelten Zonenwerte berechnet. Nach der Berechnung des chemischen Fortschritts und der Produktionsraten wird das Ergebnis an alle Zellen, welche die selben Gruppenkriterien erfüllen, zurückgegeben, ohne eine eigene Berechnung für die einzelnen Zellen durchzuführen. Dabei werden die globalen Erhaltungsgleichungen berücksichtigt. Für rotationssymmetrische Freistrahlen ergibt sich durch dieses Modell eine deutliche Reduktion der Rechenzeit. Die in dieser Arbeit verwendeten Gruppierungskriterien und deren Bandbreite sind in Tabelle 3.2 zusammengefasst.

Gruppierungskriterium	Bandbreite	
Temperatur, T	5.0 K	
Äquivalenzverhältnis, ϕ	0.05	
Massenanteil n-Heptan, Y _{n-Heptan}	0.001	
Massenanteil Methan, Y _{Methan}	0.001	

Tabelle 3.2: Kriterien für die Gruppierung von Zellen im Mehrzonenmodell.

3.7.3 Adaptive Netzverfeinerung

Um das Rechengitter in Regionen zu verfeinern, in denen große Gradienten von Strömungsgrößen und thermodynamischen Größen auftreten, ist im CONVERGE Softwarepaket eine Methode zur adaptiven Netzverfeinerung (adaptive mesh refinement - AMR) integriert. Die Methode gewährleistet in diesen Bereichen ein gut aufgelöstes Gitter und eine effiziente sowie ressourcensparende Berechnung auf grobem Gitter in Bereichen geringer Gradienten.

Anschaulich kann das für die Verfeinerung verwendete Kriterium anhand einer skalaren Größe beschrieben werden. Für jede skalare Größe ist ein Sub-Gitterfeld P' als die Differenz zwischen dem aktuell berechneten Feld \overline{P} und dem aufgelösten Feld P nach

$$P' = P - \overline{P} \tag{3.27}$$

definieren. Das skalare Sub-Gitterfeld *P'* kann also der vom aktuellen Gitter nicht aufgelöste Anteil des aufgelösten Feldes *P* interpretiert werden. Das skalare Sub-Gitterfeld ist nicht bekannt, kann jedoch über eine unendliche Reihenentwicklung exakt definiert werden und wird durch den ersten Term der Reihe angenähert [73]. Eine Zelle wird immer dann eingefügt, wenn der Absolutwert des Sub-Gitterfeldes *P'* über einem benutzerdefinierten Wert (zulässige Abweichung) liegt. Umgekehrt wird eine Zelle Entfernt, wenn der errechnete Absolutwert des Sub-Gitterfeldes unter ein Fünftel der zulässigen Abweichung fällt. Diese Vorgehensweise wird analog auch für Vektorfelder, z.B. für die Geschwindigkeit, übernommen.

In Tabelle 3.3 sind die in dieser Arbeit verwendeten Verfeinerungsvariablen und ihre zulässigen Abweichungen zusammengefasst.

Verfeinerungsvariable	zulässige Abweichung
Geschwindigkeit, v	1.0 m/s
Temperatur, T	2.5 K
Massenanteil n-Heptan, Y _{n-Heptan}	0.0001
Massenanteil Methan, Y _{Methan}	0.0001

Tabelle 3.3: Parameter für die adaptive Netzverfeinerung.

Der Zeitschritt wird nach jeder Iteration über den Zusammenhang der Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl (CFL-Zahl) an die veränderten Zellgrößen angepasst. Die CFL-Zahl beschreibt ein Kriterium für den Zusammenhang zwischen der lokalen Strömungsgeschwindigkeit, dem aktuellen Zeitschritt und der lokalen Zellgröße.

4 Validierungsexperiment und Randbedingungen für die numerische Simulation

In diesem Kapitel wird zunächst ein Validierungsexperiment für die HPDF-Verbrennung auf Basis einer schnellen Kompressions-Expansionsmaschine (rapid compression expansion machine - RCEM) vorgestellt. Aus diesem wird eine vereinfachte Geometrie mit approximierten Wärmeverlusten für die Modellierung abgeleitet und durch ein Rechengitter abgebildet. Die zur Einblasung von Erdgas und Diesel notwendigen Randbedingungen sowie die Betriebspunkte der RCEM werden in den beiden darauffolgenden Abschnitten vorgestellt.

4.1 Validierungsexperiment und Messaufbau

Um ein valides Simulationsmodell zur Vorhersage der Zündung und Verbrennung von Gasstrahlen mit Diesel-Pilotzündung zu erstellen, wurden im Rahmen des Forschungsvorhabens umfangreiche experimentelle Untersuchungen an einer RCEM durchgeführt. Die experimentellen Untersuchungen sind nicht Teil dieser Arbeit, sondern werden lediglich als Validierungsbasis herangezogen. In diesem Abschnitt wird kurz auf die für diese Arbeit relevanten Details des experimentellen Aufbaus eingegangen, vor allem aber auf die für die Simulation relevanten Randbedingungen und Messgrößen. Detaillierte Informationen zum experimentellen Aufbau, den Messmethoden und der Auswertung können in den Veröffentlichungen von Fink *et al.* [21,22] nachgelesen werden.

Im linken Teil von Abbildung 4.1 ist der RCEM-Prüfstand samt optischer Messtechnik dargestellt. Antriebs- und Arbeitskolben sind ringförmig an-

geordnet, über Hydrauliköl gekoppelt und bewegen sich im Betrieb gegenläufig, sodass sich die Impulskräfte weitestgehend ausgleichen. Sobald der Antriebskolben pneumatisch mit Druck beaufschlagt ist, kann über ein Bypassventil die Bewegung des Arbeitskolbens, welcher sich im Anfangszustand am linken Anschlagpunkt befindet, initialisiert werden. Nach einer kurzen Wegstrecke wird die Überströmbohrung freigegeben und die beiden Kolben sind über Hydrauliköl gekoppelt. Der Arbeitskolben, durch welchen Luft im Brennraum komprimiert wird, stoppt, wenn die Druckkräfte und die Trägheitskräfte innerhalb des Systems im Gleichgewicht sind. Aufgrund des dynamischen Gleichgewichts folgt auf die Kompression eine Expansion. Die Bewegungskurve des Arbeitskolbens im Bereich des oberen Totpunktes (OT) ähnelt jener eines Motors, in welchem der Kolben durch einen Kurbeltrieb bewegt wird. Der Kompressionsendzustand im Brennraum sowie der Verfahrweg des Antriebskolbens ergeben sich aus der Kombination aus initialen Brennraumbedingungen und pneumatischem Antriebsdruck.



Abbildung 4.1: RCEM Prüfstand mit optischer Messtechnik (links) und Anordnung der Injektoren (rechts): (1) Antriebsluftversorgung, (2) Antriebskolben, (3) Hydrauliköl, (4) Überströmbohrung, (5) Arbeitskolben, (6) Bypass-Ventil, (7) Brennraum, (8) Gas-Injektor, (9) Diesel-Pilotinjektor, (10) Lichtbogenlampe, (11) UV-Filter, (12) Pinhole, (13) Parabolspiegel, (14) verspiegelter Zylinderkopf, (15) 50/50 Strahlteiler, (16) Fokusierlinse, (17) Schatten-Kamera, (18) UV-Strahlteiler, (19) OH*-Filter, (20) Bildverstärker, (21) OH*-Kamera. Abbildung aus [21].

Im rechten Teil in Abbildung 4.1 ist schematisch und vergrößert die Anordnung von Diesel- und Gasinjektor im Zylinderkopf der RCEM dargestellt. Beim Dieselinjektor handelt es sich um einen sogenannten Pilotinjektor, welcher für besonders kleine Einspritzmengen ausgelegt ist. Der Dieselinjektor mit axialer Düsenbohrung und einem Düsendurchmesser von 0.11 mm ist rechtwinklig zum Gasinjektor mit radialer Düsenbohrung und einem Düsendurchmesser von 0.9 mm angeordnet, sodass sich eine Interaktionsebene der beiden Strahlen parallel zum flachen Zylinderkopf ergibt. Wie schematisch angedeutet, ist eine Verdrehung des Gasstrahls um den Winkel α zum Dieselstrahl möglich. Der Abstand der Injektoren zueinander ist grundsätzlich variabel, war jedoch für alle in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen 5 mm bzw. 8 mm. Der Einspritzzeitpunkt von Gas und Diesel zueinander sowie relativ zur Position des Arbeitskolbens unterliegt keinen Einschränkungen, da bei beiden Injektoren die Nadelbewegung elektrisch aktuiert wird. Geometrische Abmessungen sowie Betriebsparameter der RCEM und der Injektoren sind in Tabelle 4.1 zusammengefasst.

Die Einspritz-, Zündungs- und Verbrennungsvorgänge im Brennraum werden durch einen Glaseinsatz im Arbeitskolben beobachtet, wobei simultan Schatten- und OH*-Messtechnik appliziert werden können. Das Prinzip des optischen Aufbaus kann in Abbildung 4.1 nachvollzogen werden und ist im Detail in [21] beschrieben. Während sich der Schattenaufbau hervorragend zur Visualisierung der Ausbreitung von Diesel- und Gasstrahl im Brennraum eignet und auch die breitbandige Schwarzkörperstrahlung der rußenden Flammenteile erfasst, erlaubt es die hohe Empfindlichkeit des Systems nicht, die Flammenposition innerhalb der dunklen Mischbereiche der Strahlen präzise zu lokalisieren. Dieses Defizit wird durch den OH*-Aufbau kompensiert, bei welchem die vom OH*-Radikal emittierte Chemielumineszenz aufgezeichnet wird. Bei diesem Radikal handelt es sich um ein angeregtes Zwischenprodukt der Verbrennung mit sehr kurzer Lebensdauer, welches beim Übergang in den Grundzustand Licht mit einer spezifischen Verteilung im ultravioletten (UV) Bereich emittiert.

Zusätzlich zu den optischen Messungen wird über ein Thermoelement und einen Ladedrucksensor die Temperatur und der Druck im Brennraum vor dem Start der Kompression aufgezeichnet. Während der Kompression wird über ein Wegmesssystem die zeitliche Kolbenposition aufgezeichnet und über einen piezoelektrischen Drucksensor, welche für Spitzendrücke bis 200 bar geeignet ist, der Verlauf des Brennraumdrucks bis zum Ende der Verbrennung erfasst.

4.2 Geometrie und Wärmeverluste

Der linke Teil in Abbildung 4.2 zeigt das Brennkammervolumen der RCEM. Dieses besteht aus dem Brennraum, zahlreichen großen und kleinen Spaltvolumina sowie aus Zu- und Ablaufkanal. Spalte und Kanäle, welche entweder für den technischen Betrieb nötig oder konstruktiv unvermeidbar sind, erzeugen in Kombination mit den kalten Brennraumwänden der RCEM massive Wärmeverluste. Diese wiederum verursachen eine Druck- und Temperaturabsenkung im Brennraum. Die Wände der RCEM haben, im Gegensatz zu einem im Dauerbetrieb laufenden Verbrennungsmotor, eine deutlich geringere Temperatur, welche aufgrund der massiven Stahlkonstruktion als konstant und gleich der Umgebungstemperatur angenommen werden kann. Der Wärmeeintrag durch Kompression und Verbrennung ist sehr gering, sodass diese Annahme auch während der Kolbenbewegungen gerechtfertigt ist. Durch die Kompression der Luft im Brennraum steigt deren Temperatur an und der Gradient zur Wand hin nimmt zu. Während sich die Druckverluste instantan auf den gesamten Brennraum verteilen, wirken sich Wärmeverluste nur in den wandnahen Zonen aus. Da an der RCEM keine globale Ladungsbewegung aufgeprägt wird und durch die Kolbenbewegung nur Störungen im wandnahen Bereich induziert werden, bleibt die Temperatur im Kern des Brennraums unbeeinflusst und folgt dem Druckverlauf über den Zusammenhang der Isentropenbeziehung aus Gleichung 2.3.

Eine Abbildung der Realgeometrie mit allen Spalten sowie Zu- und Ablaufkanälen als Rechengitter ist nicht sinnvoll, da eine Auflösung der kleinen Strukturen den Rechenaufwand in der numerischen Strömungsmechanik (computational fluid dynamics - CFD) überproportional erhöht. Wird die durch Spalte vergrößerte Oberfläche bei Erhaltung des Brennraumvolumens vernachlässigt, werden die Wärmeverluste jedoch massiv unterschätzt. Die Folge ist eine deutliche Überschätzung des Drucks im Bereich des OT und damit eine falsche Druck- und Temperaturrandbedingung für die Modellierung von Brennstoffeinblasung, Zündung und



Abbildung 4.2: Reale (links) bzw. für die Simulation vereinfachte Brennraumgeometrie (rechts) nahe des oberen Totpunktes.

Verbrennung. Der in der CFD berechnete Druckverlauf für eine Kompression ohne Verbrennung und ohne Berücksichtigung der Spaltoberfläche, jedoch bei realem Brennraumvolumen, ist im Vergleich zum gemessenen Druckverlauf für zwei in dieser Arbeit verwendete Betriebspunkte in Abbildung 4.3 dargestellt. Die beiden Betriebspunkte werden in Abschnitt 4.4 eingeführt.

Eine für die numerischen Untersuchungen vereinfachte Geometrie, bei welcher das gesamte Volumen aller Spalte im Brennraum in einem Ringspalt am Kolben gesammelt wird, ist im rechten Teil in Abbildung 4.2 dargestellt. Der Ringspalt wird deshalb als repräsentativer Spalt gewählt, weil er den größten realen Spalt im Brennraum darstellt. Mit dieser Vereinfachung kann die Auflösung kleiner Spalte und komplexer Geometrien sowie der damit verbundenen hohen lokalen Strömungsgeschwindigkeiten und kleinen Gitterzellen im Rechennetz vermieden werden, ohne den Einfluss der Abkühlung in dünnen Spalten zu vernachlässigen. Das Volumen des Ringspalts wird aus dem Volumen der einzelnen Spalte der Originalgeometrie ermittelt. Der Druckverlauf mit Berücksichtigung des Spaltvolumens ist in Abbildung 4.3 jenem ohne Berücksichtigung des Spaltvolumens (bei gleichem Gesamtvolumen des Brennraums) sowie der Messung gegenübergestellt. Der berechnete Druckverlauf folgt der Messung für beide betrachteten Betriebspunkte nahezu deckungsgleich. Aufgrund des Zusammenhangs zwischen Druck und Temperatur über die Isentropenbeziehung (Gleichung 2.3) gilt dies auch für den Temperaturverlauf im von der kalten Grenzschicht unbeeinflussten Kern des Brennraums.



Abbildung 4.3: Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Druckverläufen mit und ohne Berücksichtigung von Spaltverlusten (bei gleichem Gesamtvolumen des Brennraums) für eine Kompression und Expansion ohne Verbrennung.

4.3 Vernetzung

Die Vernetzung des Brennraumvolumens erfolgt anhand der in Abschnitt 3.7.3 vorgestellten Strategie. Ausgehend von einem Basisnetz kann lokal ein feineres Netz vorgegeben und zusätzlich anhand von Gradienten adaptiv verfeinert werden (AMR). Eine Verfeinerung des Gitters ist dabei immer mit einer Teilung der Zellen in allen Raumrichtungen verbunden und kann somit nur in diskreten Schritten, sogenannten Verfeienrungsstufen erfolgen. Die Vernetzung des Brennraums ist als Schnitt durch die Interaktionsebene der Brennstoffstrahlen in Abbildung 4.4 veranschaulicht. Die Strahlbereiche werden durch eine lokale, kegelförmige Verfeinerung nahe des Düsenaustritts (statische Verfeinerung) berücksichtigt und können mittels AMR während der Injektion weiter verfeinert werden (dynamische Verfeinerung). Der im letzten Abschnitt zur Modellierung der Wärmeverluste eingeführte Ringspalt am Kolben (in Abbildung 4.4 nicht dargestellt) wird in radialer Richtung mit genau einer Gitterzelle aufgelöst, sodass nur ein axiales Temperaturprofil abgebildet wird. Dieses Vorgehen ist physikalisch nicht vollständig korrekt, da natürlich auch ein Temperaturprofil in radialer Richtung existiert. Eine Annäherung des Temperaturprofils in radialer Richtung mit einer konstanten Temperatur über die Spaltdicke zeigte jedoch in Vergleichssimulationen mit einer Auflösung gute Übereinstimmungen, da der Spalt im Vergleich zu seiner Länge sehr dünn und der axiale Temperaturgradient im Vergleich zum radialen sehr groß ist. In axialer Richtung wird eine ausreichende Auflösung zur Abbildung des Temperaturgradienten vorgegeben und eine Netzunabhängigkeit der Wärmeverluste im Spalt sichergestellt.



Abbildung 4.4: Veranschaulichung der Vernetzung des Brennraums in einer Schnittansicht durch die Interaktionsebene der Brennstoffstrahlen.

In dieser Arbeit wird für alle Untersuchungen eine Basis-Zellgröße mit 4 mm Kantenlänge verwendet. Verfeinerungsstufe 1 reduziert die Kan-

tenlänge auf 2 mm, Stufe 2 auf 1 mm und so weiter. Untersuchungen zur erforderlichen Netzauflösung werden in den nachfolgenden Kapiteln behandelt.

4.4 Betriebspunkte

Durch die variabel einstellbare Kompression kann an der RCEM im OT jeder Zustand zwischen Anfangsbedingungen und den Bedingungen beim (durch die Brennraumgeometrie definierten) maximalen Kompressionsverhältnis eingestellt werden. Außerdem kann durch Anderung des Anfangsdrucks der Druck im OT unabhängig von der Temperatur verändert werden. Für viele Untersuchungen in dieser Arbeit werden zwei Betriebspunkte festgelegt; ein Betriebspunkt mit niedrigem Kompressionsverhältnis (75 bar und 780 K im OT) und einer mit hohem Kompressionsverhältnis (125 bar und 920 K im OT). Die Betriebspunkte werden als niedriger und hoher Betriebspunkt bezeichnet. Der hohe Betriebspunkt repräsentiert dabei die Bedingungen an einem Mittel- bzw. Volllastpunkt im Motor, während der niedrige Betriebspunkt stellvertretend für einen Niedriglastpunkt bzw. eine Temperaturabsenkung im oberen Totpunkt aufgrund von Miller-Steuerzeiten steht. Aufgrund von zyklischen Schwankungen der RCEM sowie Unsicherheiten der Randbedingungen, können diese Betriebspunkte mit einer Genauigkeit von ± 1.5 bar und ± 4 K reproduziert werden.

In Tabelle 4.1 sind abschließend alle relevanten geometrischen Abmessungen, Randbedingungen sowie die untersuchten Betriebspunkte der RCEM zusammengefasst.

4.5 Randbedingungen der Brennstoffinjektion

Sofern kein Brennstoff in den Brennraum der RCEM eingebracht wird, kann dieser als geschlossenes, diabates thermodynamisches System betrachtet werden. Wird einer der beiden Injektoren bestromt, die Nadel geöffnet und Brennstoff in den Brennraum eingebracht, so wird

Parameter	Wert
Bohrungsdurchmesser	220 mm
Zylindervolumen	14 dm ³
Düsendurchmesser Dieselinjektor	0.11 mm
Injektionsmasse Diesel	3 mg
Injektionsdruck Diesel	2000 bar
Bestromungsdauer Diesel	0.395 ms
Düsendurchmesser Gasinjektor	0.9 mm
Injektionsmasse Gas	80 mg
Injektionsdruck Gas	330 bar
Bestromungsdauer Gas	2.73 ms
Druck im OT	75 bar / 125 bar
Temperatur im OT	780 K / 920 K

 Tabelle 4.1: Geometrische Abmessungen, Randbedingungen und Betriebspunkte der RCEM.

das geschlossene System zu einem offenen System. Für den Massenaustausch über die Systemgrenze sind dann Massenstromverläufe als Randbedingung erforderlich. Für Diesel- und Gasinjektor wurden diese Massenstromverläufe vor der Verwendung an der RCEM für eine Matrix an möglichen Betriebsparametern vermessen. Jedes Profil wurde dabei aus 100 Einzelinjektionen gemittelt. Nicht vermessene Betriebspunkte können aus den vermessenen Betriebspunkten interpoliert werden. In dieser Arbeit wird für den Dieselinjektor standardmäßig eine Bestromungsdauer von 0.395 ms bei einem Injektionsdruck von 2000 bar und für den Gasinjektor eine Bestromungsdauer von 2.730 ms bei einem Injektionsdruck von 330 bar verwendet. Dadurch ergibt sich eine Einspritzmenge von 3 mg für Diesel und von 80 mg für Erdgas. Massenstromverläufe und Bestromungsdauer sind für diese beiden Betriebspunkte exemplarisch in Abbildung 4.5 als Funktion der Zeit, bezogen auf den Bestromungsbeginn des jeweiligen Injektors (BB), dargestellt.

Der Massenstromverlauf des Diesels wird direkt als Randbedingung in dem in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen primären Zerfallsmodell, dem Blob-Modell, am Austritt des Dieselinjektors verwendet. Eine Berechnung der



Abbildung 4.5: Bestromungsdauer und Massenstromverlauf für die Injektion von 3 mg Diesel und 80 mg Erdgas bei 2000 bar bzw. 330 bar.

Sacklochströmung bzw. der Düsenströmung ist für dieses Modell nicht notwendig. Im Fall des Gasinjektors wurde der Massenstrom am Nadelsitz des Injektors aufgebracht und die Strömung im Sackloch mit berücksichtigt. Dies ist notwendig, um am Düsenaustritt ein realitätsnahes Strömungsprofil zu erhalten und die Effekte der Umlenkung um 90° im Sackloch nicht zu vernachlässigen. Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird der Massenstrom nicht auf BB bezogen, sondern aus anschaulicheren Gründen auf den Einblasbeginn (EB), welcher durch einen Massenstrom größer Null definiert ist.

Das Vielstoffgemisch Diesel wird, wie in den allermeisten numerischen Berechnungen üblich, in dieser Arbeit durch einen Ersatzkraftstoff repräsentiert. Im flüssigen Zustand wird ein generisches Fluid mit mittlerer Dichte und Viskosität sowie einer mittleren Verdampfungstemperatur der Einzelkomponenten des Vielstoffgemischs verwendet. In der Gasphase wird n-Heptan aufgrund seiner dem Diesel ähnlichen Zündeigenschaften verwendet. Auch Erdgas ist ein Vielstoffgemisch, welches in den Berechnungen durch Methan approximiert wird. Dies ist deshalb in erster Näherung zulässig, da im Experiment Erdgas mit einem hohen Methangehalt von größer 98 % verwendet wird. Spadaccini *et al.* [89] haben den Einfluss von längerkettigen Kohlenwasserstoffen auf die Zündverzugszeit von Methan/Luft-Mischungen untersucht. Für Anteile <2% zeigt sich zwar ein messbarer, jedoch geringer Einfluss, welcher im Bereich der Messdifferenz verschiedener Autoren und experimentellen Aufbauten liegt. Zudem ist dieser Einfluss verglichen mit der Streuung verschiedener Methan-Reaktionskinetiken (Kapitel 6, Abbildung 6.4) vernachlässigbar. Die Begriffe n-Heptan und Methan werden daher bei der Beschreibung der Modellierung gleichbedeutend für Diesel und Erdgas verwendet. Für alle allgemeinen Beschreibungen des Brennverfahrens und für Beschreibungen der experimentellen Ergebnisse werden die Begriffe Diesel und Erdgas verwendet.

5 Gas- und Dieseleinblasung

Eine physikalisch korrekte Abbildung des Strömungs- und Mischungsfeldes von Gas- und Dieselstrahl mit der Brennraumluft ist die Voraussetzung für eine valide Berechnung der Dual-Fuel Verbrennung. Unter Verwendung der zuvor eingeführten Randbedingungen erfolgt die Validierung der Gas- und Dieseleinblasung in diesem Abschnitt anhand des zeitlichen Verlaufs der Eindringtiefe der nicht reagierenden Strahlen. Mit gegebener Massenstromrandbedingung, den thermodynamischen Größen im Brennraum und den geometrischen Abmessungen erfolgt bei korrekter Abbildung der Eindringtiefe über den Zusammenhang der Impulserhaltung eine Validierung des Strahlwinkels, des Strahlvolumens sowie des Mischungsfeldes. Der Zusammenhang dieser Strahl-Größen über die Impulserhaltung wurde von Ouellette [66] durch experimentelle und numerische Untersuchungen nachgewiesen.

Die Auswertung der Eindringtiefe der Strahlen aus den RCEM Experimenten erfolgt mittels Objekterkennung aus den Schattenaufnahmen. Das Vorgehen ist dabei wie folgt. Ein Vergleich zweier Bilder vor und kurz nach Beginn der Brennstoffeinblasung ergibt als Differenzbild den initial erkannten Strahl. Aus der Änderung von einem zum nächsten Bild wird, ausgehend vom initial erkannten Strahl, zu jedem Zeitpunkt ein zusammenhängender Strahlbereich detektiert. Die Eindringtiefe wird dann zu jedem Zeitpunkt aus der Differenz zwischen der Strahlspitze und dem Strahlursprung ermittelt. Dieses Vorgehen ist schematisch für den Gasstrahl in Abbildung 5.1 dargestellt und wird analog für den Dieselstrahl angewendet. Der Dieselstrahl kann sofort nach Eintritt in den Brennraum erfasst werden, da für die Validierungsexperimente der Gasinjektor ausgebaut wurde. Bei der Gaseinblasung verdeckt der Gasinjektor selbst jedoch den Strahl in der Frühphase der Injektion, sodass der Strahl erst nach einer Eindringtiefe größer dem Radius der Düse im Schattenbild sichtbar wird und ausgewertet werden kann. Aus den CFD-Daten können die Eindringtiefen von Gas- und Dieselstrahl direkt über den Massenanteil der Brennstoffe ermittelt werden. Die Abgrenzung der Strahlen erfolgt über einen Grenzwert von größer 0.1 Massen-% Brennstoff in einer Gitterzelle. Die maximale Eindringtiefe ist durch die Interaktion zwischen Brennstoffstrahl und Wand begrenzt. Zudem wird aus den Schattenaufnahmen als auch aus der CFD der maximale Strahldurchmesser D_{max} , wie in Abbildung 5.1 eingezeichnet, bestimmt.



Spitze des Dieselinjektors

initial erkannter Strahl

Abbildung 5.1: Veranschaulichung der Strahlerkennung und Berechnung der Eindringtiefe aus den Schattenaufnahmen.

5.1 Gaseinblasung

Für die gegebenen Randbedingungen des Gasstrahls (Gasdruck 330 bar, Brennraumdruck 75 bar bzw. 125 bar) ergibt sich ein maximales Düsendruckverhältnis p_0/p_{∞} von 4.40 bzw. 2.64. Nach der Charakterisierung unterexpandierter Strahlen aus Abschnitt 2.1.2 können diese Gasstrahlen der Gruppe der stark unterexpandierten bzw. unterexpandierten Strahlen zugeordnet werden. Die Praxisrelevanz dieser Unterscheidung beschränkt sich vorwiegend auf den unterschiedlich großen Einflussbereich der düsennahen Stroßstrukturen. Numerische Untersuchungen haben gezeigt, dass der Einflussbereich dieser Stoßstrukturen selbst bei einem Düsendruckverhältnis von 4.40 sehr gering ist. In Abhängigkeit der Netzauflösung im Düsennahbereich und damit der Qualität der Abbildung der Stoßstrukturen konnte gezeigt werden, dass die Mischung und die Eindringtiefe des Strahls nur bis zu einer Lauflänge von etwa dem 5-10-fachen Düsendurchmesser beeinflusst werden [10]. Bei einem Düsendurchmesser des Gasinjektors von 0.9 mm entspricht dies einer beeinflussten Lauflänge von maximal 9 mm, was bei einer freien Lauflänge des Strahls im Brennraum von 97 mm weniger als 10 % entspricht. Die Plausibilität dieser Erkenntnis kann anhand der empirischen Korrelationen für die Lage des ersten machschen Knotens nach Niessen [64] und Young [102] aus Abschnitt 2.1.3 überprüft werden. Für einen Durchmesser $D_0 = 0.9$ mm, einen Druck $p_0 = 330$ bar und einen Brennraumdruck $p_{\infty} = 75$ bar liegt dieser bei $x/D_0 \approx 1.25$. Zusammen mit der Erkenntnis von Yu und Vuorinen [103], dass bei stark unterexpandierten Strahlen mit Druckverhältnis $p_0/p_{\infty} > 5$ die Stoßstrukturen nach etwa 5 Wiederholungen vollständig dissipiert sind, ergibt sich für den Einflussbereich dieselbe Größenordnung wie aus den numerischen Untersuchungen.

Der Einfluss der Netzauflösung auf die Eindringtiefe des Gasstrahls wird nachfolgen zunächst generisch an einer vereinfachten Konfiguration untersucht. Dazu werden ein konstantes, vereinfachtes Brennraumvolumen mit einer freien Lauflänge des Gasstrahls von 85 mm und stationäre thermodynamische Bedingungen von 75 bar und 800 K angenommen. Für die thermische Zustandsgleichung wird die in Abschnitt 3.4 eingeführte Korrektur für reale Gase nach Redlich und Kwong [5] verwendet. Das in Abbildung 4.4 gezeigte Vorgehen zur Vernetzung der Strahlbereiche wird mit einer statischen Verfeinerung von 10 mm Länge bei einem Kegelwinkel von 20° angewendet. Die angegebene Netzfeinheit bezieht sich auf die minimal zulässige Zellgröße aufgrund dynamischer Verfeinerung (AMR) im gesamten Brennraum.

Ausgehend von einer minimalen Zellgröße von 1 mm wird die minimal zulässige Zellgröße sukzessive halbiert, bis eine Konvergenz der Eindringtiefe erreicht ist. Der zeitliche Verlauf der Eindringtiefen ist für die untersuchten Variation in Abbildung 5.2a dargestellt. Bei einer minimalen Zellgröße von 0.125 mm ist die Änderung im Vergleich zu 0.25 mm gering, sodass von einer Netzkonvergenz ausgegangen werden kann.

Auf Basis der notwendigen Netzauflösung kann die Gaseinblasung nun für die in Abschnitt 4.4 eingeführten Betriebspunkte unter realen Randbedingungen im Brennraum validiert werden. Es wird eine Netzauflösung



(a) Vergleich der Eindringtiefe des Gasstrahls für verschiedene Netzauflösungen an einer vereinfachten Brennraumgeometrie.(b) Vergleich der Eindringtiefe zwischen Messung und Berechnung mit zwei verschiedenen Dissipationskonstanten unter Realgas-



b) Vergleich der Eindringtiefe zwischen Messung und Berechnung mit zwei verschiedenen Dissipationskonstanten unter Realgaskorrektur sowie mit Idealgasverhalten (C_{ε1} = 1.60) im Brennraum für den hohen Betriebspunkt.

Abbildung 5.2: Netzstudie und Validierung der Eindringtiefe für die Gaseinblasung.

mit minimaler Zellgröße von 0.125 mm verwendet. Abbildung 5.2b zeigt exemplarisch beim hohen Betriebspunkt einen Vergleich des Verlaufs der Eindringtiefen von drei wiederholten Messungen mit gleichen Anfangsund Randbedingungen mit der in der CFD berechneten Eindringtiefe. Unter Verwendung des RNG k- ϵ -Modells mit den von Yakhot und Smith [101] postulierten Konstanten zeigt sich ein deutlich zu langsames Eindringverhalten des Gasstrahls (Dissipationskonstante $C_{\epsilon 1}$ = 1.42). Einen Ansatz zur Erklärung dieses Verhaltens liefert die in Abschnitt 2.1.3 beschriebene empirische Korrelation für die Eindringtiefe nach Ouellette [66], welche auf der Annahme basiert, dass sich der Strahl ab einer Eindringtiefe von etwa 20 mal dem Düsendurchmesser D₀ selbstähnlich verhält. Konkret bedeutet dies, dass das Verhältnis aus maximalem Strahldurchmesser D_{max} (am Strahlkopf) zu Eindringtiefe x als konstant angenommen werden kann. Für die beiden Betriebspunkte ergibt sich dieses Verhältnis D_{max}/x aus der Objekterkennung in den Schattenaufnahmen über die Zeit zu 0.30-0.32, aus den CFD Rechnungen mit $C_{\epsilon 1}$ = 1.42 hingegen zu 0.33-0.35. Die zu starke Aufweitung und zu geringe Eindringtiefe des Strahls in der CFD kann auf eine zu hohe turbulente Dissipationsrate ϵ zurückgeführt werden. Eine Erhöhung der Produktionsrate der Reynolds-Spannungen in der ϵ -Transportgleichung (Gleichung 3.11), durch Erhöhung der Dissipationskonstante auf den Wert $C_{\epsilon 1} = 1.60$, zeigt für beide Betriebspunkte ein deutlich verbessertes Eindringverhalten. Diese Beobachtung ist im Einklang mit den in der Literatur beschriebenen theoretischen Zusammenhängen für Freistrahlen, nach welchen für Strömungen mit einer erhöhten mittleren Streckungsrate zu deren Berücksichtigung der Wert der Konstante $C_{\epsilon 1}$ angehoben werden kann [68, 101]. Der große Vorteil dieser Vorgehensweise gegenüber physikalisch fundierterteren Modellen liegt vor allem in seiner Einfachheit aufgrund nur eines einzigen Freiheitsgrads. Exemplarisch ist das Eindringverhalten für den hohen Betriebspunkt in Abbildung 5.2b gezeigt. Abbildung 5.3 vergleicht für diesen Betriebspunkt zusätzlich die Schattenaufnahmen des Gasstrahls mit dem Dichtefeld aus der CFD an zwei ausgewählten Zeitpunkten. Gezeigt ist ein Schnitt durch die Interaktionsebene der beiden Strahlen.

Abschließend kann anhand der Eindringtiefe noch der Einfluss der Realgaskorrektur für die thermische Zustandsgleichung nach Redlich und Kwong [5] aus Abschnitt 3.4 ermittelt werden. Dazu ist in Abbildung 5.2b die Eindringtiefe des Gasstrahls für $C_{\epsilon 1} = 1.60$ ohne Berücksichtigung dieser Korrektur dargestellt. Starke Abweichungen zeigen sich vor allem in der Frühphase der Injektion, während die Abweichung von den Messdaten für große Eindringtiefen nicht weiter zunimmt. Dies lässt sich durch die aufgrund der Nachexpansion sehr niedrigen Temperaturen im Bereich des Düsenaustritts und der damit verbundenen großen Abweichung vom Idealgasverhalten erklären. Dringt der Strahl weiter ein, gleicht sich die Strahltemperatur immer weiter an die Brennraumtemperatur an und die Abweichungen werden geringer.

5.2 Dieseleinblasung

Die Modellierung der Dieseleinblasung sowie des primären und sekundären Strahlaufbruchs erfolgt mit den in Abschnitt 3.1 vorgestellten Modellen. Eine Validierung des nicht reagierenden Dieselstrahls in Luft ist aufgrund von Selbstzündung noch während bzw. kurz nach Ende der Einspritzung weder für den hohen, noch für den niedrigen Betriebspunkt



Abbildung 5.3: Vergleich zwischen Schattenaufnahmen des Gasstrahls und dem Dichtefeld aus der CFD in einem Schnitt durch die Interaktionsebene der beiden Strahlen für den hohen Betriebspunkt an zwei ausgewählten Zeitpunkten.

möglich. Deshalb werden für eine Validierung des nicht reagierenden Dieselstrahls die Brennraumbedingungen auf 750 K und 70 bar abgesenkt und eine reduzierte Dieselmasse von 1.5 mg bei einem Dieseldruck von 1000 bar und einer Einblasdauer von 0.75 ms eingebracht. Unter diesen Bedingungen wird eine Selbstzündung des Diesels in Luft unter Sicherstellung einer realistischen Einblasdauer verhindert. Darauf aufbauend kann dann die Validierung der Reaktionskinetik der Zündung in Kapitel 6 durchgeführt werden.

Die Validierung der Dieseleinblasung erfolgt anhand der Eindringtiefe des verdampften n-Heptans. Dies ist deshalb sinnvoll, da aus den experimentellen Daten in den meisten Fällen nicht klar zwischen Flüssig- und Gasphase unterschieden werden kann, jedoch aufgrund des Dichteunterschieds eine klare und scharfe Grenze zwischen gasförmigem n-Heptan und Luft identifiziert werden kann.

Eine Netzstudie wird analog zu jener für die Gaseinblasung durchgeführt. Da der Dieselstrahl und der Gasstrahl später zusammen in den Brennraum eingebracht werden, muss auch für den Dieselstrahl im RNG k- ϵ -Modell die angepasste Dissipationskonstante von $C_{\epsilon 1} = 1.60$ verwendet werden. Abbildung 5.4a zeigt die Eindringtiefe des n-Heptans für vier verschiedene Netzauflösungen. Wie bei der Gaseinblasung zeigt sich auch hier zwischen der minimalen Zellgröße von 0.125 mm und 0.25 mm kein signifikanter Unterschied mehr. Die Anzahl an Tropfenpaketen, sogenannten Parcels, wird für die Netzstudie auf 50.000 initial eingebrachte Tropfen begrenzt. Eine anschließende Validierung dieser Annahme durch Verdoppelung bzw. Halbierung der Anzahl an Parcels für das Netz mit 0.125 mm brachte keine ersichtliche Änderung der Eindringtiefe der Gasphase.



(a) Vergleich der Eindringtiefe des Dieselstrahls für verschiedene Netzauflösungen an einer vereinfachten Brennraumgeometrie.

(b) Vergleich der Eindringtiefe für zwei Dissipationskonstanten mit Messungen bei Brennraumbedingungen von 750 K und 70 bar.

Abbildung 5.4: Netzstudie und Validierung der Eindringtiefe für die Dieseleinblasung.

Ein Vergleich der berechneten Eindringtiefe der Gasphase aus der CFD mit der aus den Schattenaufnahmen ermittelten Eindringtiefe ist in Abbildung 5.4b gezeigt. Die Auswertung der Eindringtiefe anhand der Schattenaufnahmen ist nur möglich, solange ein signifikanter Dichteunterschied zwischen Strahl und Brennraum erkennbar ist, während die Auswertung der CFD-Daten auch bei deutlich größeren Eindringtiefen noch möglich ist. Für eine Netzauflösung von 0.125 mm und $C_{\epsilon 1} = 1.60$ folgt die berechnete Eindringtiefe sehr gut jener der Messung, während mit $C_{\epsilon 1} = 1.42$ das Verhältnis aus Eindringverhalten zu Strahlaufbruch nicht realistisch abgebildet wird. Abbildung 5.5 zeigt abschließend einen qualitativen Vergleich der Schattenaufnahmen des Dieselstrahls mit dem Dichtefeld aus der CFD für zwei ausgewählte Zeitpunkte in einem Schnitt durch die Interaktionsebene der beiden Strahlen.



Abbildung 5.5: Vergleich zwischen Schattenaufnahmen des Dieselstrahls und dem Dichtefeld aus der CFD in einem Schnitt durch die Interaktionsebene der beiden Strahlen für die Brennraumbedingungen 750K und 70bar an zwei ausgewählten Zeitpunkten.

5.3 Fazit

Die Validierung des Strömungs- und Mischungsfeldes wurde anhand eines Abgleichs zwischen experimentellen und numerischen Eindringtiefen des nicht reagierenden Gas- und Dieselstrahls durchgeführt. Sowohl für den Gas- als auch für den Dieselstrahl wurde eine Studie zur Gitterkonvergenz durchgeführt, durch welche eine minimal nötige Zellgröße von 0.125 mm identifiziert wurde. Für die Gaseinblasung wurde gezeigt, dass Realgaseffekte vor allem in der Frühphase der Injektion einen großen Einfluss auf die Eindringtiefe haben und daher berücksichtigt werden sollten. Für die Abbildung des Strahlaufbruchs bei der Dieseleinblasung wurde eine Parcelanzahl von 50.000 als ausreichend identifiziert.

Eine initial festgestellte Abweichung der Eindringtiefe wurde durch die Analyse des maximalen Strahldurchmessers im Verhältnis zur Eindringtiefe untersucht und mit der auf theoretischen Überlegungen aufbauenden empirischen Korrelation nach Ouellette [66] verglichen. Eine zu starke Aufweitung (D_{max}) und zu geringe Eindringtiefe (x) des Strahls in der CFD (Experiment: $D_{max}/x = 0.33-0.35$; CFD: $D_{max}/x = 0.30-0.32$) konnte auf eine zu hohe turbulente Dissipationsrate ϵ zurückgeführt werden. Final konnte gezeigt werden, dass für eine qualitativ gute Abbildung des Mischungsfeldes für Gas- und Dieselstrahl die Dissipationskonstante im RNG k- ϵ -Modell auf den Wert 1.60 erhöht werden muss.

6 Dieselzündung in Luft- und Erdgas/Luft-Atmosphäre

Im vorherigen Kapitel wurde mit der Validierung der kalten Strömung der Diesel- und Gaseinblasung die Grundlage für die Modellierung des HPDF-Brennverfahrens geschaffen. Eine Restriktion hinsichtlich der Verbrennungsmodellierung ist dabei bisher nicht erfolgt. Die Verbrennungsmodellierung auf Basis detaillierter Chemie bietet, wie in Kapitel 1 erläutert, den Vorteil einer flexiblen und umfangreichen Beschreibung der Zündung sowie der vorgemischten und nicht-vorgemischten Verbrennung im Brennraum. Die Voraussetzung für diese Art der Verbrennungsmodellierung ist eine zuverlässige Beschreibung der Reaktionskinetik über den gesamten Bereich der möglichen thermodynamischen Randbedingungen.

Der Vergleich der chemischen und turbulenten Zeitskalen auf Basis der turbulenten Damköhler-Zahl in Abschnitt 2.5 zeigt den größten Einfluss der Reaktionskinetik im Bereich der Dieselzündung ($Da_t \ll 1$). Die Selbstzündung des Dieselkraftstoffs beeinflusst maßgeblich nicht nur den Zeitpunkt des Beginns der Wärmefreisetzung, sondern, aufgrund der Interaktion mit dem Gasstrahl und den transienten thermodynamischen Bedingungen im Brennraum, auch deren Verlauf. Im Unterschied zur Selbstzündung in Dieselmotoren kann beim HPDF-Brennverfahren, abhängig von der Betriebsstrategie, eine Dieselzündung in reiner Luft oder in einem Gemisch aus Erdgas und Luft erfolgen. Diese möglichen Fälle müssen daher bei der Auswahl und Bewertung der Reaktionskinetik berücksichtigt werden. Für eine detaillierte kinetische Analyse des Selbstzündprozesses werden die komplexen Mehrkomponenten-Brennstoffe durch den Einsatz von Referenzkraftstoffen vereinfacht [1,9, 46]. In dieser Arbeit werden die Referenzkraftstoffe Methan für Erdgas und n-Heptan für Diesel verwendet.

Um die chemischen Prozesse der Dieselzündung unter Einfluss von Methan in der Luft zu analysieren, haben Khalil und Karim [42] einen komplexen Reaktionsmechanismus bestehend aus mehreren hundert Spezies mithilfe von Kinetiken aus mehreren verschiedenen Quellen erstellt. Dieser Mechanismus wurde zur Berechnung von Zündverzugszeiten eines stöchiometrischen n-Heptan/Luft-Gemischs mit variablem Methan/n-Heptan-Verhältnis verwendet [43]. Bei einer Temperatur von 800K und einem Druck von 28 bar zeigen die Ergebnisse eine starke nichtlineare Erhöhung der Zündverzugszeiten mit steigendem Methan/n-Heptan-Verhältnis. Aggarwal [1] zeigte dasselbe Verhalten für unterschiedliche Äquivalenzverhältnisse bei einem Druck von 55 bar und verschiedenen Temperaturen über 900 K unter Verwendung eines deutlich kleineren Reaktionsmechanismus mit weniger als 100 Spezies. Beide Studien haben gemeinsam, dass die berechneten Daten nur mit experimentellen Daten aus Stoßrohrversuchen für Methan/Luft- und n-Heptan/Luft-Gemische validiert wurden, jedoch keine Validierungsdaten für homogene Methan/n-Heptan/Luft-Gemische verwendet wurden.

Basierend auf diesen und ähnlichen Untersuchungen werden häufig Reaktionsmechanismen für die Tabellierung von Zündverzugszeiten, Modellkalibrierungen oder CFD-Berechnungen auf Basis detaillierter Chemie ausgewählt. Obwohl bei der Dieselzündung ein chemischer Effekt von Erdgas durch die Reaktionsmechanismen berücksichtigt wird, beinhalten die genannten Validierungen weder experimentelle Daten für ternäre Gemische, noch bilden sie die bei der Einspritzung von Diesel in eine Erdgas/Luft-Umgebung auftretenden Gemischbildungsprozesse ab. Iida et al. [50] beobachteten, unter Verwendung einer schnellen Kompressionsmaschine (rapid compression machine - RCM) und eines Einloch-Dieselinjektors, eine verzögerte Dieselzündung bei Anwesenheit von Erdgas im Hintergrundgemisch. Zudem konnten die Autoren nachweisen, dass diese Verzögerung nur zu einem geringen Teil auf die reduzierte Sauerstoffkonzentration in der Mischung zurückzuführen ist. Schlatter et al. [85, 86] und Salaun et al. [82] berichten auf Basis von RCEM Versuchen von einer eindeutigen Verlängerung der Zündverzugszeiten bei zunehmend fetteren Methan/Luft-Hintergrundgemischen. Am selben Prüfstand untersuchten Srna et al. [91] auch den Einfluss verschiedener Parameter auf die Vor- und die (Haupt-)Zündung. Sie konnten zeigen, dass das Vorhandensein von Methan hauptsächlich die Zeit bis zur Vorzündung erhöht, während die Zeit zwischen der durch die Vorzündung entstehenden sogenannten kalten Flamme und der eigentlichen Zündung etwa konstant bleibt. Als Vorzündung wird bei der Dieselzündung ein kleiner Temperaturhub vor der Zündung bezeichnet, welcher vor allem die Bildung der für die Zündung notwendigen Radikale fördert [62]. Nach erfolgter Vorzündung spricht man von einer kalten Flamme, welche mit Einsetzen der Zündung in die eigentliche Verbrennung übergeht.

Alle bisherigen Untersuchungen zeigen zwar tendenziell einen Einfluss von Methan auf die Dieselzündung, stellen jedoch keine vollständige Validierungsbasis für grundlegende numerische Untersuchungen unter Berücksichtigung der transienten Mischung während der Dieseleinspritzung dar. In den nachfolgenden Abschnitten wird daher ein dreistufiges Verfahren zur umfassenden Validierung der Dieselzündung in Luftund Erdgas/Luft-Atmosphäre für RANS-CFD-Berechnungen vorgestellt. Dieses basiert auf Messungen unter genau bestimmten, motorrelevanten Randbedingungen und deckt einen weiten Bereich an Zündverzugszeiten sowie Mischungszuständen ab.

- 1. Im ersten Schritt werden Berechnungen an einem 0D homogen gerührten Reaktor mit Literaturdaten für homogene Gemische der Referenzkraftstoffe n-Heptan und Methan mit Luft verglichen. Basierend auf den Ergebnissen werden Reaktionsmechanismen für weitere Untersuchungen ausgewählt.
- 2. Anschließend werden Versuche an der RCEM vorgestellt, welche den spezifischen Gemischbildungsprozess bei der Dieseleinspritzung in ein ruhendes Erdgas/Luft-Gemisch unter genau definierten, quasistationären Randbedingungen abbilden. Die Eignung der Reaktionsmechanismen wird durch 3D RANS-CFD-Berechnungen auf Basis detaillierter Chemie bewertet, indem diese mit Ergebnissen aus Schatten- und OH*-Aufnahmen verglichen werden.
- 3. In einem dritten Schritt wird die Restriktion konstanter thermodynamischer Bedingungen aufgehoben. Die Dieseleinspritzung in der RCEM wird zeitlich so gewählt, dass sie bereits während der Kom-

pressionsphase erfolgt und sich dadurch die Brennraumbedingungen während der Einspritzung signifikant ändern. Durch dieses Vorgehen können deutlich längere Zündverzugszeiten erzielt werden. Dadurch wird einerseits eine Bewertung der Reaktionsmechanismen im Betriebsbereich nahe von Fehlzündungen ermöglicht und andererseits werden die Grenzen des Modellierungsansatzes der RANS-CFD auf Basis detaillierter Chemie aufgezeigt.

6.1 Datenerzeugung und Auswertung

Zur Erzeugung von Validierungsdaten für die RANS-CFD-Berechnungen wird die RCEM mit dem in Abschnitt 4.1 beschriebenen Messaufbau verwendet. Um im Brennraum der RCEM eine homogene Mischung aus Erdgas und Luft zu erzeugen, wird Erdgas unter Verwendung des Hochdruck-Gasinjektors vor Beginn der Kompression in den Brennraum eingebracht. Die Erdgasmenge, welche benötigt wird, um ein bestimmtes Brennstoff/Luft-Äquivalenzverhältnis Φ_{HG} im Hintergrundgemisch zu erzeugen, wird aus Druck, Temperatur und Brennraumvolumen vor der Kompression berechnet. Nach der Einspritzung von Erdgas wird der Brennraum bis zum Erreichen des gewünschten Startdrucks mit Luft gefüllt. Über den Startdruck und das Kompressionsverhältnis können unterschiedliche Endtemperaturen und -drücke im oberen Totpunkt (OT) eingestellt werden. Dieselinjektion und Verbrennung erfolgen dann nahe des OT. Für alle in diesem Abschnitt vorgestellten Experimente werden 1.5 mg Diesel bei einem Druck von 1000 bar und einer Einblasdauer von 0.75 ms eingespritzt.

Für einen direkten Vergleich von experimentellen und numerischen Ergebnissen müssen die Kriterien für die Bestimmung von Vorzündung und Zündung in beiden Fällen ebenfalls vergleichbar sein. Abbildung 6.1 zeigt exemplarisch die Verläufe der mittleren Intensität aus den Schattenaufnahmen (SG) im Strahl I_{SG} sowie der Intensität des OH* Signals I_{OH} , gemittelt über den gesamten Beobachtungsbereich. Da diese Intensitätsverläufe vom Erdgasanteil im Hintergrundgemisch abhängen, zeigt die Abbildung Verläufe für die Dieselinjektion in reine Luft (links, $\Phi_{HG} = 0$) und in eine stöchiometrische Erdgas/Luft-Mischung (rechts, Φ_{HG} = 1). Für beide Gemische sind vier Intensitätsverläufe in Abhängigkeit vom Einblasbeginn (EB) der Dieseleinspritzung dargestellt. Sie repräsentieren den Internsitätsverlauf für eine frühe Zündung (Zündung nach $\leq 0.75 \text{ ms}$), eine mittlere Zündung (Zündung nach >0.75 ms und $\leq 1.5 \text{ ms}$), eine späte Zündung (Zündung nach >1.5 ms) und eine Fehlzündung. Die Bildsequenz im unteren Teil von Abbildung 6.1 veranschaulicht exemplarisch den Zündfortschritt für eine mittlere Zündung bei Φ_{HG} = 0 (links) und eine späte Zündung bei Φ_{HG} = 1 (rechts).

Erfolgt keine Zündung, folgt I_{SG} der schwarzen Kurve. Während der Dieseleinspritzung (t_{EB} <0.75 ms) bleibt der Strahl durch die kontinuierliche Brennstoffzufuhr sehr dunkel und die Helligkeit steigt nur geringfügig an. Nach dem Ende der Injektion führt die Verdampfung und fortschreitende Gemischbildung zu einer Verringerung des Dichtegradienten zwischen dem Strahl und dem umgebenden Fluid und damit zu einer Erhöhung der Helligkeit. Da die Dichte im Strahl nicht durch chemische Reaktionen beeinflusst wird, gleicht sich I_{SG} allmählich der Hintergrundhelligkeit an ($I_{SG} \sim 0.7$).

Sobald die ersten mit einer Netto-Wärmefreisetzung verbunden chemischen Reaktionen starten (Vorzündung), nimmt die durchschnittliche Dichte im Strahl ab. Dadurch wird der Dichtegradient in Relation zum Hintergrundgemisch reduziert und die Wärmefreisetzung führt zu einem Anstieg von I_{SG} . Folglich ergibt sich im Verlauf eine Abweichung von der Kurve ohne Zündung. Im weiteren Verlauf der Reaktion sinkt die mittlere Strahldichte unter die Hintergrunddichte, so dass das Schattenbild wieder dunkler wird. Später in diesem Abschnitt wird die numerische Analyse des zündenden Dieselstrahls zeigen, dass die während der kalten Flamme freigesetzte Wärme ausreichend ist, um die durchschnittliche Dichte im Strahl unter die Hintergrunddichte abzusenken. Das lokale Maximum in I_{SG} kann daher verwendet werden, um den Beginn der kalten Flamme zu identifizieren.

Obwohl der wesentlich stärkere Temperaturanstieg während der Zündung die Dichte innerhalb des Strahls weiter reduziert, wird der bereits durch die Vorzündung ausgelöste Abfall von *I*_{SG} lediglich graduell verstärkt. Dies liegt daran, dass die Abnahme der Intensität während der Zündung zwar schnell und sehr stark, jedoch initial räumlich auf klei-



Abbildung 6.1: Zeitliche Entwicklung der Intensität im Strahl aus den Schattenaufnahmen (SG) I_{SG} sowie der Intensität des OH* Signals I_{OH} für $\Phi_{HG} = 0$ (links) und $\Phi_{HG} = 1$ (rechts); kombinierte SG/OH* Bilder für eine mittlere Zündung bei $\Phi_{HG} = 0$ (links) und eine späte Zündung bei $\Phi_{HG} = 1$ (rechts) zu ausgewählten Zeitpunkten.

ne Bereiche begrenzt ist (Zündung in Bildsequenzen in Abbildung 6.1). Aus diesem Grund ist die Zündung anhand der gemittelten Schatten-Intensität schwer zu identifizieren. Deshalb wird ein schneller lokaler Abfall der Schatten-Intensität unter 0.15 als ein robustes Kriterium für die Detektion der Zündung angenommen. Beginnt die Zündung bereits während der Injektion oder kurz nach Injektionsende, ändert sich das Verhalten signifikant. Während dieser frühen Zündung kann die Vorzündung, aufgrund des Vorhandenseins der Flüssigphase, nicht zuverlässig identifiziert werden. Darüber hinaus führen die fetten Bereiche innerhalb des Sprays unmittelbar nach der Zündung zu einer stark rußenden Flamme. Da die Schwarzkörperstrahlung der heißen Rußpartikel auch das sichtbare Lichtspektrum abdeckt, wird sie vom Schatten-System erkannt und führt zu einem starken Anstieg von ISG. In diesen Fällen erfolgt die Detektion der Zündung unter Zuhilfenahme der OH* Intensitätsverläufe. Während bei $\Phi_{HG} = 0$ für stark verdünnte Strahlen und eine späte Zündung das OH* Signal sehr verzögert einsetzt, kann für wenig vorgemischte Strahlen und kurze Zündverzugszeiten ein abrupter Anstieg zum Zeitpunkt der Zündung beobachtet werden. Bei Φ_{HG} = 1 ist dieser schnelle Anstieg während der Dieselzündung auch bei früher Zündung nicht erkennbar. Die OH* Intensität steigt in diesen Fällen erst dann an, wenn sich die Flamme im Hintergrundgemisch ausbreitet.

Für die Bewertung der Zündung in den numerischen Simulationen besteht die Herausforderung darin, ein Kriterium zu definieren, das dem experimentellen so nahe wie möglich kommt. Die Intensität aus den Schattenaufnahmen innerhalb des Strahls wird bis kurze Zeit nach der Zündung nicht von Rußleuchten beeinflusst und ist nur eine Funktion der Dichte. Es ist daher naheliegend, die Entwicklung des Dichtefeldes aus der numerischen Simulation zu betrachten, um den Reaktionsfortschritt zu verfolgen.

Für die Erkennung der Vorzündung wird die zuvor vorgestellte physikalische Interpretation des Maximums der durchschnittlichen Schatten-Intensität innerhalb des Strahls übernommen. Hierbei handelt es sich um den Zeitpunkt, zu dem die mittlere Dichte innerhalb des Strahlbereichs unter die Hintergrunddichte fällt. Zu diesem Zweck wird das Dichtefeld in der Brennkammer in eine Strahlzone und eine Hintergrundzone ohne Randeffekte unterteilt. Abbildung 6.2 zeigt exemplarisch die zeitliche Entwicklung der volumengemittelten Dichte im Strahl $\bar{\rho}$ für eine mittlere ($\Phi_{HG} = 0$) und eine späte Zündung ($\Phi_{HG} = 0.5$), sowie die mittlere Hintergrunddichte. Der Strahlbereich wird über einen Massenanteil an n-Heptan von größer 0.1 % festgelegt. Ein Vergleich mit dem Verlauf der Wärmefreisetzungsrate (heat release rate - HRR) \dot{Q} zeigt, dass der Beginn der kalten Flamme mit diesem Kriterium, unabhängig vom Vormischgrad und dem Methananteil im Hintergrundgemisch, gut zu erkennen ist. Im Gegensatz zu der in den Experimenten initial sehr lokal auftretenden Zündung, erfolgt diese in der Numerik aufgrund der idealisierten Bedingungen gleichmäßig über einen weiten Bereich im Strahl. Die Folge ist ein sehr schneller und klar definierter Anstieg der Wärmefreisetzungsrate. Daher kann die Zündung mithilfe eines Schwellwerts von 50 kJ/s direkt aus \dot{Q} bestimmt werden.



Abbildung 6.2: Erfassung der Vorzündung aus der mittleren Dichte des Dieselstrahls $\overline{\rho}$ sowie der Zündung aus der Wärmefreisetzungsrate (HRR) \dot{Q} für eine numerisch berechnete mittlere ($\Phi_{HG} = 0$) sowie späte ($\Phi_{HG} = 0.5$) Zündung.

6.2 0D homogen gerührter Reaktor

Im ersten Validierungsschritt wird eine Auswahl an Reaktionsmechanismen auf ihre grundsätzliche Eignung zur Abbildung der Oxidation von n-Heptan, Methan und deren Mischungen unter motorischen Randbedingungen untersucht. Dies geschieht durch den Vergleich von adiabaten, 0D homogen gerührten Reaktorrechnungen mit experimentellen Daten aus Stoßrohrversuchen. Die Zündeigenschaften von n-Heptan/Luft- und Methan/Luft-Gemischen wurden in der Vergangenheit ausführlich experimentell untersucht. Für motorrelevante Bedingungen liegen jedoch nur wenige Studien vor. Ciezki *et al.* [11] veröffentlichten am Stoßrohr gemessene Zündverzugszeiten für n-Heptan/Luft-Gemische über einen weiten Bereich von Äquivalenzverhältnissen für Temperaturen ab 700 K und Drücke bis 41 bar. Huang *et al.* [37] und Hashemi *et al.* [29] führten Messungen mit Methan/Luft-Gemischen unter stöchiometrischen Bedingungen bei einem Druck von 40 bar und Temperaturen zwischen 900 K und 1300 K durch. Die einzigen bekannten experimentellen Ergebnisse für Zündverzugszeiten eines homogenen n-Heptan/Methan/Luft-Gemisches bei erhöhtem Druck wurden von Herzler *et al.* [32] für ein globales Äquivalenzverhältnis von 2, bei einem Druck von 30 bar und verschiedenen Temperaturen veröffentlicht.

Für die numerische Untersuchung von ternären n-Heptan/Methan/Luft-Gemischen werden fast ausschließlich Reaktionsmechanismen eingesetzt, die ursprünglich für n-Heptan/Luft-Gemische entwickelt wurden. Durch die Berücksichtigung aller Reaktionsschritte, die notwendig sind, um die Zersetzung und Oxidation von langen Kohlenwasserstoffmolekülen zu beschreiben, beinhalten diese Mechanismen auch Methan als Zwischenprodukt sowie die Reaktionspfade der Methanoxidation. Eine Auswahl von fünf Reaktionsmechanismen wird nachfolgend zur Validierung herangezogen. Einzelheiten zu den Mechanismen sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst.

Abbildung 6.3 zeigt den Vergleich der mit dem CANTERA-Solver [26] berechneten Zündverzugszeiten mit Messdaten für stöchiometrische n-Heptan/Luft-Gemische bei 41 bar nach Ciezki *et al.* [11]. Obwohl alle Mechanismen für n-Heptan entwickelt wurden, wird eine gute Übereinstimmung mit den Messungen, insbesondere im Tieftemperaturbereich, nur durch den LLNL-, den Chalmers- und den Rahimi-Mechanismus erreicht. Aus diesem Grund beschränken sich alle weiteren Untersuchungen in diesem Kapitel nur auf diese drei Mechanismen.

Zündverzugszeiten für Methan/Luft-Gemische, berechnet mit den drei ausgewählten n-Heptan-Mechanismen und zusätzlich mit dem weit verbreiteten GRI3.0-Methan-Mechanismus [88] sind im Vergleich mit ex-

Name	Spez./Reakt.	Validierung	Institution	Referenz
LLNL	654/5258	p = 3 bar-80 bar, $\Phi = 0.3 \text{-} 1.0,$ T = 650 K- 1200 K	Lawrence Livermore National Laboratory	[59]
Chalmers	83/445	p = 3 bar-50 bar, $\Phi = 0.1\text{-}3.0,$ T = 650 K-1300 K	Chalmers Univ. of Technology	[95]
Rahimi	76/464	p = N/A, $\Phi = N/A,$ T = N/A	Sahand Univ. of Tech- nology	[76]
NANCY	360/1817	p = 1 bar-50 bar, $\Phi = 0.5\text{-}2.0,$ T = 600 K-1200 K	Université de Lorraine	[9]
CRECK	106/1738	p = 1 bar-50 bar, $\Phi = 0.25\text{-}3.0,$ T = 700 K-2000 K	Politecnico di Milano	[92]

Tabelle 6.1: Auswahl an Reaktionsmechanismen für n-Heptan, welche für motorische
Randbedingungen validiert wurden.

perimentellen Daten von Huang *et al.* [37] bzw. Hashemi *et al.* [29] in Abbildung 6.4 dargestellt. Für stöchiometrische Bedingungen, einem Druck von 40 bar und Temperaturen unter 1200 K überschätzt der GRI3.0-Mechanismus die Zündverzugszeiten. Der Rahimi-Mechanismus zeigt ein sehr ähnliches Verhalten, da seine Methankinetik auf jener des GRI3.0-Mechanismus basiert. Mit dem Chalmers-Mechanismus wird eine gute Übereinstimmung im Niedertemperaturbereich unterhalb von etwa 1100 K erreicht, wenngleich die Zündverzugszeiten leicht unterschätzt werden. Die Charakteristik des Verlaufs der Zündverzugszeiten über die Temperatur wird nur vom LLNL-Mechanismus korrekt wiedergegeben. Für Temperaturen größer 1100 K liegen die absoluten Werte jedoch weit über den Messwerten.

Abbildung 6.5 zeigt den Vergleich der Zündverzugszeiten der drei ausgewählten Mechanismen mit Messungen von Herzler et al. [32] für ein Gemisch aus beiden Brennstoffen und Luft. Der LLNL-Mechanismus liefert sehr gute Ergebnisse, während der Chalmers- und der Rahimi-


Abbildung 6.3: Zündverzugszeiten für homogene n-Heptan/Luft Mischungen bei verschiedenen Temperaturen, einem Druck von 41 bar und einem Äquivalenzverhältnis von 1.0. Die experimentellen Vergleichsdaten wurden von Ciezki *et al.* [11] gemessen.



Abbildung 6.4: Zündverzugszeiten für homogene Methan/Luft Mischungen bei verschiedenen Temperaturen, einem Druck von 40 bar und einem Äquivalenzverhältnis von 1.0. Die experimentellen Vergleichsdaten wurden von Huang et al. [37] bzw. Hashemi et al. [29] gemessen.

Mechanismus deutliche Abweichungen im Vergleich mit den Messdaten aufweisen. Obwohl das Gemisch ein niedriges n-Heptan/MethanMolverhältnis von 1/19 aufweist, scheint die Zündung von den n-Heptan-Eigenschaften dominiert zu werden. Dies wird einerseits durch den noch leicht vorhandenen negativen Temperaturkoeffizienten bei etwa 800 K klar. Andererseits zeigt der Rahimi-Mechanismus im Niedertemperaturbereich kürzere Zündverzugszeiten als der LLNL-Mechanismus, während das Verhalten für Methan/Luft-Gemische in Abbildung 6.4 umgekehrt ist.



Abbildung 6.5: Zündverzugszeiten für homogene n-Heptan/Methan/Luft Mischungen bei verschiedenen Temperaturen, einem Druck von 30 bar und einem Äquivalenzverhältnis von 2.0. Die experimentellen Vergleichsdaten wurden von Herzler *et al.* [32] für ein n-Heptan/Methan-Molverhältnis von 1/19 gemessen.

Obwohl insbesondere für ternäre Gemische der beiden Brennstoffe mit Luft nur begrenzte Validierungsdaten zur Verfügung stehen, kann mit dieser 0D-Validierung die allgemeine Eignung der Mechanismen für homogene Gemische bei konstanten Bedingungen nachgewiesen werden. Es ist jedoch nicht möglich einen Mechanismus auszuwählen, der die Diesel-Pilotzündung am besten repräsentiert, da die 0D-Bewertung stark vom betrachteten Bereich in Druck, Temperatur, Äquivalenzverhältnis und Brennstoffanteil abhängt. Eine detaillierte und systematische Auflösung dieser Parameter kann die Genauigkeit dieser Art von Validierung unter hohem experimentellen Aufwand zwar erhöhen, aufgrund des stark transienten Temperatur- und Mischfeldes des direkt eingespritzten Dieselstrahls ist es jedoch nicht einfach, den Parameterbereich zu definieren, welcher alle im Strahl auftretenden Zustände abdeckt.

6.3 Quasistationäre Bedingungen

Da es nicht möglich ist, den komplexen Prozess der Gemischbildung und des gleichzeitigen Reaktionsfortschritts bei der Dieseldirekteinspritzung durch vereinfachte 0D-Reaktorrechnungen abzudecken [14, 46], wird in diesem Abschnitt der Dieselstrahl im Rahmen von 3D-CFD-Berechnungen und RCEM Experimenten in die Validierung mit einbezogen. In der RCEM können Brennkammerdruck und -temperatur für diese Untersuchung nahezu konstant gehalten werden, obwohl der Kompressionsbewegung des Kolbens bedingt durch den Antriebsmechanismus der RCEM immer eine Expansionsbewegung folgt. Die Brennraumbedingungen ändern sich innerhalb von ± 1.5 ms um den OT nur geringfügig, so dass Zündverzugszeiten von bis zu 3 ms unter quasistationären Bedingungen erreicht werden können. Die Einspritzung muss dazu etwa 1.5 ms vor dem OT beginnen. Die Gültigkeit dieser Annahme wird später in diesem Abschnitt verifiziert, wenn der Effekt der geringen Abweichung zwischen Einspritzbeginn und Zündung auf die experimentellen und numerischen Ergebnisse quantifiziert wird.

Um ein Feld aus Zündverzugszeiten für einen weiten Bereich von Brennkammerdrücken (50 bar-125 bar) und -temperaturen (750 K-870 K) im OT zu erhalten, wird das Verdichtungsverhältnis an der RCEM für verschiedene Startdrücke variiert. Dies erfolgte für drei verschiedene Erdgas/Luft-Gemische im Brennraum ($\Phi_{HG} = [0, 0.5, 1]$), welche die Dieselzündung in reiner Luft, in einem mageren und in einem stöchiometrischen Erdgas/Luft-Gemisch repräsentieren. Im linken Teil in Abbildung 6.6 stellt jeder schwarze Punkt in den Konturplots einen Messpunkt dar, wobei aus den Messdaten die mittlere Temperatur *T* und der mittlere Druck *p* zwischen Einblasbeginn (EB) und Zündung berechnet wurden. Aus den Messpunkten wurden durch Interpolation kontinuierliche Flächen der Zündverzugszeit erzeugt. Obwohl die einzelnen Messpunkte an der RCEM nicht wiederholt wurden, kann aufgrund der hohen Genauigkeit bei der Bestimmung der Umgebungsbedingungen und der sehr glatten Interpolationsflächen eine signifikante Abweichung der gemessenen Zündverzugszeiten vom statistischen Mittelwert ausgeschlossen werden.

Mit steigendem Erdgasgehalt im Hintergrundgemisch zeigen die Experimente eine verzögerte Pilotzündung über den gesamten Bereich von T und p. Unabhängig vom Hintergrundgemisch zeigt sich eine stetige Abnahme der Zündverzugszeiten mit steigender Temperatur und steigendem Druck. Da der Druck im Allgemeinen einen wesentlich geringeren Einfluss auf die Zündverzugszeit aufweist als die Temperatur, wird die Dimensionalität zu Validierungszwecken durch Interpolation der Zündverzugszeiten aus den Messungen bei einem mittleren Druck von p = 80 bar reduziert. Die sich ergebenden Kurven sind für die drei Hintergrundgemische im rechten Teil in Abbildung 6.6 als durchgezogene Linie dargestellt.

Um den Einfluss der leicht variierenden Temperatur- und Druckverhältnisse im Brennraum zwischen EB und Zündung zu bewerten, wurde das 10. und 90. Perzentil dieser Abweichung berechnet. Anschließend wurden die gemessenen Zündverzugszeiten (schwarze Punkte im p/T-Plot) innerhalb dieses Temperatur- und Druckbereichs auf der interpolierten Fläche verschoben und die Zündverzugszeiten an diesen Stellen ausgewertet. Die resultierende Messunsicherheit wird durch den schattierten Bereich um die experimentellen Ergebnisse bei konstantem Druck in Abbildung 6.6 dargestellt. Diese Abweichung beträgt für lange Zündverzugszeiten bei niedrigen Temperaturen weniger als 10% und nimmt für kürzere Zündverzugszeiten bei höheren Temperaturen deutlich ab. Der geringe Einfluss der leicht veränderlichen Druck- und Temperaturrandbedingungen auf die gemessenen Zündverzugszeiten rechtfertigt eine vereinfachte Annahme konstanter Randbedingungen für die 3D-CFD Simulationen. Die Dieseleinspritzung wird daher unter der Annahme einer Brennkammer mit konstantem Volumen, konstantem Anfangsdruck und konstanter Anfangstemperatur simuliert, wodurch die Rechenzeit gegenüber transienten Bedingungen deutlich reduziert wird. Dieses vereinfachte Vorgehen wird in allen für diesen Abschnitt durchgeführten Simulationen verwendet.



Abbildung 6.6: Experimentell ermittelte Zündverzugszeiten der Dieseleinspritzung in Hintergrundgemische mit unterschiedlichem Methananteil Φ_{HG} unter quasistationären Bedingungen in Abhängigkeit von Druck und Temperatur (links) sowie der Vergleich zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen bei einem konstanten Druck von *p* = 80 bar (rechts). Zunächst werden die Ergebnisse der 3D-CFD-Berechnungen im rechten Teil von Abbildung 6.6 für die einzelnen Mechanismen mit den experimentellen Ergebnissen für die Dieselzündung in reiner Luft verglichen. Die in den vorangegangenen 0D-Berechnungen für die Mechanismen beobachteten Trends bestätigen sich auch bei der transienten Dieseleinspritzung (Abbildung 6.6, $\Phi_{HG} = 0$). Dies ist besonders bemerkenswert, da die Versuchsdaten in Abbildung 6.3 anhand von Stoßrohrversuchen mit n-Heptan gemessen wurden, während für die Experimente in diesem Abschnitt Diesel verwendet wurde. Die gute Übereinstimmung der Zündeigenschaften von n-Heptan mit jenen von Diesel ist damit bestätigt.

Obwohl der LLNL-Mechanismus der mit Abstand umfangreichste der drei ausgewählten Mechanismen ist, überschätzt er die gemessenen Zündverzugszeiten für die Dieselzündung in reiner Luft sowie in den beiden untersuchten Methan/Luft-Gemischen deutlich. Die gute Übereinstimmung der mit diesem Mechanismus berechneten Ergebnisse mit Messdaten im Rahmen der 0D-Validierung eines ternären Methan/n-Heptan/Luft-Gemisches in Abbildung 6.5 wird bei der Diesel-Direkteinspritzung unter quasistationären Bedingungen nicht bestätigt. Hier zeigt sich sogar ein konträres Verhalten, denn die Abweichungen zwischen berechneten und gemessenen Zündverzugszeiten nehmen mit steigendem Methangehalt im Hintergrundgemisch noch weiter zu. Außerdem ist bei Temperaturen unter 800 K-825 K keine Zündung zu beobachten.

Der Rahimi-Mechanismus sagt für n-Heptan/Luft-Gemische kürzere Zündverzugszeiten vorher, als sie die Experimente zeigen. Die Zunahme der Zündverzugszeiten bei steigendem Methananteil im Hintergrundgemisch wird überschätzt, wodurch der Fehler bei $\Phi_{HG} = 0$ kompensiert wird und sich insgesamt für $\Phi_{HG} = 0.5$ und $\Phi_{HG} = 1$ eine gute Vorhersagequalität ergibt. Abgesehen davon ist der Rahimi-Mechanismus nicht dazu in der Lage, am zunehmend mager werdenden Brennstoffstrahl Zündverzugszeiten von mehr als 2 ms zu erzeugen und kann daher die Zündung bei Temperaturen unter 775 K nicht vorhersagen.

Die Leistungsfähigkeit des Chalmers-Mechanismus muss abhängig vom Temperaturbereich bewertet werden. Während bei zunehmendem Methananteil im Hintergrundgemisch unter etwa 825K gegenüber der Zündung in Luft eine langsamere Zündung vorhergesagt wird, ist bei Temperaturen über 825 K keine Änderung der Zündverzugszeit zu beobachten. Im Gegensatz dazu hat sich auf Basis der 0D-Validierungsdaten in diesem Temperaturbereich eine deutlich spätere Zündung gezeigt. Dieses widersprüchliche Verhalten verdeutlicht erneut die Wichtigkeit der Berücksichtigung der transienten Dieseleinspritzung, da die Gemischzusammensetzung nicht nur zeitabhängig ist, sondern mit zunehmendem Methananteil im Hintergrundgemisch auch das globale Brennstoff/Luftverhältnis ansteigt. Im Vergleich zu den beiden anderen Mechanismen ist der Chalmers-Mechanismus als einziger dazu in der Lage, eine Zündung bis etwa 760 K präzise vorherzusagen, und damit die experimentell beobachteten Grenzen für die verschiedenen Hintergrundgemische wiederzugeben.

6.4 Transiente Bedingungen

Auch wenn die quasistationäre Annahme den isolierten Effekt der transienten Mischung auf die Zündverzugszeiten widerspiegelt, ist diese Annahme im tatsächlichen Motorbetrieb nicht gerechtfertigt, da sich die thermodynamischen Bedingungen während der Kompression und Expansion stark ändern. In HPDF-Motoren erfolgt die Gaseinspritzung typischerweise bereits während der Kompressionsphase, um den Schwerpunkt der Verbrennung im Bereich kurz nach OT zu halten. Die Dieseleinspritzung kann parallel dazu früher oder auch leicht später erfolgen. Bei der Dieseleinspritzung unter relativ kalten Brennraumbedingungen wird die Vormischung erhöht, wodurch die Zündung aufgrund der starken Abmagerung des Strahls behindert wird. Dem gegenüber steht jedoch eine Beschleunigung der Chemie durch den Anstieg von Temperatur und Druck während der Verdichtung. So können je nach Einspritzzeitpunkt von Diesel und Gas deutlich längere Zündverzugszeiten auftreten als unter stationären Bedingungen.

Transiente thermodynamische Bedingungen während der Dieseleinspritzung werden an der RCEM durch eine Verschiebung des EB der Dieseleinspritzung nach vorne erzeugt. Es werden zwei verschiedene Einspritzzeitpunkte untersucht. Ein EB bei 3 ms vor OT (-3 ms) soll den

Einfluss der transienten thermodynamischen Bedingungen auf die Zündverzugszeiten zeigen, welche auch unter quasistationären Bedingungen erreicht werden können ($\tau < 3 \text{ ms}$). Anhand des EB 6 ms vor OT (-6 ms) werden nochmals deutlich längeren Zündverzugszeiten zur Bewertung der Mechanismen erreicht. Da sich die Mechanismen unter quasistationären Bedingungen zwischen $\Phi_{HG} = 0.5$ und $\Phi_{HG} = 1$ hinsichtlich der Qualität der Ergebnisse kaum unterscheiden, sich die Ergebnisqualität jedoch von Φ_{HG} = 0 zu Φ_{HG} = 0.5 stark ändert, wird für die transienten Bedingungen der Bereich um $\Phi_{HG} = 0.5$ mit $\Phi_{HG} = [0, 0.455, 0.556, 0.714]$ (entspricht $\lambda_{HG} = [\infty, 2.2, 1.8, 1.4]$) detaillierter aufgelöst. Die Bedingungen im OT werden für alle Untersuchungen konstant bei 70 ± 0.5 bar und 780 \pm 3 K gehalten. Dies wird durch eine sorgfältige Anpassung des Startdrucks und des Verdichtungsverhältnisses an die unterschiedlichen Hintergrundgemische erreicht. Jede Messung wird fünfmal wiederholt, um statistische Abweichungen bei langen Zündverzugszeiten erfassen zu können. Abbildung 6.7 zeigt als Ergebnis dieser Untersuchungen den Beginn der kalten Flamme (Vorzündung) sowie die Zündung für die beiden Einspritzzeitpunkte als Funktion von Φ_{HG} .



Abbildung 6.7: Beginn der kalten Flamme und Zündung für verschiedene Äquivalenzverhältnisse Φ_{HG} bei EB 3 ms und 6 ms vor OT. Die thermodynamischen Bedingungen bei OT sind 70 bar und 780 K.

Unter moderat transienten Bedingungen mit EB 3 ms vor OT zeigt sich für zunehmend fettere Hintergrundgemische eine Zunahme der Zünd-

verzugszeit analog zu den Ergebnissen unter quasistationären Bedingungen. Der Beginn der kalten Flamme verzögert sich von 1.4 ms auf 1.9 ms und die Zündverzugszeit erhöht sich von 1.7 ms auf 2.5 ms. Die Streuung der Einzelmessungen liegt in allen Fällen unter 5 %. Diese Ergebnisse sind im Einklang mit den Erkenntnissen von Srna *et al.* [91], welche zeigen, dass 70-80 % der Zunahme der Zündverzugszeit auf die Änderung der Chemie der kalten Flamme zurückzuführen ist.

Auch bei EB 6 ms vor OT wird der Beginn der kalten Flamme mit zunehmend fetterem Hintergrundgemisch, ausgehend von einem deutlich höheren Ausgangsniveau bei $\Phi_{HG} = 0$, verzögert. Schattenaufnahmen an der RCEM zeigen, dass die kalte Flamme im Fall von -3 ms und -6 ms unabhängig vom lokalen Gemisch über den gesamten Strahl gleichzeitig startet. Diese Beobachtung steht im Einklang mit den Erkenntnissen aus anderen Untersuchungen. Genzale *et al.* [24] berichten, dass der Beginn der kalten Flamme in Reaktorsimulationen sowie unter Berücksichtigung der Verdampfungsenthalpie und der transienten Mischung unabhängig vom Äquivalenzverhältnis ist. Dies erklärt die geringe Streuung für den Beginn der kalten Flamme.

Das Zündverhalten ändert sich deutlich zwischen -3 ms und -6 ms. Der Zündmechanismus im Strahl ändert sich von einer simultan volumetrischen Zündung über den gesamten Strahl zu einer Zündung an lokalen Stellen, gefolgt von einer relativ langsamen Flammenausbreitung durch den Rest des Strahls. Dieses Verhalten ist in Abbildung 6.8 anhand von Schattenaufnahmen dargestellt. Aus der Bilderserie wird zudem ersichtlich, dass fette Tropfen am Injektor unabhängig vom Strahl selbstzünden. Bei moderaten Zündverzugszeiten zünden diese Bereiche nach erfolgter Strahl-Zündung. Mit zunehmend längeren Zündverzugszeiten erfolgt die Tropfenzündung in den injektornahen Bereichen vor der Zündung im Strahl selbst. Für die generische Betrachtung in diesem Abschnitt sowie für die Validierung der Mechanismen wird die Tropfen-Zündung nicht berücksichtigt.

Der Grund für die Änderung der Zündcharakteristik im Strahl besteht darin, dass aufgrund des lokal sehr mager werdenden Gemischs die Zündwahrscheinlichkeit, bedingt durch die starke nichtlineare Abhängigkeit der Zündverzugszeit von Temperatur und Äquivalenz-



Abbildung 6.8: Veranschaulichung der Mischung, der kalten Flamme, der Strahl-Zündung, der Tropfen-Zündung sowie der Flammenausbreitung anhand der Schattenaufnahmen für EB $-3 \,\text{ms}$ und $-6 \,\text{ms}$ vor OT (70 bar/780 K) bei Φ_{HG} von 0.556.

verhältnis, abnimmt. Infolgedessen ist ein drastischer Anstieg der Streuung auf bis zu 12% zu beobachten (siehe Abbildung 6.7). Außerdem ist eine Zündung des Dieselstrahls in reiner Luft aufgrund der starken Verdünnung nicht mehr möglich. Dies bedeutet, dass unter diesen sehr mageren Bedingungen der Effekt eines global fetteren Gemisches über den Effekt der kinetischen Verzögerung der Zündung durch Erdgas im Hintergrundgemisch dominiert.

Da die Variation von Φ_{HG} verglichen mit einer Verschiebung des Einblaszeitpunktes einen geringen Einfluss auf die Verlängerung der Zündverzugszeiten hat, beschränken sich die numerischen Untersuchungen auf den Effekt der erhöhten Vormischung unter transienten thermodynamischen Bedingungen bei einem festen Φ_{HG} von 0.556. Außerdem wird der LLNL-Mechanismus aufgrund der unter quasistationären Bedingungen beobachteten großen Abweichungen zu den Messwerten (Abbildung 6.6) nun nicht mehr berücksichtigt. Ausgehend von den Bedingungen der quasistationären Untersuchungen (70 bar/780 K im OT und EB –1 ms vor OT), wird der EB nun schrittweise auf 6 ms vor OT verschoben. Das obere Diagramm in Abbildung 6.9 zeigt diese Variation des EB relativ zum OT anhand des Temperaturverlaufs während der Kompression. Im unteren Diagramm derselben Abbildung werden die aus den Einzelmessungen gemittelten experimentellen Ergebnisse bei $-3 \,\text{ms}$ und $-6 \,\text{ms}$ mit dem numerisch bestimmten Einsetzen der kalten Flamme und der Zündung verglichen.

Der Rahimi-Mechanismus weist bei 70 bar, 780 K und Φ_{HG} = 0.556 bereits für EB 1 ms vor OT aufgrund seines schlechten Tieftemperaturverhaltens keine Zündung auf. Der Chalmers-Mechanismus hingegen zeigt eine Zündung für diesen EB und die Zündverzugszeit stimmt gut mit der gemessenen überein. Unabhängig vom Zündverhalten eignen sich beide Mechanismen gut für die Vorhersage der kalten Flamme, wobei die Ergebnisse des Chalmers-Mechanismus besser mit den gemessenen Zündverzugszeiten übereinstimmen. Wird der EB nach vorne verschoben, verlängert sich die Zündverzugszeit sowie die Zeit bis zum Beginn der kalten Flamme kontinuierlich. Die Zündung kann dabei nur durch den Chalmers-Mechanismus vorhergesagt werden und stimmt gut mit den gemessenen Werten überein. Ab einem EB von 4 ms vor dem OT kann auch der Chalmers-Mechanismus die Zündung nicht mehr vorhersagen und beide Mechanismen können nur anhand des Beginns der kalten Flamme verglichen werden. Bei 6 ms vor OT prognostizieren beide Mechanismen noch den Beginn der kalten Flamme, wobei die Ergebnisse des Chalmers-Mechanismus wiederum besser mit den gemessenen Zündverzugszeiten übereinstimmen. Die Zündung, wie sie im Experiment beobachtet wurde, kann von keinem der Mechanismen vorhergesagt werden.

Anhand der experimentellen Ergebnisse wird beobachtet, dass für EB 3 ms vor OT die Zündung homogen über den gesamten Strahl erfolgt,



Abbildung 6.9: Vergleich zwischen Experiment, Chalmers- und Rahimi-Mechanismus unter transienten Bedingungen bei $\Phi_{HG} = 0.556$. Beginn der kalten Flamme sowie Zündverzugszeiten sind für eine Variation des EB von 1ms bis 6ms vor OT dargestellt.

während sie sich bei 6 ms vor OT auf kleine isolierte Stellen innerhalb des Strahls beschränkt. Aufgrund dessen nimmt auch die Streuung der Ergebnisse signifikant zu. Das RANS-basierte Simulationsmodell kann geringfügige Unterschiede in Mischung und Temperatur auf den kleinsten Skalen innerhalb des Strahls nicht erfassen, da die Varianzen von Temperatur und Mischung im Modell innerhalb einer Zelle nicht berücksichtigt werden. Auch wenn diese Varianzen klein sind, ergibt sich bei einem frühen EB aufgrund des niedrigen Temperaturniveaus und der starken nichtlinearen Abhängigkeit der Zündverzugszeit von Temperatur und Äquivalenzverhältnis ein starker Einfluss auf den Zündprozess. Das Unvermögen, die Zündung bei EB früher als 3 ms vor OT vorherzusagen wird daher nicht allein durch die Qualität der Mechanismen verursacht sondern vorwiegend durch den gewählten numerischen Simulationsansatz.

6.5 Fazit

Als Ergebnis der durchgeführten Untersuchungen zur Reaktionskinetik der Dieselzündung in Luft- und Erdgas/Luft-Atmosphäre ergeben sich folgende Schlussfolgerungen:

- Eine Auswahl von Reaktionsmechanismen anhand 0D homogen gerührter Reaktorsimulationen ist nur bedingt sinnvoll, kann jedoch für eine Vorauswahl herangezogen werden.
- Unter Berücksichtigung der transienten Dieseleinspritzung ist eine klare Verlängerung der Zündverzugszeiten mit steigendem Methangehalt im Hintergrundgemisch zu beobachten. Methan hemmt also die Dieselzündung.
- Der Chalmers- und der Rahimi-Mechanismus liefern für die Zündverzugszeiten über den gesamten untersuchten Bereich realistische Werte, welche nahe an den gemessenen Werten liegen. Die experimentell ermittelte Zündgrenze im Temperaturbereich um 760 K kann jedoch nur durch den Chalmers-Mechanismus vorhergesagt werden. Für Untersuchungen im niedrigen Temperaturbereich nahe der Zündgrenze ist demnach der Chalmers-Mechanismus dem Rahimi-Mechanismus vorzuziehen.
- Unter stationären, als auch auch transienten thermodynamischen Bedingungen sagt der Chalmers-Mechanismus deutlich längere Zündverzugszeiten vorher als der Rahimi-Mechanismus.

• Für Zündverzugszeiten ab ca. 2.5-3.0 ms kann mit dem Chalmers-Mechanismus in Kombination mit einem RANS-Simulationsansatz keine Zündung mehr vorhergesagt werden, da geringfügige Unterschiede in Mischung und Temperatur auf den kleinsten Skalen innerhalb des Strahls nicht erfasst werden.

7 Einfluss der Reaktionskinetik auf den Verlauf der HPDF-Verbrennung

Nach der Selbstzündung des Diesels erfolgt die Entflammung des Gasstrahls in Abhängigkeit von der geometrischen Interaktion mit den heißen Dieselprodukten. Die Verbrennung des Gasstrahls erfolgt dann abhängig von den thermodynamischen Bedingungen im Brennraum, dem Grad der Gasvormischung sowie den strömungsmechanischen Randbedingungen. Der Einfluss der Reaktionskinetik von Methan auf den Verlauf der Verbrennung wird in den nächsten Abschnitten untersucht. Zunächst erfolgt eine Analyse des Einflusses der Methankinetik auf den Brennverlauf (Abschnitt 7.1). Auf Basis der Erkenntnisse dieser Untersuchung wird eine vereinfachte Reaktionskinetik für den hohen Betriebspunkt abgeleitet (Abschnitt 7.2). Anschließend wird der Einfluss der Interaktion zwischen Turbulenz und Chemie anhand des PaSR Modells untersucht (Abschnitt 7.3). Abschließend wird anhand eines Vergleichs der vom Chalmers- und NANCY-Mechanismus gelieferten Ergebnisse mit Messdaten gezeigt, welchen Einfluss eine unzureichende Abbildung der n-Heptan Kinetik auf den Brennverlauf hat.

7.1 Einfluss der Reaktionskinetik von Methan auf den Brennverlauf

Die theoretischen Überlegungen aus Abschnitt 2.5 zeigen, dass der Einfluss der Reaktionskinetik auf den Brennverlauf während der Methanverbrennung maßgeblich vom Grad der Gasvormischung und der Brennraumtemperatur abhängt. Mithilfe der Damköhler-Zahl kann gezeigt werden, dass der Einfluss der Reaktionskinetik von Methan auf den Brennverlauf mit zunehmender Vormischung und abnehmenden Temperaturen zunimmt. Auch wenn n-Heptan durch die Interaktion der beiden Brennstoffstrahlen in den Gasstrahl eingemischt wird, kann aufgrund des geringen globalen n-Heptan zu Methan Verhältnisses davon ausgegangen werden, dass die Verbrennung des Gasstrahls überwiegend durch die Methankinetik beeinflusst wird. Um den Einfluss der Methankinetik auf den Brennverlauf zu untersuchen, werden zwei Mechanismen mit nahezu identischer n-Heptankinetik und unterschiedlicher Methankinetik herangezogen. In Kapitel 6 konnte gezeigt werden, dass der Chalmersund der Rahimi-Mechanismus die Dieselzündung im Vergleich mit experimentellen Daten am besten abbilden. Da der Rahimi-Mechanismus aus der Kombination des Chalmers-Mechanismus mit einer langsameren Methankinetik entstanden ist, ist es naheliegend, diese beiden Mechanismen für einen Vergleich heranzuziehen. Abbildung 6.6 zeigt, dass für n-Heptan/Luft-Gemische und Brennraumtemperaturen über 850 K der Chalmers- und der Rahimi-Mechanismus nahezu identische Zündverzugszeiten liefern. Für niedrigere Temperaturen zeigt der Rahimi-Mechanismus eine geringfügig schnellere Zündung im Vergleich zum Chalmers-Mechanismus. Im Gegensatz dazu ist in Abbildung 6.4 für die beiden Mechanismen ein beträchtlicher Unterschied der Zündverzugszeiten für Methan/Luft-Gemische auf Basis von 0D Reaktorrechnungen erkennbar. Ein Vergleich der laminaren Flammengeschwindigkeiten für Methan/Luft-Gemische ist in Abbildung 7.1 gezeigt. Der Vergleich mit Messdaten von Rozenchan et al. [81] bei 20 bar und initialen Temperaturen von 300 K weist darauf hin, dass über den Verlauf des Äquivalenzverhältnisses keiner der beiden Mechanismen die Messwerte präzise wiedergeben kann. Ein Vergleich der beiden Mechanismen untereinander zeigt, dass diese zum Teil um einen Faktor von zwei unterschiedliche Werte liefern. Für die im Brennraum vorherrschenden thermodynamischen Bedingungen (exemplarisch 800 K und 80 bar) bestätigt sich dieses Verhalten, wenngleich die relativen Unterschiede leicht geringer sind.

Zunächst erfolgt ein Vergleich der beiden Mechanismen beim hohen Betriebspunkt mit einer Kompressionsendtemperatur von 920 K. Unter diesen Bedingungen weichen die Zündverzugszeiten der beiden Mechanismen für n-Heptan/Luft-Gemische kaum voneinander ab. Für die Untersuchung wird ein Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen Gas- und Dieselstrahl gewählt. Der Einblasbeginn (EB) Diesel wird relativ zum oberen Totpunkt



initialen Druck von 20 bar und einer initialen Temperatur von 300 K.

(a) Vergleich mit gemessenen Daten bei einem (b) Vergleich untereinander bei einem initialen Druck von 80 bar und einer initialen Temperatur von 800 K.

Abbildung 7.1: Laminaren Flammengeschwindigkeiten für verschiedene Äquivalenzverhältnisse berechnet mit dem Chalmers- und dem Rahimi-Mechanismus.

(OT) konstant gehalten, während zur Beeinflussung der Gasvormischung der EB Gas 1 ms vor (-1 ms) bzw. 1 ms nach EB Diesel (+1 ms) gewählt wird. Diese Strategie gewährleistet in allen Fällen gleiche thermodynamische Bedingungen für die Dieselzündung.

Der Verlauf der Wärmefreisetzungsraten Q ist für die beiden Variationen in Abbildung 7.2 dargestellt. Wie erwartet, ist die Zündung des Pilotstrahls (n-Heptan) für den Chalmers- und den Rahimi-Mechanismus unabhängig vom EB Gas in beiden Fällen identisch. Zudem sind jedoch auch die Verläufe der HRR für EB Gas -1 ms über den gesamten weiteren Brennverlauf nahezu deckungsgleich. Dies trifft auch auf den Fall mit EB Gas +1 ms zu. Da die langsamere Reaktionskinetik den Verbrennungsprozess offensichtlich in keinem der beiden Fälle beeinflusst, ist die Methanverbrennung unter diesen thermodynamischen Randbedingungen eindeutig durch den Mischprozess begrenzt.

Abbildung 7.3 zeigt die HRR für die analoge Untersuchung beim niedrigen Betriebspunkt. Bei der Untersuchung des Einflusses der Methankinetik bei Temperaturen von 780K im OT ergibt sich ein geringer Un-



Abbildung 7.2: Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Einblaszeitpunkte, berechnet mit dem Chalmers- und dem Rahimi-Mechanismus für den hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.

terschied in der Dieselzündung. Im Vergleich zu anderen n-Heptan-Mechanismen ist der Unterschied zwischen Chalmers- und Rahimi-Mechanismus jedoch gering, was schon der Vergleich der Mechanismen in Abbildung 6.3 erwarten ließ. Bei EB Gas +1 ms ist der Einfluss der Dieselzündung auf den Beginn der Methanverbrennung gering, da die Interaktion der Dieselprodukte mit dem Gasstrahl nach der Zündung stattfindet. Wie beim hohen Betriebspunkt sind auch beim niedrigen Betriebspunkt die Verläufe der HRR nahezu deckungsgleich. Bei EB Gas -1 ms beeinflusst der Zeitpunkt der Dieselzündung den Brennverlauf stärker. Bei einer früheren Dieselzündung ist eine frühere Entflammung des Gasstrahls zu erwarten, wie durch den Rahimi-Mechanismus vorhergesagt. Ein Vergleich der HRR zeigt für den Rahimi-Mechanismus in diesem Fall wider erwarten jedoch eine verzögerte Entflammung des Gasstrahls sowie auch im weiteren Brennverlauf eine deutliche Verzögerung der Wärmefreisetzung gegenüber der Methanverbrennung mit dem Chalmers-Mechanismus. Durch die geringere Temperatur beim niedrigen Betriebspunkt ist die Methanverbrennung nun bei stärkerer Vormischung durch die Reaktionskinetik limitiert.

Die Ergebnisse zeigen, dass in drei der vier untersuchten Fälle die Verbrennung des Gasstrahls nahezu vollständig durch den Mischungspro-



Abbildung 7.3: Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Einblaszeitpunkte, berechnet mit dem Chalmers- und dem Rahimi-Mechanismus für den niedrigen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.

zess limitiert ist. Die Methankinetik gewinnt erst bei niedrigen Temperaturen und erhöhtem Vormischgrad zunehmend an Einfluss, wodurch die chemischen Zeitskalen an Relevanz gewinnen, während die Zeitskalen der Mischung an Relevanz verlieren. Es gibt demnach abhängig von den thermodynamischen Bedingungen im OT einen maximalen Vormischgrad, bis zu welchem die Wärmefreisetzung allein durch den in den Brennraum eingebrachten Gasmassenstrom und dessen Mischung mit der Luft bestimmt wird.

7.2 Mechanismus-Reduktion

In diesem Abschnitt wird das Ziel verfolgt, den vergleichsweise hohen Rechenaufwand für das in dieser Arbeit verwendeten Verbrennungsmodells auf Basis detaillierter Chemie im Vergleich zu Verbrennungsmodellen mit Ein- oder Zweischrittchemie zu verringern. Curran *et al.* [12] haben in ihrer Arbeit zur Modellierung der Dieselverbrennung alle wichtigen Reaktionsschritte der n-Heptankinetik zusammengetragen und herausgefunden, dass der Oxidationsprozess bei Temperaturen unter 700 K-800 K (je nach Druck und Äquivalenzverhältnis ergeben sich leichte Unterschiede) komplexer ist als bei höheren Temperaturen. Daher beinhalten Reaktionsmechanismen für die Beschreibung der Niedertemperaturkinetik zusätzliche Spezies und Reaktionen, welche für die Hochtemperaturkinetik nicht erforderlich sind. Der Chalmers-Mechanismus beinhaltet Nieder- und Hochtemperaturkinetiken, um beide Temperaturbereiche präziser erfassen zu können, was durch die Validierung bis zu einer Minimaltemperatur von 650 K nachgewiesen worden ist [95]. Zusammen mit der Erkenntnis aus dem vorherigen Abschnitt, dass der Einfluss der Reaktionskinetik von Methan beim hohen Betriebspunkt auch bei erhöhtem Vormischgrad gering ist, ergibt sich für den Chalmers-Mechanismus ein signifikantes Reduktionspotential. Eine Beeinträchtigung der Ergebnisqualität ist dabei nicht zu erwarten. In diesem Abschnitt wird daher ein reduzierter Reaktionsmechanismus für die HPDF-Verbrennung aus dem Chalmers-Mechanismus abgeleitet.

Die Reduktion des Reaktionsmechanismus erfolgt unter Verwendung der von Niemeyer et al. [63] entwickelten DRGEPSA-Methode (Direct Relation Graph with Error Propagation and Sensitivity Analysis). DRGEPSA ist im Softwarepaket CONVERGE [80] implementiert und kann ohne zusätzlichen Programmieraufwand verwendet werden. Die Reduktion des Basismechanismus beruht dabei auf dem Vergleich von Zündverzugszeiten, welche mittels 0D Reaktorrechnungen unter adiabaten Bedingungen berechnet werden. Das Reduktionspotenzial ergibt sich aus der maximal zulässigen Abweichung zwischen dem Basismechanismus und dem reduzierten Mechanismus an diskreten Stützstellen. Für die Temperatur werden Stützstellen im Bereich von 700K bis 1200K in Schritten von 50 K festgelegt. Die untere Grenze für die Temperatur orientiert sich dabei nicht an der Verdichtungsendtemperatur, sondern an den wesentlich kälteren Mischzonen aus Brennstoff und Brennraumluft. Für den Druck werden drei Stützstellen im Bereich von 40 bar bis 120 bar vorgegeben. Die Stützstellen für das Äquivalenzverhältnis reichen vom mageren (0.4) bis in den fetten (2.5) Bereich und berücksichtigen auch eine Mischungen der beiden Brennstoffe n-Heptan und Methan. Neben den beiden Brennstoffen und Luft sind einige Spezies, welche zwingend im reduzierten Mechanismus enthalten sein sollen, von der Reduktion ausgenommen. Schiffner et al. [84] konnten zeigen, dass CH₃, CH₂O, OH, H₂O und H₂O₂ wichtige Spezies während der Zündung von n-Heptan/Methan/LuftGemischen sind. Diese Spezies werden deshalb nicht zur Reduktion zugelassen. Um die Fähigkeit des Basismechanismus zur Vorhersage der COund NO_x-Bildung zu erhalten, werden auch alle für diese Teilmechanismen relevanten Spezies in die Liste der zu erhaltenden Spezies aufgenommen. Bei der DRGEPSA-Methode wird zunächst anhand der Reaktionspfade die Abhängigkeit aller zur Reduktion zulässigen Spezies von den zu erhaltenden Spezies geprüft. Auf Basis dieser Analyse wird die Anzahl der Reaktionspfade (und damit der Einzelreaktionen) reduziert, wodurch einzelne Spezies nicht mehr am Reaktionsprozess teilnehmen und somit im Mechanismus nicht mehr berücksichtigt werden müssen. Anschließend erfolgt eine weitere Reduktion durch eine Sensitivitätsanalyse für alle verbliebenen Spezies. Für eine maximale Abweichung der Zündverzugszeiten von 2% an einer Stützstelle kann der Chalmers-Mechanismus unter den gegebenen Randbedingungen von 433 Reaktionsgleichungen auf 244 reduziert werden. Die Anzahl an zu transportierenden Spezies reduziert sich dadurch von 83 auf 53. Alle Parameter für die Mechanismusreduktion sind in Tabelle 7.1 zusammengefasst.

Parameter	Wert
Name des Basismechanismus	Chalmers-Mechanismus
Größe des Basismechanismus	83 Spezies, 433 Reaktionen
Name des reduzierten Mechanismus	Chalmers _{red} -Mechanismus
Größe des reduzierten Mechanismus	53 Spezies, 244 Reaktionen
Druck	40, 80, 120 bar
Temperatur	700 K-1200 K (in 50 K Schritten)
Äquivalenzverhältnis	0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5
Massenanteil n-Heptan an Brennstoffmasse	$0, 0.5, 1 (m_{\text{n-Heptan}}/m_{\text{Brennstoff}})$
Fehlertoleranz der Zündverzugszeit	2 %
Zu erhaltende Spezies	C ₇ H ₁₆ , CH ₄ , CH ₃ , CH ₂ O, H ₂ O ₂ , H ₂ O, OH, CO, CO ₂ , N, N ₂ , N ₂ O, NO ₂ , O ₂

Tabelle 7.1: Zusammenfassung der Parameter zur Mechanismus-Reduktion.

Abbildung 7.4 zeigt die Wärmefreisetzungsraten für EB Gas 1 ms vor (-1 ms) bzw. 1 ms nach EB Diesel (+1 ms), berechnet mit dem Chalmersund dem reduzierten Chalmers-Mechanismus (Chalmers_{red}) beim hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen. Für beide Vormischgrade sind die Verläufe nahezu deckungsgleich. Somit kann für hohe Temperatur- und Druckbedingungen der Chalmers-Mechanismus durch den Chalmers_{red}-Mechanismus ersetzt werden, ohne dass wesentliche Genauigkeitseinbußen zu erwarten sind. Bei Verwendung des Chalmers-Mechanismus werden 70 % der gesamten Rechenzeit für die Berechnung des Verbrennungsfortschritts aufgewendet. Durch den Einsatz des reduzierten Mechanismus kann dieser Anteil nahezu halbiert werden und die gesamte Rechenzeit reduziert sich um etwa 30 %.



Abbildung 7.4: Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Einblaszeitpunkte, berechnet mit dem Chalmers- und dem Chalmers_{red}-Mechanismus für den hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.

7.3 Turbulenz-Chemie Interaktion

Die Definition des Begriffs Turbulenz-Chemie Interaktion (TCI) sowie dessen physikalische Beschreibung wurde in Abschnitt 3.6 ausführlich behandelt. Zudem wurde im selben Abschnitt ein einfaches Modell zur Berücksichtigung der TCI in RANS-CFD Simulationen, das sogenannte Patially-Stirred Reactor (PaSR) Modell, vorgestellt. Dieses Modell wurde in den CONVERGE-Solver unter Verwendung von benutzerdefinierten Funktionen integriert. In diesem Abschnitt wird das Modell dazu verwendet, um den Einfluss der TCI auf die Wärmefreisetzungsraten zu untersuchen. Dazu erfolgt wie in Abschnitt 7.1 eine Untersuchung für den hohen und den niedrigen Betriebspunkt mit einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen Gas- und Dieselstrahl. Erneut werden für die Variation der Gasvormischung zwei Zustände untersucht, EB Gas 1 ms vor (-1 ms) bzw. 1 ms nach EB Diesel (+1 ms). Der Verlauf der Wärmefreisetzungsraten (HRR) mit und ohne Verwendung des TCI Modells ist für den hohen Betriebspunkt in Abbildung 7.5 und für den niedrigen Betriebspunkt in Abbildung 7.5 dargestellt.



Abbildung 7.5: Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Einblaszeitpunkte, berechnet mit und ohne TCI Modell für den hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.

Für die Dieselzündung zeigt sich unabhängig von Betriebspunkt und Gasvormischung kein Einfluss des TCI Modells. Während der Dieselzündung ist die direkte Verwendung gemittelter Größen für die Berechnung der Speziesquellterme deshalb gerechtfertigt, da bis zum Zeitpunkt der Zündung in jedem Fall sichergestellt ist, dass die chemischen Zeitskalen weitaus größer sind als die turbulenten Zeitskalen. Nach Lucchini *et al.* [51] ist zudem die Varianz der Gemischzusammensetzung in den Zünd- und Reaktionsbereichen des Dieselsprays bei typischen Zündverzugszeiten (<1.5 ms) verschwindend gering. Bestätigt wird dies durch die Untersuchungen aus Abschnitt 6. Darüber hinaus haben mehrere Autoren in der Vergangenheit die Anwendbarkeit der Ver-



Abbildung 7.6: Wärmefreisetzungsraten (HRR) für zwei verschiedene Einblaszeitpunkte, berechnet mit und ohne TCI Modell für den hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.

brennungsmodellierung auf Basis detaillierter Chemie für die Niedertemperaturzündung und -verbrennung ohne die Verwendung von TCI nachgewiesen [24,62,87].

Ein signifikanter Einfluss des TCI Modells auf den Verlauf der Wärmefreisetzung während der Verbrennung des Gasstrahls ist für keinen der beiden Betriebspunkte zu beobachten. Die Entflammung des Gasstrahls an den heißen Dieselprodukten ist, analog zur Dieselzündung selbst, nahezu unbeeinflusst. Eine leichte Verzögerung der Wärmefreisetzung ist im Bereich der maximalen HRR und kurze Zeit danach zu beobachten. Mit fortschreitender Abnahme der Wärmefreisetzung im Bereich des Ausbrands gleichen sich die Wärmefreisetzungsraten soweit an, dass kein Unterschied mehr erkennbar ist und damit der Einfluss des TCI Modells in diesem Bereich in allen vier untersuchten Betriebszuständen als nicht vorhanden angesehen werden kann.

Insgesamt kann der Einfluss der mit dem PaSR-Modell berücksichtigten TCI Effekte auf den Verlauf der Wärmefreisetzung als vernachlässigbar angesehen werden. Alle nachfolgend in dieser Arbeit gezeigten Ergebnisse werden daher ohne Verwendung des TCI Modells berechnet.

7.4 Auswirkungen einer ungeeigneten n-Heptankinetik auf den Brennverlauf

Die vorherigen Kapitel haben möglicherweise den Eindruck vermittelt, dass die Reaktionskinetik in der HPDF-Verbrennung generell eine untergeordnete Rolle spielt. Dass dem nicht so ist, soll abschließend an einem Beispiel gezeigt werden. Dazu wird für den teilvorgemischten Fall beim hohen Betriebspunkt (920 K, -1 ms) der NANCY-Mechanismus [9] mit dem Chalmers-Mechanismus und mit RCEM-Messdaten verglichen. Der NANCY-Mechanismus zeigte im Vergleich zum Chalmers-Mechanismus in den 0D-Untersuchungen deutlich längere Zündverzugszeiten für n-Heptan/Luft-Gemische (Abschnitt 6.2, Abbildung 6.3) und eine deutliche Abweichung zu den Messdaten aus Stoßrohruntersuchungen. Aufgrund dieser Abweichung zeigt sich in Abbildung 7.7 eine deutlich verzögerte Dieselzündung. Dies hat einen Einfluss sowohl auf die Entflammung des Gasstrahls als auch auf den weiteren Brennverlauf, obwohl für diesen Fall, wie in Abschnitt 7.1 gezeigt wurde, die Methanverbrennung vorwiegend durch die Mischung limitiert ist.



Abbildung 7.7: Wärmefreisetzungsraten (HRR) berechnet mit dem Chalmers- und dem NANCY-Mechanismus im Vergleich mit Messdaten für den teilvorgemischten Fall beim hohen Betriebspunkt und einem Winkel von $\alpha = +10^{\circ}$ zwischen den Strahlen.

7.5 Fazit

Der Einfluss der Methankinetik auf den Brennverlauf wurde unter Verwendung des Chalmers- und des Rahimi-Mechanismus untersucht. Die beiden Mechanismen weisen eine nahezu identische n-Heptankinetik, jedoch eine deutlich unterschiedliche Methankinetik auf. Es konnte gezeigt werden, dass je nach Betriebspunkt und Grad der Vormischung eine Grenze existiert, ab welcher die chemischen Zeitskalen an Relevanz gewinnen.

Aus den Erkenntnissen zum Einfluss der Methankinetik auf den Brennverlauf lässt sich der Schluss ziehen, dass eine genaue Vorhersage der komplexen chemischen Prozesse für hohe Temperaturen über etwa 800 K-850 K Brennraumtemperatur nachrangig ist. Daher wurde aus dem Chalmers-Mechanismus ein reduzierter Mechanismus abgeleitet, durch welchen für den hohen Betriebspunkt eine Reduktion der Rechenzeit um etwa 30 % erreicht werden konnte.

Um den Einfluss der Turbulenz-Chemie-Interaktion auf den Brennverlauf zu untersuchen, wurde das in Abschnitt 3.6 vorgestellte PaSR-Modell zur Korrektur der Reaktionsraten implementiert. Für den hohen als auch für den niedrigen Betriebspunkt hat sich gezeigt, dass weder im vorgemischten noch im nicht-vorgemischten Fall ein signifikanter Einfluss auf die Methanverbrennung vorliegt.

Die Auswirkungen einer ungeeigneten n-Heptankinetik auf den Brennverlauf wurden anhand des NANCY-Mechanismus gezeigt. Hierbei wurde vor allem die Auswirkung der verzögerten Dieselzündung auf den gesamten Brennverlauf deutlich.

8 Verbrennung fremdgezündeter Erdgasstrahlen

Alle bisher verfolgten Untersuchungen verfolgen das Ziel, ein Simulationsmodell für die HPDF-Verbrennung von Erdgasstrahlen mit Diesel-Pilotzündung zu entwickeln. In diesem Kapitel wird das Simulationsmodell nun dazu verwendet, die Verbrennung fremdgezündeter Erdgasstrahlen im Detail zu untersuchen und vorherzusagen. Dazu wird im ersten Abschnitt die räumliche Interaktion von Gas- und Dieselstrahl mit Fokus auf der Zündung des Gasstrahls numerisch analysiert. Im zweiten Abschnitt wird die Verbrennung fremdgezündeter Erdgasstrahlen für unterschiedliche Gas-Vormischgrade berechnet und anschließend mit experimentellen Daten verglichen. Beide Untersuchungen werden für den hohen und niedrigen Betriebspunkt (Beschreibung der Betriebspunkte in Abschnitt 4.4) durchgeführt. Der hohe Betriebspunkt repräsentiert dabei die Bedingungen an einem Mittel- bzw. Volllastpunkt im Motor, während der niedrige Betriebspunkt stellvertretend für einen Niedriglastpunkt bzw. eine Temperaturabsenkung im oberen Totpunkt (OT) aufgrund von Miller-Steuerzeiten steht. Für eine effiziente Berechnung der Untersuchungen beim hohen Betriebspunkt wird der reduzierte Chalmers-Mechanismus aus Abschnitt 7.2 verwendet.

8.1 Vorhersage der Gas-Diesel Strahlinteraktion

Die in diesem Abschnitt durchgeführten Untersuchungen sind durch die Erkenntnisse aus den experimentellen Untersuchungen von Fink *et al.* [21] motiviert. Für die Untersuchung verschiedener Konfigurationen mit unterschiedlichen Anordnungen des Gasstrahls relativ zum Dieselstrahl wurde im Experiment der Abstand zwischen dem Ursprung des Gas- und des Dieselstrahls konstant gehalten, während der Winkel α zwischen den Strahlen von +25° (divergent) bis -30° (konvergent) variiert wurde. Die wesentlichen Erkenntnisse dieser Studie lassen sich wie folgt zusammenfassen.

Unabhängig vom Winkel zwischen den Strahlen und dem relativen Einblasbeginn (EB) zwischen Gas und Diesel ist beim hohen Betriebspunkt eine Zündung des Dieselstrahls und eine anschließende Entflammung des Gasstrahls zuverlässig möglich. Für Untersuchungen beim niedrigen Betriebspunkt zeigt sich bei divergenter Strahlanordnung ($\alpha \ge 0$) das gleiche Verhalten. Für kreuzende Strahlen ($\alpha < 0$) tritt die Dieselzündung und die anschließende Entflammung des Gasstrahls nur dann auf, wenn der EB Diesel vor dem EB Gas liegt. So wurde experimentell ein Bereich gefunden, in welchem bei gleicher räumlicher und zeitlicher Strahlanordnung, abhängig von den thermodynamischen Bedingungen im Brennraum, eine zuverlässige Zündung bzw. eine Fehlzündung erfolgt.

Um die Ursache für Fehlzündungen im Fall kreuzender Strahlen und EB Diesel nach EB Gas zu untersuchen, wird eine Anordnung der Strahlen bei -20° und EB Gas 1 ms vor EB Diesel (-1 ms) gewählt und zunächst numerisch für den hohen Betriebspunkt untersucht. Diese Vorgehensweise soll sicherstellen, dass der Fall mit Zündung gut abgebildet werden kann. Abbildung 8.1 zeigt die Strahlinteraktion für diesen Fall an zwei unterschiedlichen Zeitpunkten. Der erste Zeitpunkt stellt einen Zustand während der kalten Flamme und noch vor der Zündung des Dieselstrahls dar, während der zweite Zeitpunkt einen Zustand nach der Zündung zeigt. Für jeden der beiden Zeitpunkte ist im Bild von links nach rechts die Überlagerung der experimentell ermittelten OH*- und Schattenaufnahmen (SG), das berechnete Dichtefeld sowie die berechnete Verteilung des Massenanteils von Wasserstoffperoxid (Y_{H2O2}) dargestellt. Während die experimentellen Aufnahmen aufgrund des optischen Messaufbaus tiefenintegrierte Informationen zeigen, sind die numerischen Ergebnisse in einer Schnittebene durch die beiden Strahlen parallel zum flachen Glaskolben dargestellt. Die Y_{H2O2} -Verteilung ist in einem festen Bereich von 0.00 bis 0.01 skaliert, wohingegen die Farbskala der Dichteverteilung abhängig von den Betriebsbedingungen relativ zur Hintergrunddichte bei EB Diesel skaliert ist. In den Plots der Y_{H2O2}- als auch in der Dichteverteilung geben zwei Isolinien den Massenanteil von jeweils 1% n-Heptan und 1% Methan an.



Abbildung 8.1: Veranschaulichung der Interaktion zwischen Gas- und Dieselstrahl an zwei Zeitpunkten für den hohen Betriebspunkt. Von Links nach Rechts sind die Überlagerung der experimentellen OH*- und Schattenaufnahmen (SG), das berechnete Dichtefeld sowie die Verteilung von Wasserstoffperoxid dargestellt.

Musculus et al. [62] und Srna et al. [91] konnten zeigen, dass während der Selbstzündung von n-Heptan die kalte Flamme direkt mit der Bildung von Wasserstoffperoxid korreliert. Schiffner et al. [84] fanden zudem heraus, dass dieser Anteil mit zunehmender Substitution von n-Heptan durch Methan, bei gleichbleibendem globalen Äquivalenzverhältnis, deutlich reduziert und die Zündung dadurch verzögert wird. Anhand der Isolinien zum ersten Zeitpunkt in Abbildung 8.1 wird deutlich, dass bereits n-Heptan in den Gasstrahl eingemischt ist und sich eine ternäre Mischungszone aus n-Heptan, Methan und Luft im Kern des Gasstrahls gebildet hat. Wie nach den Erkenntnissen von Schiffner et al. zu erwarten war, ist der Massenanteil von Wasserstoffperoxid jedoch in jenen Bereichen am höchsten, in denen n-Heptan nur mit Luft und nicht mit Methan gemischt ist. Anhand der Dichteverteilung ist zudem zu erkennen, dass während dieser Phase der Zündung noch keine signifikante Temperaturerhöhung stattgefunden hat. Da zu diesem Zeitpunkt weder eine starke Dichteänderung erfolgt, noch eine Flamme existiert, ist die kalte Flamme in den experimentellen Daten nicht sichtbar.

Während der kalten Flamme steigt die Temperatur kontinuierlich an. Übersteigt die Temperatur einen kritischen Wert, folgt ein abrupter Temperaturanstieg, welcher als Zündung bezeichnet wird [84]. Dieser Temperaturanstieg bzw. die dazu führende Wärmefreisetzung wird maßgeblich durch den Abbau von Wasserstoffperoxid ausgelöst. Ein Vergleich der beiden Zeitpunkte in Abbildung 8.1 zeigt deutlich, dass in jenen Bereichen, in denen aufgrund der Temperaturerhöhung eine signifikante Dichteabsenkung stattgefunden hat, kaum noch Wasserstoffperoxid vorhanden ist. Zudem werden beim Zerfall von Wasserstoffperoxid OH-Radikale gebildet, welche in den experimentellen Aufnahmen in Form einer erhöhten OH*-Intensität sichtbar sind.

Abbildung 8.2 zeigt die Ergebnisse zur Strahlinteraktion analog für den niedrigen Betriebspunkt. Durch den Vergleich der experimentellen und der numerischen Daten wird ersichtlich, dass weder im Experiment noch in der Numerik eine Zündung erfolgt. Eine Begründung dafür lässt sich durch genauere Betrachtung der numerischen Daten beider Betriebspunkte finden. Der Beginn der kalten Flamme erfolgt aufgrund der niedrigeren Brennraumtemperaturen im Vergleich zum hohen Betriebspunkt nun deutlich später. Dies lässt sich anhand der bereits abgeschlossenen



Abbildung 8.2: Veranschaulichung der Interaktion zwischen Gas- und Dieselstrahl an zwei Zeitpunkten für den niedrigen Betriebspunkt. Von links nach rechts sind die Überlagerung der experimentellen OH*- und Schattenaufnahmen (SG), das berechnete Dichtefeld sowie die Verteilung von Wasserstoffperoxid dargestellt.

Dieseleinblasung sowie an der Eindringtiefe des Gasstrahls gut erkennen. Der Massenanteil an Wasserstoffperoxid ist zum Zeitpunkt der kalten Flamme nun deutlich geringer, da das n-Heptan/Luft-Gemisch zu diesem Zeitpunkt schon stark abgemagert ist. Der in den Gasstrahl eingemischte Anteil an n-Heptan ist bereits soweit mit Methan und Luft verdünnt, dass er nicht mehr zur Zündung beitragen kann. Durch den Temperaturanstieg in der kalten Flamme wird zwar ein kleiner Teil des Wasserstoffperoxids konsumiert, jedoch reicht die Wärmefreisetzung nicht aus, um eine signifikante Temperaturerhöhung und eine Zündung des Dieselstrahls hervorzurufen. Folglich ist zum zweiten Zeitpunkt auch keine Dichteabsenkung aufgrund von Temperaturerhöhung zu beobachten. Weder in den Schatten- noch in den OH*-Aufnahmen ist eine Änderung gegenüber dem ersten Zeitpunkt erkennbar.

Aus den Untersuchungen ergeben sich folgende Erkenntnisse: Unabhängig von der Temperatur im Brennraum leistet der in den Gasstrahl eingemischte Anteil an n-Heptan keinen Beitrag zur Zündung. Diese Erkenntnis deckt sich mit den Ergebnissen zur Dieselzündung in Methan/Luft-Atmosphäre aus Kapitel 6 und zeigt wie wichtig eine gute Vorhersage der Dieselzündung in Methan/Luft-Atmosphäre ist. Aus der Literatur ist bekannt, dass bei Dieselstrahlen mit fester Einblasdauer die Zündung bei niedrigen Temperaturen im Kern des Strahls beginnt, während bei hohen Temperaturen zunächst eine Zündung im Bereich der Scherschicht erfolgt [83]. Außerdem beginnt die Zündung bei höheren Temperaturen näher am Injektor, wodurch sich die Abhebelänge der Flamme verkürzt [83]. Dies ist auf die sich weiter zu mageren Mischungen verschiebenden Selbstzünd- und Brenngrenzen bei höheren Temperaturen zurückzuführen. Bei kreuzender Anordnung der Strahlen und niedrigen Temperaturen wird der bevorzugte Zündbereich des Dieselstrahls durch den Gasstrahl abgedeckt und kann nicht mehr frei zünden. Eine Zündung des Gasstrahls erfolgt also nur dann, wenn sich das Diesel/Luft-Gemisch zunächst frei entzündet und dann den Gasstrahl durch Einmischen der heißen Produkte entflammt. Ob sich eine freie Zündung des Dieselstrahls ergeben kann, hängt sowohl von der räumlichen als auch von der zeitlichen Anordnung der Strahlen ab.

Die zuverlässige Vorhersage von Zündung und Fehlzündung durch das numerische Modell bestätigt die ausreichliche Güte des Mischmodells als auch des Reaktionsmechanismus. Von besonderer Wichtigkeit ist diese Erkenntnis für geometrischen Untersuchungen zur räumlichen und zeitlichen Strahlanordnung in Nachfolgearbeiten.

8.2 Variation des Vormischgrads

Im Hinblick auf die Einhaltung von Emissionsgrenzwerten und die Optimierung des Motorwirkungsgrads bei verschiedenen Lastpunkten ist es wichtig, die Charakteristik der Wärmefreisetzung gezielt beeinflussen zu können. Bei der HPDF-Verbrennung wird dies durch eine Änderung des Gas-Vormischgrads erreicht. Um für eine numerische Untersuchung die Anzahl der möglichen Variationen zu begrenzen, wird der Einblasbeginn (EB) Diesel relativ zum OT konstant gehalten, während der EB Gas variiert wird. Diese Strategie gewährleistet in allen Fällen konstante thermodynamische Bedingungen für die Dieselzündung. Darüber hinaus werden alle Untersuchungen mit einem festen Winkel von +10° zwischen den Strahlen durchgeführt und damit wird die räumliche Interaktion zwischen den Strahlen nicht verändert. Dies ist deshalb sinnvoll, da dieser Freiheitsgrad auch im Motor nicht existiert.

Abbildung 8.3a zeigt berechnete Wärmefreisetzungsraten (HRR) für EB Gas 1.5 ms und 0.5 ms vor bzw. 0.5 ms und 1.5 ms nach EB Diesel für den hohen Betriebspunkt. Die Daten wurden unter Verwendung des reduzierten Chalmers-Mechanismus berechnet. Die Charakteristik der Dieselzündung unterscheidet sich zwischen den Fällen wie erwartet nicht maßgeblich. Geringfügige Abweichungen ergeben sich hauptsächlich aus der Wiederholgenauigkeit der Randbedingungen an der RCEM. Die Wiederholgenauigkeit von Druck und Temperatur im OT liegt innerhalb von ± 2 bar und ± 4 K. Bei EB Gas vor EB Diesel und damit erhöhter Vormischung bestimmt die Dieselzündung den Beginn der Gasverbrennung und ein früherer EB Gas bewirkt keine Verschiebung des Beginns der Gasstrahlverbrennung. Bei EB Gas nach EB Diesel wird der Beginn der Gasstrahlverbrennung durch den Beginn der Gaseinblasung, bei minimaler Gasvormischung, gesteuert. Der Grad der Gasvormischung bestimmt die Höhe und Breite des sogenannten Vormischpeaks, beeinflusst jedoch nicht wesentlich den Anstiegsgradienten der Wärmefreisetzungsrate. Auf die Phase der vorgemischten Verbrennung folgt der



(a) Numerische Vorhersage der Wärmefreisetzungsraten.



(b) Experimentell ermittelte Wärmefreisetzungsraten.

Abbildung 8.3: Vergleich der numerisch und experimentell ermittelten Wärmefreisetzungsraten (HRR) für EB Gas 1.5 ms und 0.5 ms vor bzw. 0.5 ms und 1.5 ms nach EB Diesel beim hohen Betriebspunkt und einem Winkel von 10° zwischen den beiden Strahlen.

nicht-vorgemischte Abbrand. In den Brennverläufen äußert sich die nicht vorgemischte Phase in einem Plateau annähernd konstanter Wärmefreisetzungsraten, welches mit abnehmendem Vormischgrad ausgeprägter wird. Aufgrund der hier verwendeten kurzen Einblasdauer ist dieses Plateau wenig ausgeprägt und geht schnell in die Phase des Ausbrands über. Die Ausbrandgeschwindigkeit kann direkt mit dem EB Gas korreliert werden.

Der qualitative und quantitative Vergleich zwischen berechneten und experimentell bestimmten Wärmefreisetzungsraten (Abbildung 8.3b) zeigt über den gesamten Variationsbereich eine gute Übereinstimmung. Erwähnenswert ist, dass der Fall mit dem geringsten Vormischungsgrad die schlechteste quantitative Übereinstimmung aufweist. Da im vorigen Kapitel gezeigt wurde, dass die Wärmefreisetzung beim hohen Betriebspunkt maßgeblich durch die Mischung begrenzt wird, wird diese Unsicherheit in der Berechnung auf die Qualität der Gemischbildung zwischen Gas und Luft zurückgeführt. Ein quantitativer Vergleich der Ausbrandgeschwindigkeit zeigt zum Teil große Abweichungen. Die Sinnhaftigkeit dieses Vergleichs ist jedoch fragwürdig, da die Unsicherheiten in diesem Bereich sowohl in der Berechnung, als auch im Experiment aufgrund der kalten Brennraumwände und der niedrigen absoluten Wärmefreisetzungsraten relativ groß sind.

Abbildung 8.4a zeigt die berechneten Wärmefreisetzungsraten (HRR) für EB Gas 1.5 ms und 0.5 ms vor bzw. 0.5 ms und 1.5 ms nach EB Diesel analog für den niedrigen Betriebspunkt. Die Daten wurden unter Verwendung des ursprünglichen Mechanismus berechnet. Im Gegensatz zur überwiegend mischungslimitierten Verbrennung beim hohen Betriebspunkt gewinnt in diesem Fall mit ansteigendem Vormischgrad die Reaktionskinetik zunehmend an Bedeutung. Die Charakteristik der Dieselzündung ist für alle hier betrachteten Fälle wieder nahezu identisch, wobei der Peak in der Wärmefreisetzungsrate im Vergleich zum Hochtemperaturfall nun deutlich ausgeprägter ist. Dies ist auf die längere Zündverzugszeit des Diesels bei niedrigen Temperaturen und den damit verbundenen höheren Vormischgrad zum Zeitpunkt der Zündung zurückzuführen. Die Änderung des Verlaufs der Wärmefreisetzung bei Änderung der Gasvormischung folgt jenem beim hohen Betriebspunkt, wobei die Anstiegsgradienten sowie die Spitzenwerte der Wärmefreisetzungsraten geringer sind.

Der Vergleich zwischen berechneten und experimentell bestimmten Wärmefreisetzungsraten (Abbildung 8.4b) zeigt wieder eine gute Über-



(a) Numerische Vorhersage der Wärmefreisetzungsraten.



(b) Experimentell ermittelte Wärmefreisetzungsraten.

Abbildung 8.4: Vergleich der numerisch und experimentell ermittelten Wärmefreisetzungsraten (HRR) für EB Gas 1.5 ms und 0.5 ms vor bzw. 0.5 ms und 1.5 ms nach EB Diesel beim niedrigen Betriebspunkt und einem Winkel von 10° zwischen den beiden Strahlen.

einstimmung. An dieser Stelle ist zu erwähnen, dass kurzzeitige lokale Spitzenwerte in der Wärmefreisetzungsrate, wie z.B. während der Dieselverbrennung, mit der Druckverlaufsanalyse aus den experimentellen Da-
ten aufgrund der Filterung des Drucksignals nicht erfasst werden können [21].

Abschließend wird ein qualitativer Vergleich der Ergebnisse für den hohen und den niedrigen Betriebspunkt durchgeführt. Für beide Betriebspunkte kann die Änderung der Charakteristik der Wärmefreisetzung bei Änderung des Grades der Gasvormischung gut abgebildet werden. Die Qualität der numerischen Vorhersage ist in den einzelnen Fällen ähnlich. Der Zeitpunkt der Entflammung des Gasstrahls wird in allen untersuchten Fällen gut vorhergesagt, was direkt auf eine gute Vorhersage der räumlichen Interaktion der Strahlen zurückzuführen ist. Unter Berücksichtigung der Erkenntnisse zur Methankinetik aus Abschnitt 7.1 würde eine zu langsame Methankinetik beim niedrigen Betriebspunkt bei erhöhter Gasvormischung die Wärmefreisetzung verzögern. Die berechneten Verläufe stimmen jedoch gut mit den experimentell ermittelten Verläufen überein. Damit ist gezeigt, dass die Methankinetik im Chalmers-Mechanismus auch dann die Realität abbilden kann, wenn die chemischen Zeitskalen gegenüber den Zeitskalen der Mischung an Relevanz gewinnen.

8.3 Fazit

Das numerische Modell auf Basis detaillierter Chemie wurde in diesem Kapitel dazu verwendet, die Verbrennung eines fremdgezündeten Erdgasstrahls systematisch zu untersuchen und vorherzusagen. Ein Vergleich mit experimentellen Daten führt zu folgenden Schlussfolgerungen:

 Zündaussetzer bei niedrigen Temperaturen und sich kreuzenden Strahlen konnten vom Modell zuverlässig vorhergesagt und numerisch analysiert werden. Die Ursache für die Fehlzündung besteht darin, dass der Temperaturanstieg während der Phase der kalten Dieselflamme nicht ausreicht, um die Wasserstoffperoxidradikale zu dissoziieren und damit das Gemisch zu entzünden. Dies liegt daran, dass die bevorzugte Zündregion des Diesels bei niedrigen Temperaturen durch den Gasstrahl abgedeckt wird. Bei der Variation des EB Gas relativ zum EB Diesel konnte das Modell die Gas- und Dieselzündung gut vorhersagen. Auch die Änderung der Charakteristik der Wärmefreisetzungsraten für verschiedene Vormischgrade sowie die Ausbrandgeschwindigkeit folgen den experimentell ermittelten Verläufen. Darüber hinaus konnte gezeigt werden, dass die Vorhersagequalität für die zwei untersuchten Betriebspunkte unabhängig davon ist, ob die Verbrennung durch die Mischung oder die Chemie limitiert wird.

9 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein RANS-CFD-Modell zur Berechnung der Hochdruck-Direkteinblasung von Erdgas mit Diesel-Pilotzündung (HPDF) entwickelt. Das Verbrennungsmodell basiert auf dem Ansatz detaillierter Chemie, bei welchem jede Gitterzelle als homogen gerührter Konstantvolumenreaktor betrachtet wird. Der Modellierungsansatz wurde ausgewählt, weil er eine große Flexibilität hinsichtlich der gleichzeitigen Verbrennung verschiedener Brennstoffe in einem Brennraum bietet, sei es lokal vorgemischt oder auch nicht-vorgemischt. Zudem ist mit diesem Modell eine direkte Vorhersage von Verbrennungsprodukten ohne zusätzliche Modelle möglich.

Stellvertretend für den in einem HPDF-Motor ablaufenden Verbrennung nungsvorgang wurde in dieser Arbeit die Zündung und Verbrennung einzelner, unterexpandierter Erdgasstrahlen mit Diesel-Pilotzündung betrachtet. Zur Validierung wurden experimentelle Untersuchungen an einer schnellen Kompressions-Expansionsmaschine (RCEM) herangezogen, welche in Fink et al. [21, 22] im Detail beschrieben sind. Die Validierung des Strömungs- und Mischungsfeldes wurde anhand eines Abgleichs der Eindringtiefen und der Strahlaufweitung des nicht reagierenden Gas- und Dieselstrahls durchgeführt. Für eine qualitativ gute Abbildung muss die Dissipationskonstante im RNG k- ϵ -Modell, wie in der Literatur für die Berechnung von Strömungen mit erhöhten mittleren Streckungsraten beschrieben, angepasst werden.

Die Diesel-Pilotzündung bestimmt nicht nur den Beginn, sondern auch den Verlauf der Erdgasverbrennung maßgeblich. Deshalb wurden Untersuchungen zur Dieselzündung in Luft- und Erdgas/Luft-Atmosphäre durchgeführt. Ziel dieser Untersuchungen war einerseits, den generellen Einfluss von Erdgas im Hintergrundgemisch auf die Dieselzündung zu identifizieren und andererseits Reaktionsmechanismen zur Berechnung der chemischen Vorgänge auszuwählen und zu validieren. Die dabei gewonnenen Erkenntnisse können wie folgt zusammengefasst werden:

- Mit zunehmendem Methananteil im Hintergrundgemisch verlängern sich die Zündverzugszeiten der Dieselzündung sowohl unter stationären als auch unter transienten thermodynamischen Randbedingungen.
- Für die Auswahl von Reaktionsmechanismen ist eine Berücksichtigung der transienten Dieseleinspritzung zwingend erforderlich. Berechnungen auf Basis 0D homogen gerührten Reaktorsimulationen können lediglich erste Hinweise geben.
- Unter stationären thermodynamischen Randbedingungen konnte für den Chalmers- und den Rahimi-Mechanismus anhand von Zündverzugszeiten eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten gezeigt werden. Dies gilt sowohl für die Dieselzündung in Luft als auch in Methan/Luft-Gemischen. Mit dem Chalmers-Mechanismus konnten zudem die experimentell beobachteten Zündgrenzen abgebildet werden.
- Unter transienten thermodynamischen Randbedingungen wurde gezeigt, dass für sehr lange Zündverzugszeiten (>5 ms) die zyklischen Variationen groß sind. Dies lässt sich damit begründen, dass die Zündung stark von lokalen Inhomogenitäten beeinflusst wird und sich somit auf einzelne Punkte im Strahl beschränkt. Diese Effekte können mit dem eingesetzten RANS-Simulationsansatz, bei welchem chemische Reaktionen basierend auf ensemblegemittelten Größen berechnet werden, nicht erfasst werden. Für lange Zündverzugszeiten war daher nur eine Validierung der Reaktionsmechanismen anhand der kalten Flamme möglich.

Nach der Auswahl der Reaktionsmechanismen auf Basis der Dieselzündung wurden Untersuchungen zum Einfluss der Reaktionskinetik auf den HPDF-Brennverlauf durchgeführt. Die daraus gewonnenen Erkenntnisse können wie folgt zusammengefasst werden:

• Durch eine gezielte Änderung der Reaktionskinetik für Methan, dem Ersatzkraftstoff für Erdgas, wurde gezeigt, dass abhängig vom Be-

triebspunkt und und dem Grad der Vormischung von Erdgas eine Grenze existiert, ab welcher die chemischen Zeitskalen an Relevanz gewinnen.

- Der Effekt der Turbulenz-Chemie-Interaktion wurde für die HPDF-Verbrennung mit dem PaSR-Modell untersucht. Eine signifikante Änderung des Brennverlaufs ergab sich dadurch im untersuchten Parameterbereich nicht.
- Auf Basis der Erkenntnis, dass die Methanchemie bei 920K und 125 bar im oberen Totpunkt eine untergeordnete Rolle spielt, wurde ein reduzierter Reaktionsmechanismus aus dem Chalmers-Mechanismus abgeleitet. Dadurch ergibt sich für die entsprechenden Fälle eine Halbierung der Rechenzeit für die Berechnung des chemischen Fortschritts und dadurch eine Reduktion der gesamten Rechenzeit um ca. 30 % bei gleichbleibender Ergebnisqualität.
- Unter Verwendung des NANCY-Mechanismus wurde verdeutlicht, dass die Verwendung einer ungeeigneten Reaktionskinetik signifikante Auswirkungen auf den Brennverlauf hat.

Die Anwendung des entwickelten Simulationsmodells für die systematische Untersuchung und Vorhersage der Verbrennung fremdgezündeter Erdgasstrahlen führte zu folgenden Erkenntnissen:

- Für die Interaktion von Gas- und Dieselstrahl bei verschiedenen Betriebspunkten konnte gezeigt werden, dass das Modell sowohl Zündung als auch Zündaussetzer zuverlässig abbilden kann. Zudem konnte durch die detaillierte Analyse der während der Vorzündung gebildeten Spezies eine physikalische Erklärung für das Aussetzen der Zündung gefunden werden.
- Die Vorhersage der Brennverläufe für unterschiedlich starke Gasvormischung zeigte qualitativ eine gute Übereinstimmung mit Messdaten. Für die Berechnungen bei 920 K und 125 bar im oberen Totpunkt wurde dabei der reduzierte Chalmers-Mechnismus verwendet, um Rechenzeit zu sparen.

Das in dieser Arbeit entwickelte Simulationsmodell kann im industriellen Kontext als Werkzeug für die Optimierung des HPDF-Brennverfahrens verwendet werden. Damit können z.B. der Einfluss der Brennraumgeometrie, der Injektoranordnung, der Eindüsungssequenz und der Abgasrückführung auf die Wärmefreisetzungsverteilung studiert werden. Obwohl in der Arbeit nur Diesel und Erdgas untersucht wurde, können auch alternative Brennstoffe betrachtet werden. Prinzipiell vermag das Modell auch die gasförmigen Schadstoffemissionen (HC-, CO-, NO_x) zu liefern und es lassen sich Trends hinsichtlich Ruß-Emissionen ableiten. Hierbei ist aber zu beachten, dass das Simulationsmodell bisher weder für andere Brennstoffe als Diesel und Erdgas, noch für die Vorhersage von Abgasemissionen validiert wurde.

Literaturverzeichnis

- [1] S. K. Aggarwal, O. Awomolo, and K. Akber. Ignition Characteristics of Heptane–Hydrogen and Heptane–Methane Fuel Blends at Elevated Pressures. *International Journal of Hydrogen Energy*, 36(23):15392– 15402, 2011.
- [2] U. Albrecht, P. Schmidt, Weindorf, W. Wurster, R., and W. Zittel. Kraftstoffstudie: Zukünftige Kraftstoffe für Verbrennungsmotoren und Gasturbinen, 2013.
- [3] M. Anderson, K. Salo, and E. Fridell. Particle- and Gaseous Emissions from an LNG Powered Ship. *Environmental science & technology*, 49(20):12568–12575, 2015.
- [4] A. Azimi and J. Aminian. An Insight Into Chemical Kinetics and Turbulence-Chemistry Interaction Modeling in Flameless Combustion. *International Journal of Energy and Environment*, 6(4):383–390, 2015.
- [5] H. D. Baehr. Thermodynamik: Grundlagen und technische Anwendungen. Springer-Lehrbuch. Springer, Berlin and Heidelberg, 10. edition, 2000.
- [6] R. Bellman and R. H. Pennington. Effects of Surface Tension and Viscosity on Taylor Instability. *Quarterly of Applied Mathematics*, 12(2):151–162, 1954.
- [7] A. D. Birch, D. R. Brown, M. G. Dodson, and F. Swaffield. The Structure and Concentration Decay of High Pressure Jets of Natural Gas. *Combustion Science and Technology*, 36(5-6):249–261, 2007.
- [8] K.N.C. Bray. The Challenge of Turbulent Combustion. *Symposium* (*International*) on Combustion, 26(1):1–26, 1996.

- [9] F. Buda, R. Bounaceur, V. Warth, P. A. Glaude, R. Fournet, and F. Battin-Leclerc. Progress Toward a Unified Detailed Kinetic Model for the Autoignition of Alkanes from C4 to C10 Between 600 and 1200 K. *Combustion and Flame*, 142(1-2):170–186, 2005.
- [10] A. Buhendwa. Simulation der Gas-Direkteindüsung in den Brennraum eines Verbrennungsmotors. Bachelorarbeit, Technische Universität München, München, 2015.
- [11] H. K. Ciezki and G. Adomeit. Shock-Tube Investigation of Self-Ignition of n-Heptane-Air Mixtures Under Engine Relevant Conditions. *Combustion and Flame*, 93(4):421–433, 1993.
- [12] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook. A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation. *Combustion and Flame*, 114(1-2):149–177, 1998.
- [13] W. J. A. Dahm and P. E. Dimotakis. Mixing at Large Schmidt Number in the Self-Similar Far Field of Turbulent Jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 217(-1):299, 1990.
- [14] R. N. Dahms, G. A. Paczko, S. A. Skeen, and L. M. Pickett. Understanding the Ignition Mechanism of High-Pressure Spray Flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 36(2):2615–2623, 2017.
- [15] G. D'Errico, T. Lucchini, G. Hardy, F. Tap, and G. Ramaekers. Combustion Modeling in Heavy Duty Diesel Engines Using Detailed Chemistry and Turbulence-Chemistry Interaction. SAE Technical Paper 2015-01-0375, 2015.
- [16] C. P. Donaldson and R. S. Snedeker. A Study of Free Jet Impingement. Part 1. Mean Properties of Free and Impinging Jets. *Journal of Fluid Mechanics*, 45(02):281, 1971.
- [17] B. Douville, P. Ouellette, A. Touchette, and B. Ursu. *Performance and Emissions of a Two-Stroke Engine Fueled Using High-Pressure Direct Injection of Natural Gas.* SAE Technical Paper 981160, 1998.
- [18] S. Dumitrescu, P. G. Hill, G. Li, and P. Ouellette. Effects of Injection Changes on Efficiency and Emissions of a Diesel Engine Fueled by Direct Injection of Natural Gas. SAE Technical Paper 2000-01-1805, 2000.

- [19] E. Faghani, P. Kheirkhah, C. W.J. Mabson, G. McTaggart-Cowan, P. Kirchen, and S. Rogak. Effect of Injection Strategies on Emissions from a Pilot-Ignited Direct-Injection Natural-Gas Engine- Part I: Late Post Injection. SAE Technical Paper 2017-01-0774, 2017.
- [20] E. Faghani, P. Kheirkhah, C. W.J. Mabson, G. McTaggart-Cowan, P. Kirchen, and S. Rogak. Effect of Injection Strategies on Emissions from a Pilot-Ignited Direct-Injection Natural-Gas Engine- Part II: Slightly Premixed Combustion. SAE Technical Paper 2017-01-0763, 2017.
- [21] G. Fink, M. Jud, and T. Sattelmayer. Fundamental Study of Diesel-Piloted Natural Gas Direct Injection under Different Operating Conditions. ASME 2018 ICEF Technical Conference, ICEF2018-9580, 2018.
- [22] G. Fink, M. Jud, and T. Sattelmayer. Influence of the Spatial and Temporal Interaction Between Diesel Pilot and Directly Injected Natural Gas Jet on Ignition and Combustion Characteristics. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 140(10):102811, 2018.
- [23] G. P. Flags. *Grundlagen Verbrennungsmotoren*. ATZ / MTZ-Fachbuch. Springer, Dordrecht, 2012.
- [24] C. L. Genzale, R. D. Reitz, and M. P. B. Musculus. Effects of Piston Bowl Geometry on Mixture Development and Late-Injection Low-Temperature Combustion in a Heavy-Duty Diesel Engine, volume 1. SAE Technical Paper 2008-01-1330, 2008.
- [25] V. I. Golovitchev, N. Nordin, R. Jarnicki, and J. Chomiak. 3-D Diesel Spray Simulations Using a New Detailed Chemistry Turbulent Combustion Model. SAE Technical Paper 2000-01-1891, 2000.
- [26] D. G. Goodwin, H. K. Moffat, and R. L. Speth. Cantera: An Object-Oriented Software Toolkit for Chemical Kinetics, Thermodynamics, and Transport Processes. Version 2.3.0, 2017.
- [27] M. Grochowina, M. Schiffner, S. Tartsch, and T. Sattelmayer. Influence of Injection Parameters and Operating Conditions on Ignition and Combustion in Dual-Fuel Engines. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 140(10):102809, 2018.
- [28] J. Harrington, S. Munshi, C. Nedelcu, P. Ouellette, J. Thompson, and

S. Whitfield. *Direct Injection of Natural Gas in a Heavy-Duty Diesel Engine*. SAE Technical Paper 2002-01-1630, 2002.

- [29] H. Hashemi, J. M. Christensen, S. Gersen, H. Levinsky, S. J. Klippenstein, and P. Glarborg. High-Pressure Oxidation of Methane. *Combustion and Flame*, 172:349–364, 2016.
- [30] I.-M. Hassellöv, D. R. Turner, A. Lauer, and J. J. Corbett. Shipping Contributes to Ocean Acidification. *Geophysical Research Letters*, 40(11):2731–2736, 2013.
- [31] D. C. Haworth. Progress in Probability Density Function Methods for Turbulent Reacting Flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36(2):168–259, 2010.
- [32] J. Herzler, M. Fikri, O. Welz, and C. Schulz. *High-Pressure Shock-Tube Study of the Ignition of Fuel-Rich CH4/Air and CH4/Additive/Air Mixtures Over a Wide Temperature Range*. 7th European Combustion Meeting, 2015.
- [33] P. G. Hill and P. Ouellette. Transient Turbulent Gaseous Fuel Jets for Diesel Engines. *Journal of Fluids Engineering*, 121(1):93–101, 1999.
- [34] J. O. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, New York, NY, 2. edition, 1987.
- [35] K. B. Hodgins, H. Gunawan, and P. G. Hill. Intensifier-Injector for Natural Gas Fueling of Diesel Engines. SAE Technical Paper 921553, 1992.
- [36] K. B. Hodgins, P. G. Hill, P. Ouellette, and P. Hung. *Directly Injected Natural Gas Fueling of Diesel Engines*. SAE Technical Paper 961671, 1996.
- [37] J. Huang, P. G. Hill, W. K. Bushe, and S. R. Munshi. Shock-Tube Study of Methane Ignition Under Engine-Relevant Conditions: Experiments and modeling. *Combustion and Flame*, 136(1-2):25–42, 2004.
- [38] K. Hutter and Y. Wang. *Fluid and Thermodynamics*. Springer International Publishing, Cham, 2016.

- [39] International Maritime Organization. Amendments to the Annex of the Protocol of 1997 to Amend the International Convention for the Prevention of Pollution from Ships, 1973, as Modified by the Protocol of 1978 Relating Thereto - Amendments to MARPOL Annex VI and the NO_x Technical Code 2008.
- [40] W.P Jones and B.E Launder. The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15(2):301–314, 1972.
- [41] G. A. Karim. *Dual-Fuel Diesel Engines*. CRC Press, Boca Raton and London and New York, 2015.
- [42] E. Khalil, P. Samuel, and G. A. Karim. An Analytical Examination of the Chemical Kinetics of the Combustion of N-Heptane-Methane Air Mixtures. SAE Technical Paper 961932, 1996.
- [43] E. B. Khalil and G. A. Karim. A Kinetic Investigation of the Role of Changes in the Composition of Natural Gas in Engine Applications. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 124(2):404–411, 2002.
- [44] S.-C. Kong, Z. Han, and R. D. Reitz. The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulation. SAE Technical Paper 950278, 1995.
- [45] S.-C. Kong, C. D. Marriott, R. D. Reitz, and M. Christensen. Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD. SAE Technical Paper 2001-01-1026, 2001.
- [46] A. Krisman, E. R. Hawkes, and J. H. Chen. Two-Stage Autoignition and Edge Flames in a High Pressure Turbulent Jet. *Journal of Fluid Mechanics*, 824:5–41, 2017.
- [47] C. Krüger. Validierung eines 1D-Spraymodells zur Simulation der Gemischbildung in direkteinspritzenden Dieselmotoren. Ph.D. Thesis, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2001.
- [48] K. Kuo and R. Acharya. *Fundamentals of Turbulent and Multi-Phase Combustion*. Wiley, 1. edition, 2012.

- [49] H. W. Köhler. NO_x-Emissionen durch die zivile Schiffahrt. *MTZ-Motortechnische Zeitschrift*, 64(12):1040–1049, 2003.
- [50] N. lida, M. Nakamura, and H. Ohashi. Study of Diesel Spray Combustion in An Ambient Gas Containing Hydrocarbon Using a Rapid Compression Machine. SAE Technical Paper 970899, 1997.
- [51] T. Lucchini, G. D'Errico, D. Ettorre, and G. Ferrari. Numerical Investigation of Non-Reacting and Reacting Diesel Sprays in Constant-Volume Vessels, volume 2. SAE Technical Paper 2009-01-1971, 2009.
- [52] Marinekommando. Jahresbericht 2015. 2015.
- [53] G. McTaggart-Cowan, W. K. Bushe, P. G. Hill, and S. R. Munshi. NO_x Reduction From a Heavy-Duty Diesel Engine with Direct Injection of Natural Gas and Cooled Exhaust Gas Recirculation. *International Journal of Engine Research*, 5(2):175–191, 2005.
- [54] G. McTaggart-Cowan, K. Mann, J. Huang, A. Singh, B. Patychuk, Z. X. Zheng, and S. Munshi. *Direct Injection of Natural Gas at up to 600 Bar in a Pilot-Ignited Heavy-Duty Engine*, volume 8. SAE Technical Paper 2015-01-0865, 2015.
- [55] G. P. Mctaggart-Cowan, W. K. Bushe, S. N. Rogak, P. G. Hill, and S. R. Munshi. *Injection Parameter Effects on a Direct Injected, Pilot Ignited, Heavy Duty Natural Gas Engine with EGR*. SAE Technical Paper 2003-01-3089, 2003.
- [56] G. P. Mctaggart-Cowan, H. L. Jones, S. N. Rogak, W. K. Bushe, P. G. Hill, and S. R. Munshi. The Effects of High-Pressure Injection on a Compression–Ignition, Direct Injection of Natural Gas Engine. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 129(2):579, 2007.
- [57] G. P. Mctaggart-Cowan, S. N. Rogak, S. R. Munshi, P. G. Hill, and W. K. Bushe. Combustion in a Heavy-Duty Direct-Injection Engine Using Hydrogen-Methane Blend Fuels. *International Journal of Engine Research*, 10(1):1–13, 2009.
- [58] G. P. Mctaggart-Cowan, S. N. Rogak, S. R. Munshi, P. G. Hill, and W. K. Bushe. The Influence of Fuel Composition on a Heavy-Duty, Natural-Gas Direct-Injection Engine. *Fuel*, 89(3):752–759, 2010.

- [59] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, and H. J. Curran. Kinetic Modeling of Gasoline Surrogate Components and Mixtures under Engine Conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1):193– 200, 2011.
- [60] P. L. Mtui and P. G. Hill. Ignition Delay and Combustion Duration with Natural Gas Fueling of Diesel Engines. SAE Technical Paper 961933, 1996.
- [61] S. R. Munshi, G. P. Mctaggart-Cowan, J. Huang, and P. G. Hill. Development of a Partially-Premixed Combustion Strategy for a Low-Emission, Direct Injection High Efficiency Natural Gas Engine. ASME 2011 ICEF Technical Conference, ICEF2011-60181, 2011.
- [62] M. P.B. Musculus, P. C. Miles, and L. M. Pickett. Conceptual Models for Partially Premixed Low-Temperature Diesel Combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 39(2-3):246–283, 2013.
- [63] K. E. Niemeyer, C.-J. Sung, and M. P. Raju. Skeletal Mechanism Generation for Surrogate Fuels Using Directed Relation Graph with Error Propagation and Sensitivity Analysis. *Combustion and Flame*, 157(9):1760–1770, 2010.
- [64] W. M.A. Niessen. *Liquid Chromatography-Mass Spectrometry*. Chromatographic Science Series 97. Taylor & Francis, Hoboken, 2006.
- [65] N. Nordin. *Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion*. Ph.D. Thesis, Chalmers University of Technology, Götheborg, 2001.
- [66] P. Ouellette. *Direct Injection of Natural Gas for Diesel Engine Fueling*. Ph.D. Thesis, University of British Columbia, Vancouver, 1996.
- [67] P. Ouellette and P. G. Hill. Turbulent Transient Gas Injections. *Journal of Fluids Engineering*, 122(4):743, 2000.
- [68] V. C. Patel, W. Rodi, and G. Scheurer. Turbulence Models for Near-Wall and Low Reynolds Number Flows - A review. AIAA Journal, 23(9):1308–1319, 1985.
- [69] M. A. Patterson and R. D. Reitz. *Modeling the Effects of Fuel Spray Characteristics on Diesel Engine Combustion and Emission*. SAE Tech-

nical Paper 980131, 1998.

- [70] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [71] M. Pilch and C. A. Erdman. Use of Breakup Time Data and Velocity History Data to Predict the Maximum Size of Stable Fragments for Acceleration-Induced Breakup of a Liquid Drop. *International Journal of Multiphase Flow*, 13(6):741–757, 1987.
- [72] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. CNRS, Paris, 3. edition, 2012.
- [73] E. Pomraning. Development of Large Eddy Simulation Turbulence Models. Ph.D. Thesis, University of Wisconsin – Madison, Madison, 2000.
- [74] S. B. Pope. Computationally Efficient Implementation of Combustion Chemistry Using in Situ Adaptive Tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1(1):41–63, 1997.
- [75] S. B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, Cambridge and New York, 2000.
- [76] A. Rahimi, E. Fatehifar, and R. Khoshbakhti Saray. Development of an Optimized Chemical Kinetic Mechanism for Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion of a Fuel Blend of n-Heptane and Natural Gas Using a Genetic Algorithm. *Proceedings* of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering, 224(9):1141–1159, 2010.
- [77] K. Reif. *Grundlagen Fahrzeug- und Motorentechnik*. Bosch Fachinformation Automobil. Springer Vieweg, Wiesbaden, 2017.
- [78] R. Reitz. *Atomization and Other Breakup Regimes of a Liquid Jet.* Ph.D. Thesis, Princeton University, New Jersey, 1978.
- [79] R. Reitz. Modeling Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Sprays. *Atomisation and Spray Technology*, 3(4):309–337, 1987.
- [80] K. J. Richards, P. K. Senecal, and E. Pomraning. CONVERGE (v2.3)

Manual. 2016.

- [81] G. Rozenchan, D. L. Zhu, C. K. Law, and S. D. Tse. Outward Propagation, Burning Velocities, and Chemical Effects of Methane Flames up to 60 atm. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2):1461–1470, 2002.
- [82] E. Salaun, J. Apeloig, F. Grisch, C.-E. Yvonnet, B. Nicolas, and F. Dionnet. Optical Investigation of Ignition Timing and Equivalence Ratio in Dual-Fuel CNG/Diesel Combustion. SAE Technical Paper 2016-01-0772, 2016.
- [83] M. Schiffner, M. Grochowina, and T. Sattelmayer. Development of a Numerical Model for Ignition Phenomena in a Micro Pilot Ignited Dual Fuel Engine with External Mixture Formation. ASME 2017 ICEF Technical Conference, ICEF2017-3533, 2017.
- [84] M. Schiffner, M. Jud, and T. Sattelmayer. Reaction Kinetics Analysis of Dual Fuel Internal Combustion Engines Based on Ignition Delay Times Using n-Heptane/Methane Fuel Blends. 8th European Combustion Meeting, 2017.
- [85] S. Schlatter, B. Schneider, Y. Wright, and K. Boulouchos. *Experimental Study of Ignition and Combustion Characteristics of a Diesel Pilot Spray in a Lean Premixed Methane/Air Charge using a Rapid Compression Expansion Machine*. SAE Technical Paper 2012-01-0825, 2012.
- [86] S. Schlatter, B. Schneider, Y. M. Wright, and K. Boulouchos. N-Heptane Micro Pilot Assisted Methane Combustion in a Rapid Compression Expansion Machine. *Fuel*, 179:339–352, 2016.
- [87] S. Singh, R. D. Reitz, M. P. B. Musculus, and T. Lachaux. Validation of Engine Combustion Models Against Detailed In-Cylinder Optical Diagnostics Data for a Heavy-Duty Compression-Ignition Engine. *International Journal of Engineering Research and Technology*, 8(1):97–126, 2007.
- [88] G. Smith, D. Golden, M. Frenklach, N. Moriary, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. Bowman, R. Hanson, S. Song, W. Gardiner, V. Lissianski, and Z. Quin. Gri-Mech 3.0.

http://www.me.berkeley.edu/gri_mech, 1999.

- [89] L. J. Spadaccini and M. B. Colket. Ignition Delay Characteristics of Methane Fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 20(5):431– 460, 1994.
- [90] J. H. Spurk and N. Aksel. *Strömungslehre: Einführung in die Theorie der Strömungen*. Springer-Lehrbuch. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 8. aufl. edition, 2010.
- [91] A. Srna, M. Bolla, Y. M. Wright, K. Herrmann, R. Bombach, S. S. Pandurangi, K. Boulouchos, and G. Bruneaux. Effect of Methane on Pilot-Fuel Auto-Ignition in Dual-Fuel Engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(4):4741–4749, 2018.
- [92] A. Stagni, A. Cuoci, A. Frassoldati, T. Faravelli, and E. Ranzi. Lumping and Reduction of Detailed Kinetic Schemes: an Effective Coupling. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 53(22):9004–9016, 2014.
- [93] G. Stiesch. *Modeling Engine Spray and Combustion Processes*. Heat and Mass Transfer. Springer, Berlin and Heidelberg, 2003.
- [94] T. Stocker, editor. Climate change 2013: The physical science basis : Working Group I contribution to the Fifth assessment report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press, Cambridge, 2014.
- [95] F. Tao, R. D. Reitz, and D. E. Foster. Revisit of Diesel Reference Fuel (n-Heptane) Mechanism Applied to Multidimensional Diesel Ignition and Combustion Simulations. 17th International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress, 2007.
- [96] S. R. Turns. An Introduction to Combustion: Concepts and Applications. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, Boston, Mass., 2. edition, 2000.
- [97] H. K. Versteeg and W. Malalasekera. An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The finite volume method. Pearson/Prentice Hall, Harlow, 2. edition, 2007.

- [98] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent Combustion Modeling. *Pro*gress in Energy and Combustion Science, 28(3):193–266, 2002.
- [99] Q. Wang, C. Shao, Q. Liu, Z. Zhang, and Z. He. Effects of Injection Rate on Combustion and Emissions of a Pilot Ignited Direct Injection Natural Gas Engine. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 31(4):1969–1978, 2017.
- [100] D. C. Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries, La Cañada, Calif., 3. edition, 2010.
- [101] V. Yakhot and L. M. Smith. The Renormalization Group, the ε-Expansion and Derivation of Turbulence Models. *Journal of Scientific Computing*, 7(1):35–61, 1992.
- [102] W. S. Young. Derivation of the Free-Jet Mach-Disk Location Using the Entropy-Balance Principle. *Physics of Fluids*, 18(11):1421, 1975.
- [103] J. Yu, V. Vuorinen, O. Kaario, T. Sarjovaara, and M. Larmi. Characteristics of High Pressure Jets for Direct Injection Gas Engine. SAE International Journal of Fuels and Lubricants, 6(1):149–156, 2013.
- [104] G. Zitzler. *Analyse und Vorausberechnung der Brennverläufe von Gasmotoren bei Einsatz verschiedener Gasarten*. Ph.D. Thesis, Technische Universität München, München, 2004.
- [105] P. Zoldak, A. Sobiesiak, D. Wickman, and M. Bergin. Combustion Simulation of Dual Fuel CNG Engine Using Direct Injection of Natural Gas and Diesel. SAE Technical Paper 2015-01-0851, 2015.