



Dissertation

## Numerische Analyse der Zündung und der turbulenten Flammenausbreitung in Diesel-Gas Dual-Fuel-Motoren

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der technischen Wissenschaften, eingereicht an der Technischen Universität Wien Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften

von

## Jens Frühhaber

Matrikelnummer 1634336

unter der Leitung von

#### Prof. Dr. Thomas Lauer

Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik Technische Universität Wien

begutachtet von

#### Prof. Dr. Michael Wensing

Lehrstuhl für Technische Thermodynamik Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg

#### Prof. Dr. Michael Harasek

Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und technische Biowissenschaften Technische Universität Wien

Wien, 15. März 2022

## Eidesstattliche Erklärung

Diese Arbeit wurde von der Österreichischen Forschungsförderungsgesellschaft (FFG) im Rahmen des Projektes "Dual Flame" (Projektnummer: 850690) unterstützt.

Ich habe zur Kenntnis genommen, dass ich zur Drucklegung meiner Arbeit unter der Bezeichnung

### Numerische Analyse der Zündung und der turbulenten Flammenausbreitung in Diesel-Gas Dual-Fuel-Motoren

nur mit Bewilligung der Prüfungskommission berechtigt bin. Ich erkläre an Eides statt, dass die vorliegende Dissertation nach den anerkannten Grundsätzen für wissenschaftliche Abhandlungen von mir selbstständig und unter ausschließlicher Verwendung der angegebenen Literatur und Hilfsmittel erstellt wurde. Die Arbeit wurde bisher in gleicher oder ähnlicher Form keiner anderen Prüfungsbehörde im In- oder Ausland vorgelegt und auch nicht veröffentlicht. Diese Arbeit stimmt mit der von den Begutachtern beurteilten Arbeit überein.

Ich nehme zur Kenntnis, dass die vorgelegte Arbeit mit geeigneten und dem derzeitigen Stand der Technik entsprechenden Mitteln (Plagiat-Erkennungssoftware) elektronisch-technisch überprüft wird. Dies stellt einerseits sicher, dass bei der Erstellung der vorgelegten Arbeit die Qualitätsvorgaben im Rahmen der geltenden Regeln zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis "Code of Conduct" an der TU Wien eingehalten wurden. Zum anderen werden durch einen Abgleich mit anderen studentischen Abschlussarbeiten Verletzungen meines persönlichen Urheberrechts vermieden.

Wien, den 15. März 2022

Jens Frühhaber

# Vorwort und Danksagung

Übernahme des Vorsitzes der mündlichen Prüfung.

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Projektassistent am Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik der Technischen Universität Wien.

Mein besonderer Dank gilt Prof. Dr. Thomas Lauer für die wissenschaftliche Betreuung meiner Arbeit sowie für die zahlreichen fachlichen Diskussionen und Ratschläge, die maßgeblich zur Qualität der vorliegenden Arbeit beigetragen haben. Des Weiteren möchte ich mich bei Prof. Dr. Michael Wensing und Prof. Dr. Michael Harasek für die Begutachtung der Arbeit bedanken. Ebenso danke ich Prof. Dr. Bernhard Geringer für die Möglichkeit meine Dissertation am Institut durchführen zu können und für die

Die Ergebnisse dieser Arbeit entstanden im Rahmen des Forschungsprojektes "Dual Flame" in Kooperation mit dem Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der FAU Erlangen-Nürnberg, dem Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und technische Biowissenschaften der TU Wien und der AVL List GmbH. Ich möchte mich bei allen Beteiligten für die gute Zusammenarbeit und die Unterstützung bedanken. Besonders hervorheben möchte ich hierbei Dr. Andreas Peter und Dr. Sebastian Schuh.

Bedanken möchte ich mich ebenso bei meinen Arbeitskollegen und Arbeitskolleginnen des Instituts für das angenehme Arbeitsumfeld und die große Hilfsbereitschaft. Mein besonderer Dank gilt Herrn Norbert Zöbinger und Herrn Dr. Bastian Beyfuss für die vielen produktiven Diskussionen und motivierenden Gespräche, die mir während meiner Arbeit eine große Hilfe waren.

Mein größter Dank gilt meiner Partnerin Emilia Standl und meiner Familie ohne deren Unterstützung und Rückhalt ich nicht soweit gekommen wäre.

Diese Arbeit ist meinen Eltern Heidi und Heiko Frühhaber gewidmet.

# Kurzfassung

Im Bereich der Großmotoren stellt die Dual-Fuel-Verbrennung eine interessante Alternative zu konventionellen Dieselmotoren dar, da diese eine Reduktion der Stickoxid- ,CO<sub>2</sub>- und Ruß-Emissionen ermöglicht. Hierbei wird eine kleine Menge Dieselkraftstoff eingespritzt, um ein mageres Erdgas-Luft-Gemisch zu entflammen. Der Verbrennungsprozess ist durch das Vorhandensein von Selbstzündung, diffusiver und vorgemischter Verbrennung gekennzeichnet. Das zusätzliche Auftreten irregulärer Verbrennungsphänomene und zyklischer Schwankungen führt zu einer hohen Komplexität des Brennverfahrens. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden umfassende numerische Strömungssimulationen durchgeführt, um einen detaillierteren Einblick in den Ablauf des Brennverfahrens zu erhalten.

Die Piloteinspritzung stellt für die Modellierung eine große Herausforderung dar, da der Injektor durch kurze Einspritzvorgänge in den ballistischen Betriebsbereich gezwungen wird, welcher durch stark transiente Bedingungen am Düsenaustritt gekennzeichnet ist. In dieser Arbeit wurde ein Ansatz zur Impulserhaltung entlang der Strahlachse angewendet, um die Startbedingungen am Düsenaustritt auf Basis optischer Messdaten zu errechnen. Mit dieser Methodik konnte eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Eindringtiefen der Dampf- und der Flüssigphase erzielt werden. Das Modell erfasst hierbei die Effekte des Umgebungsdruckes sowie der Umgebungstemperatur auf die Impulsausbreitung im Strahl und liefert einen neuen Ansatz zur Modellierung der Piloteinspritzung. Zur Simulation der Strahlzündung wurde detaillierte Reaktionschemie eingesetzt, wobei die experimentell beobachteten Zündorte und die Flammenausbreitung korrekt abgebildet werden konnten. Des Weiteren konnte eine Verlängerung der Zündverzugszeit durch die Anwesenheit von Erdgas modelltechnisch abgebildet werden.

Ausgehend von diesen Untersuchungen, wurde ein Flammenfortschrittsmodell adaptiert, um mehrere Motorzyklen mittels Large Eddy Simulation zu berechnen. Hierbei war es möglich die Verbrennung für unterschiedliche energetische Dieselanteile korrekt zu beschreiben. Dabei konnte ein hoher Beitrag des Brenngases zur Wärmefreisetzung bereits zu Beginn der Verbrennung festgestellt werden. Des Weiteren zeigte eine Analyse der turbulenten Verbrennungsregime, dass Turbulenz-Chemie-Interaktion nur während der Zündung zum Tragen kommt. In der nachfolgenden Gasverbrennung konnte nur ein Eindringen der kleinsten Wirbel in die Vorwärmzone und somit ein Einfluss auf den Stoff- und Wärmetransport in der Flamme festgestellt werden. Die Interaktion der turbulenten Wirbel mit der Flammenfront konnte zusätzlich zur Zündung der Pilotstrahlen als Quelle zyklischer Schwankungen ausgemacht werden. Es konnte ebenso eine Korrelation des Spitzendruckes mit den Geschwindigkeitsschwankungen in Zylinderachse nachgewiesen werden, wodurch die Quetschströmung als wichtige Quelle für die Fluktuationen in den Fokus rückt. Die vorliegende Arbeit trägt durch detaillierte Analysen der Verbrennung zum Verständnis des Dual-Fuel-Brennverfahrens bei und liefert wichtige Informationen für die Entwicklung zukünftiger Verbrennungsmodelle.

## Abstract

Dual fuel combustion depicts an interesting alternative to conventional diesel engines in the field of large engines to reduce the emissions of carbon dioxide, nitrogen oxide and soot. Thereby, a small amount of diesel fuel is injected to ignite a lean natural gas-air mixture. The combustion process is characterized by autoignition, diffusive and premixed combustion. In addition, the occurrence of irregular combustion phenomena and cycle-to-cycle variations determine the high complexity of this process. In this work, detailed numerical simulations were carried out to get a deeper insight into the ongoing processes during combustion.

The modeling of the pilot injection is challenging since the injector is forced into the ballistic working regime by short injection events. This regime is characterized by strongly transient conditions at the nozzle exit. This work uses an approach of momentum conservation along the spray axis to derive the initial conditions at the nozzle exit from optical measurements. Utilizing this methodology a good agreement between the simulated and measured penetration of the liquid and the vapor phase could be achieved. The model captures the effect of the ambient pressure and temperature on the momentum propagation and delivers a new approach to model pilot injection. Detailed reaction chemistry was applied to model the ignition of the first flame structures and flame propagation. Further on, the model could depict a prolongation of the ignition delay time in the presence of natural gas.

Based on these investigations, a flame propagation model was adapted to model several consecutive engine cycles using large eddy simulation. Thereby, the combustion could be correctly described for various energetic diesel shares. A high contribution of the natural gas to the heat release at the beginning of the combustion could be found. An analysis of the turbulent combustion regimes showed that turbulence chemistry interaction is only present during the ignition process. During the subsequent gas combustion a penetration of the smallest eddies into the preheat zone influencing the species and heat transport inside the flame front could be found. In addition to the ignition of the pilot jets, the interaction of the turbulent eddies with the flame front could be determined as a source for cycle-to-cycle variations. A correlation of the peak pressure with the velocity fluctuations in the direction of the cylinder axis could be found, which puts the squish flow as a source for cycle-to-cycle variations into focus. The present work contributes to understanding the dual fuel combustion process utilizing a detailed analysis of the combustion. It delivers important information for the development of future combustion models.

# Inhaltsverzeichnis

N	omen	latur		VIII
1	1 Einleitung 1			
	1.1	Motivation		
	1.2	Vorgehensweise und Zielsetzung	5 • • • • • • • • • • • • • • • • • • •	3
	1.3	Wissenschaftlicher Beitrag		. 4
2	The	oretische Grundlagen der Dual-	Fuel-Verbrennung	6
	2.1	1 Einteilung der Dual-Fuel-Brennverfahren		
	2.2	Charakteristik des Diesel-Gas I	Jual-Fuel-Brennverfahrens	7
	2.3	Irreguläre Verbrennungsphänon	1ene	9
		2.3.1 Klopfen und Vorentflam	mungen	9
		2.3.2 Flammenlöschen		10
	2.4	Emissionen		12
		2.4.1 Stickoxide		12
		2.4.2 Kohlenmonoxid		14
		2.4.3 Unverbrannte Kohlenwa	sserstoffe und Ruß	. 14
3	Modellierung der motorischen Verbrennung		16	
	3.1	Berechnung turbulenter Strömu	ngen	16
		3.1.1 Charakteristik turbulent	er Strömungen	16
		3.1.2 Turbulenzmodelle		18
		3.1.3 Large Eddy Simulation		19
	3.2	Kraftstoffeinspritzung		21
		3.2.1 Beschreibung der Flüssi	gphase	21
		3.2.2 Strahlaufbruch		23
		3.2.3 Verdampfung		26
		3.2.4 Turbulente Dispersion		27
	3.3	Berechnung der Zündung und d	ler Verbrennung	28
		3.3.1 Charakteristik turbulent	er Verbrennungsprozesse	28
		3.3.2 Detaillierte Reaktionsch	emie	33
		3.3.3 Verbrennungsmodell .		35
		3.3.4 Stickoxidbildung		36
4	Ans	tz zur Modellierung der Pilote	inspritzung	38
	4.1	Experimentelle Untersuchung d	er Strahlausbreitung	38
	4.2	Modellaufbau und Bestimmung	der Randbedingungen der CFD Simulation $% \mathcal{A}$ .	40
	4.3	Ergebnisse der Einspritzsimulat	ion	44

	4.4	Analyse der Entflammungscharakteristik des Pilotstrahls	48
5	Unt	ersuchung des Zündvorgangs in Brenngashintergrund	<b>53</b>
	5.1	Rapid Compression Expansion Machine	53
	5.2	CFD Modell der RCEM	55
	5.3	Analyse der Dual-Fuel-Zündung	56
6	Sim	ulation der Verbrennung im Forschungsmotor	61
	6.1	Randbedingungen für die CFD Simulation	61
	6.2	Aufbau des Simulationsmodells für die Large Eddy Simulation	62
	6.3	Adaption des ECFM Verbrennungsmodells	64
	6.4	Simulationsergebnisse	66
		6.4.1 Zylinderdruckverlauf und Wärmefreisetzung	66
		6.4.2 Emissionen	71
		6.4.3 Analyse des Strömungsfeldes	75
7	Deta	aillierte Analyse der turbulenten Dual-Fuel-Verbrennung	81
	7.1	Charakteristik der Wärmefreisetzung	81
	7.2	Untersuchung der Verbrennungsregime im Borghi-Peters-Diagramm $\ .\ .\ .$	85
	7.3	Herkunft zyklischer Schwankungen	90
8	Zusa	ammenfassung	94
9	Aus	blick	97
Li	terati	urverzeichnis	99

# Nomenklatur

## Formelzeichen arabisch

A	$[m^2]$	Fläche
$A_s$	[versch.]	Präexponentieller Faktor
a	[—]	Korrekturfaktor
$B_{0,1}$	[—]	Modellkonstanten
$C_A$	[-]	Kontraktionsbeiwert
$C_v$	[—]	Geschwindigkeitsbeiwert
$C_D$	[—]	Widerstandsbeiwert
$C_d$	[—]	Durchflussbeiwert
$C_S, c_\mu$	[-]	Modellkonstanten
Da	[-]	Damköhler-Zahl
d	[m]	Durchmesser
$E_A$	[J/mol]	Aktivierungsenergie
$F_D$	[N]	Widerstandskraft
G	[-]	Gaußfunktion
h	[m]	Gitterweite
K	$[m^2/s^2]$	Turbulente kinetische Energie
k	[versch.]	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante
Ka	[-]	Karlovitz-Zahl
$L_x$	[m]	Integrale Längenskala
l	[m]	Länge
$\dot{M}$	[kgm/s]	Impulsstrom
m	[kg]	Masse
$\dot{m}$	[kg/s]	Massenstrom
p	[Pa]	Druck
$P_{max}$	[bar]	Spitzendruck
$\bar{p}$	[Pa]	Reynolds-gemittelter Druck
R	[J/(molK)]	Allgemeine Gaskonstante
Re	[-]	Reynoldszahl
r	[m]	Radius
s	[m/s]	Flammengeschwindigkeit
Sc	[-]	Schmidt-Zahl
St	[-]	Stokes-Zahl
T	[K]	Temperatur

t	[s]	Zeit
$t_e$	[s]	Wirbellebensdauer
u, v, w	[m/s]	Geschwindigkeit
u'	[m/s]	Turbulenzintensität
$\bar{u}$	[m/s]	$Reynolds-gemittelte\ Geschwindigkeit$
$\langle u \rangle$	[m/s]	Gefilterte Geschwindigkeit
V	$[m^{3}]$	Volumen
We	[-]	Weber-Zahl
x, y, z	[m]	Koordinaten
Ζ	[—]	Mischungsbruch

## Formelzeichen griechisch

$\alpha$	[°]	Kegelwinkel
Λ	[m]	Wellenlänge
$\lambda$	[—]	Verbrennungsluftverhältnis
ρ	$[kg/m^3]$	Dichte
$\bar{ ho}$	$[kg/m^3]$	Gemittelte Dichte
$\mu$	[kg/(ms)]	Dynamische Viskosität
ν	$[m^2/s]$	Kinematische Viskosität
$\epsilon$	$[m^2/s^3]$	Dissipationsrate
$\Sigma$	[1/m]	Flammenfrontdichte
$\sigma$	[N/m]	Oberflächenspannung
au	[s]	Zerfallszeit
$ au_{ij}$	$[N/m^2]$	Spannung
$ au_r$	[s]	Relaxationszeit
Ω	[1/s]	Wachstumsrate
$\dot{\omega}$	$[kg/(sm^3)]$	Reaktionsrate
δ	[m]	Flammenfrontdicke
$\eta$	[m]	Kolmogorov Länge
Θ	[°]	Experimenteller Kegelwinkel

## Weitere Indizes

0	Initial	
1, 2, 3	Koordinatenrichtungen	
a	Luft	
Bern	Bernoulli	
d	Tropfen	
F	Flammenfront	
f	Kraftstoff	
g	Gas	
i, j	Koordinatenrichtungen	
K	Kolmogorov	
L	Laminar	
l	Flüssigphase	
n	Düse	
rel	Relativ	
rms	Root-Mean-Square	
SGS	Sub-Grid-Scale	
st	Stöchiometrisch	
T	Turbulent	
u	Umgebung	
$\Delta$	Änderung	
δ	Reaktionszone	
Abkiirzungen		
	A 1 1 C 1	
AGR	Abgasruckfuhrung	
$\mathbf{CFD}$	Computational Fluid Dynamics	
COV	Variationskoeffizient	
$\mathbf{CSM}$	Coherent Structure Model	

DF Dual-Fuel

**TU Bibliothek**, Die approbierte gedruckte Originalversion dieser Dissertation ist an der TU Wien Bibliothek verfügbar. WEN Vourknowledge hub The approved original version of this doctoral thesis is available in print at TU Wien Bibliothek.

- **DIGE** Diesel-Ignited Gas Engine
- **DNS** Direkte Numerische Simulation
- **ECA** Emission Controlled Area
- ${\bf ECFM}~$  Extended Coherent Flame Model
- **IMO** International Maritim Organization
- **LES** Large Eddy Simulation

LNG	Flüssigerdgas
$\operatorname{LTT}$	Lehrstuhl für Technische Thermodynamik
MFB	Umsatzpunkt (Mass Fraction Burned)
$\mathbf{MZ}$	Methanzahl
OP	Betriebspunkt (Operating Point)
RANS	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen
RCEM	Rapid Compression Expansion Machine
$\operatorname{RFV}$	Reaktionsfortschrittsvariable
SOI	Einspritzbeginn (Start of Injection)
$\mathbf{SGS}$	Sub-Grid-Scale
SMD	Sauterdurchmesser (Sauter Mean Diameter)
TCI	Turbulenz-Chemie-Interaktion
TKE	Turbulente Kinetische Energie
VSC	Vienna Scientific Cluster

# 1 Einleitung

Die Reduktion des Ausstoßes von Treibhausgasen und Schadstoffen stellt heutzutage einen der wichtigsten Faktoren in der Entwicklung von Verbrennungsmotoren dar. Insbesondere im Bereich der Großmotoren kommt dieser auch mittelfristig eine hohe Bedeutung zu, da hier aktuell kaum Alternativen zum Verbrennungsmotor absehbar sind. Der Großteil dieser Motoren wird im maritimen Sektor mit Dieselkraftstoffen oder Schwerölen betrieben. Eine Substitution durch alternative Kraftstoffe stellt hier eine interessante Möglichkeit dar, um die Umweltbelastung durch Verbrennungsprodukte zu reduzieren. Bereits der Einsatz von fossilem Erdgas als Brennstoff ermöglicht aufgrund eines höheren H/C-Verhältnisses eine Reduktion der  $CO_2$ -Emissionen von 20% bis 32% im Vergleich zu konventionellen Flüssigkraftstoffen [1,2].

Des Weiteren lassen sich die Stickoxidemissionen im Betrieb mit Erdgas durch den Einsatz von Magerbrennverfahren deutlich reduzieren. Diese gewinnen aufgrund der strengen Emissionsgrenzwerte, welche von der International Maritim Organization (IMO) im Rahmen der Tier III vorgeschrieben werden, an Bedeutung. Aktuell ist Tier III auf die sogenannten Emission Controlled Areas (ECAs) in den Küstengebieten beschränkt. Die einzuhaltenden Stickoxidgrenzwerte belaufen sich in Abhängigkeit der Motordrehzahl auf 2,0 g/kWh bis 3,4 g/kWh [3]. Ein Überblick über die betroffenen Küstenregionen ist in Abbildung 1.1 dargestellt.



Abbildung 1.1: Darstellung der Emission Controlled Areas erstellt auf Basis der von der IMO vorgegebenen Koordinaten [4–6].

Die Einhaltung dieser Emissionsgrenzwerte ist hierbei mit konventionellen Dieselmotoren ohne Abgasnachbehandlung kaum möglich. Dual-Fuel (DF)-Motoren, welche eine geringe Menge Dieselkraftstoff zur Einleitung einer mageren Erdgasverbrennung nutzen, weisen hingegen Rohemissionen auf, die bereits unterhalb der Grenzwerte der Tier III liegen [7]. Einen weiteren Vorteil der DF-Motoren stellt die Kraftstoffflexibilität dar. Bei entsprechender Auslegung des Brennverfahrens lässt sich sowohl ein reiner Gasbetrieb mit kleinsten Zündölmengen, als auch ein reiner Dieselbetrieb darstellen. Dies führt im Dieselbetrieb jedoch zu einer Reduktion der Effizienz, da das Verdichtungsverhältnis aufgrund der Darstellbarkeit des Gasbetriebes reduziert werden muss. Die Kraftstoffflexibilität ermöglicht jedoch eine schnelle Reaktion auf die lokalen Kraftstoffpreise und die Kraftstoffverfügbarkeit, wodurch ein zuverlässiger Betrieb auch außerhalb der ECAs sichergestellt ist. Innerhalb der ECAs befindet sich die Infrastruktur in Form von Flüssigerdgas (LNG)-Terminals im Ausbau, um eine lückenlose Versorgung sicherzustellen [8, 9]. Die weitere Verbreitung von LNG als Kraftstoff in der Schifffahrt zeichnet sich bereits an den Neubestellungen für die nächsten Jahre ab [1,9] und verhilft somit auch dem DF-Motor zu weiteren Marktanteilen.

## 1.1 Motivation

Die steigende Relevanz der DF-Motoren in der Schifffahrt erfordert eine weitere Optimierung und Erforschung der DF-Verbrennung von Erdgas und Diesel, um hohe Wirkungsgrade in Kombination mit geringsten Emissionen zu ermöglichen. Bei der DF-Verbrennung handelt es sich um ein Brennverfahren, welches sowohl vorgemischte als auch diffusive Verbrennungsregime aufweist. Die Einleitung der Verbrennung erfolgt hierbei durch eine geringe Menge Dieselkraftstoff, welche ein mageres Erdgas-Luft-Gemisch entflammt.

Die Ausbildung des sogenannten Pilotstrahls, insbesondere im Fall eines ballistischen Betriebs des Kraftstoffinjektors für sehr geringe Dieselmengen, und der Zündvorgang im Erdgashintergrund sind bisher nicht abschließend untersucht. Im ballistischen Betriebsbereich erreicht die Injektornadel aufgrund sehr kurzer Öffnungszeiten nicht die Vollöffnung und folgt somit einer ballistischen Flugbahn, wodurch es zu stark transienten Bedingungen am Düsenauslass kommt. Die Folge ist ein variierendes asymmetrisches Strahlbild, welches unter anderem als eine mögliche Ursache für auftretende zyklische Schwankungen ausgemacht wird [10, 11].

Die Ausbreitung des Pilotkraftstoffes während des Zündverzuges bestimmt die nachfolgende Entstehung der ersten Zündorte und somit auch die Einleitung der nachfolgenden turbulenten Gasverbrennung. Der Einfluss der Einmischung des Brenngases in den Dieselstrahl auf die Gemischbildung und die kinetisch kontrollierten Vorgänge während des Zündverzuges stellen dabei Besonderheiten dieses Brennverfahrens dar. Des Weiteren sind die Prozesse während des Übergangs von der diffusiven Verbrennung des Dieselkraftstoffes in die turbulente Gasverbrennung bisher noch nicht zur Gänze untersucht. Die eingesetzte Dieselmenge und das Verbrennungsluftverhältnis des Erdgas-Luft-Gemisches sind hierbei ausschlaggebend für die Charakteristik des Brennverlaufes und das Auftreten von irregulären Verbrennungsphänomenen, wie Klopfen und Flammenlöschen, in den Grenzbereichen des Brennverfahrens [12, 13]. Zusätzlich treten bei der DF-Verbrennung zyklische Schwankungen auf. Zyklische Schwankungen sind hauptsächlich von Ottomotoren bekannt und sind in diesem Bereich bereits intensiv untersucht worden [14–16]. Über die Ursachen dieser Schwankungen in DF-Motoren ist hingegen noch relativ wenig bekannt. Eine möglich Quelle stellt hier, wie bereits erwähnt, die Piloteinspritzung dar, jedoch lassen sich nicht alle beobachteten Schwankungen auf die Piloteinspritzung zurückführen. Die Stochastik der turbulenten Zylinderinnenströmung spielt hierbei ebenso eine entscheidende Rolle, sowohl in Bezug auf die Aufbereitung des Pilotkraftstoffes, als auch auf den Flammenfortschritt in dem mageren Erdgas-Luft-Gemisch [17].

## 1.2 Vorgehensweise und Zielsetzung

Der Ablauf und die Besonderheiten der DF-Verbrennung sind aufgrund ihrer Komplexität bisher nicht zur Gänze verstanden. Da experimentelle Untersuchungen, die einen Einblick in den Verbrennungsprozess ermöglichen, extrem aufwändig und teuer sind, liegt der Einsatz von Computational Fluid Dynamics (CFD) Methoden für die Erforschung des Brennverfahrens nahe.

Für eine umfangreiche Analyse des Brennverfahrens ist es erforderlich die Prozesse der Piloteinspritzung, der Zündung und der Flammenausbreitung korrekt zu modellieren. Die Menge und die Aufbereitung des Pilotkraftstoffes stellen dabei entscheidende Faktoren für die initiale Wärmefreisetzung dar [18, 19]. Aufgrund des ballistischen Betriebsbereiches des Injektors kommt es zu stark transienten Randbedingungen am Düsenaustritt, wodurch die Definition der Randbedingungen für die CFD eine große Herausforderung darstellt. Die Entwicklung eines geeigneten Modellierungsansatzes stellt somit eine wichtige Aufgabe für die nachfolgende Simulation der Verbrennung dar.

Die Zündung des Pilotkraftstoffes ist durch eine Interaktion mit dem mageren Brenngas-Luft-Gemisch geprägt. Die dabei ablaufenden komplexen chemischen Prozesse lassen sich mittels detaillierter Reaktionschemie exakt abbilden. Für die Diesel- und die Gasverbrennung sind in der Literatur bereits einige Mechanismen präsentiert worden, wie von den Autoren in [20,21] aufgezeigt. Für die DF-Verbrennung muss der eingesetzte Reaktionsmechanismus in der Lage sein die Interaktion der beiden Kraftstoffe korrekt abzubilden. Die Auswahl des Mechanismus ist somit entscheidend für eine korrekte Beschreibung der Zündung.

Für die nachfolgende Simulation der Flammenausbreitung im Brenngas ist der Einsatz der Reaktionschemie jedoch limitiert, da die aufgrund der hohen Brennraumdrücke sehr dünne Flammenfront nur unzureichend von der Netzauflösung erfasst werden kann. Somit können die steilen Temperaturgradienten, die für den Flammenfortschritt entscheidend sind, nicht aufgelöst werden [22]. Ein Ansatz diese Problematik zu entzerren wurde bereits von einigen Autoren mittels einer adaptiven Netzverfeinerung in Flammennähe aufgezeigt [23–26]. Da der Rechenaufwand hierbei jedoch enorm ist und eine detaillierte Auflösung der Flammenfront ebenso nur schwer erreicht werden kann, liegt die Wahl eines Flammenfortschrittsmodells nahe. Ansätze dieser Art wurden bereits in [27, 28] für die DF-Verbrennung präsentiert und zeichnen sich durch ihre Zuverlässigkeit, welche durch einen langjährigen Einsatz im Bereich der Ottoverbrennung bestätigt wurde, aus. Des Weiteren wurden diese Modelle bereits erfolgreich im Kontext der Multizyklensimulation mittels Large Eddy Simulation (LES) angewendet [14, 29].

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es das Verständnis und die Methodik zur Modellierung der DF-Verbrennung zu verbessern. Zunächst wird in Kapitel 4 auf Basis von detaillierten optischen Messdaten zur Ausbreitung des Pilotstrahls ein Modellierungsansatz entwickelt, um die Aufbereitung des Pilotstrahls im ballistischen Bereich simulativ abbilden zu können und definierte Randbedingungen für die Verbrennung zu schaffen. Darauffolgend wird die Zündung des Pilotstrahls in Lufthintergrund mittels eines speziell für die DF-Verbrennung optimierten Reaktionsmechanismus simuliert, um den Zündverzug und die Bildung erster Flammenstrukturen zu untersuchen. Nachfolgend wird in Kapitel 5 die Zündung in Brenngashintergrund mittels eines Simulationsmodells einer Rapid Compression Expansion Machine (RCEM) modelliert und mit experimentellen Druckverläufen der RCEM validiert. Ziel ist es den Einfluss des Brenngases auf die Zündung korrekt zu beschreiben und zu untersuchen.

Auf Basis der so gewonnen Erkenntnisse wird in Kapitel 6 ein Flammenfortschrittsmodell adaptiert und für die Multizyklensimulation mittels LES eingesetzt. Die LES löst die energietragenden Wirbelstrukturen direkt auf, während die kleinen Wirbelstrukturen modelliert werden. Hierdurch wird eine detailliertere Beschreibung der turbulenten Zylinderinnenströmung und eine Erfassung des stochastischen Charakters der Turbulenz ermöglicht. Im Vergleich zum weit verbreiteten Ansatz der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS), welcher ein mittleres Strömungsfeld berechnet, ist die LES in der Lage zyklische Schwankungen zu erfassen. Des Weiteren wird die Anisotropie der turbulenten Wirbel von der LES berücksichtigt. Die LES ermöglicht somit eine detaillierte Analyse der Ursachen der zyklischen Schwankungen, welche in der Ausprägung der Pilotstrahlen und der Interaktion der Flammenfront mit der turbulenten Strömung zu finden sind. Das Modell wird mittels Messdaten eines Forschungsmotors für unterschiedliche Betriebspunkte validiert und der Einfluss des energetischen Dieselanteils auf den Ablauf der Verbrennung, das Auftreten von zyklischen Schwankungen und die Emissionsbildung untersucht. Abschließend werden die bei der Verbrennung ablaufenden Prozesse in Kapitel 7 detailliert betrachtet und die Ursachen für zyklische Schwankungen diskutiert.

## **1.3 Wissenschaftlicher Beitrag**

Im Kontext der Modellierung der DF-Verbrennung sind noch viele Fragen auf dem Weg zu einem prädiktiven allgemeingültigen Ansatz offen. Die vorliegende Arbeit trägt durch eine Methodik zur Modellierung der Piloteinspritzung dazu bei, die Randbedingungen für die Verbrennung exakter abzubilden. Die mittels detaillierter Reaktionschemie durchgeführten Simulationen des Zündvorgangs liefern dabei zusätzliche Erkenntnisse zum Einfluss des Brenngases auf die Zündung. Der Übertrag dieser Erkenntnisse zur Adaption eines bestehenden Flammenfortschrittsmodells in dieser Arbeit stellt eine weitere Möglichkeit zur Berechnung der DF-Verbrennung dar. Des Weiteren stellt die Arbeit durch detaillierte LES Simulationen und detaillierte Auswerteverfahren eine Datenbasis für die Weiterentwicklung bestehender Modellierungsansätze bereit. In diesem Kontext wurde eine neue Methodik zur Analyse der Verbrennungsregime im Borghi-Peters-Diagramm entwickelt, wodurch die Arbeit einen Einblick in die Interaktionen der Flammenfront mit der turbulenten Strömung ermöglicht. Im Rahmen dieser Dissertation entstanden folgende Publikationen und Beiträge, deren Inhalt mit der vorliegenden Arbeit teilweise deckungsgleich ist:

- Numerical Investigation of the Turbulent Flame Propagation in Dual Fuel Engines by Means of Large Eddy Simulation, Energies 2021, 14, 5036.
- Modeling dual fuel combustion using an extended coherent flame model and detailed chemistry, AVL International Simulation Conference 2019, Graz, Österreich, 22.-24.10.2019 (Vortrag ohne Manuskript).
- Modeling the Pilot Injection and the Ignition Process of a Dual Fuel Injector with Experimental Data from a Combustion Chamber Using Detailed Reaction Kinetics, SAE Technical Paper 2018-01-1724.
- Numerical investigation of inert and reactiv spray characteristics during pilot injection of a dual fuel injector, 7th European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECFD), Glasgow, UK, 11.-15.06.2018.

# 2 Theoretische Grundlagen der Dual-Fuel-Verbrennung

In diesem Kapitel werden die theoretischen Grundlagen der DF-Verbrennung erläutert, die für das Verständnis der Untersuchungen in dieser Arbeit erforderlich sind. Hierbei werden sowohl die Besonderheiten des Brennverfahrens, als auch der Stand der Technik dargelegt. Zusätzlich werden die bisher nicht zur Gänze geklärten Phänomene, die im Verlauf der Verbrennung auftreten und unter anderem die Motivation zu dieser Arbeit lieferten, hervorgehoben.

## 2.1 Einteilung der Dual-Fuel-Brennverfahren

DF-Brennverfahren lassen sich grundlegend nach dem Ort der Einbringung des Brenngases unterteilen, wie in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt ist. Im Falle des Diesel-Gasmotors wird ein Brenngas-Luft-Gemisch angesaugt, welches durch das Einspritzen von Dieselkraftstoff nahe des oberen Totpunktes entflammt wird. Die Verbrennung ähnelt hierbei zunächst der diffusiven Dieselverbrennung im Bereich des Pilotstrahls. Später erfolgt ein Übergang in eine vorgemischte Gasverbrennung, welche die Charakteristik einer klassischen Ottoverbrennung aufweist.



Abbildung 2.1: Einteilung der DF-Brennverfahren angelehnt an [30].

Eine weitere Untergliederung der Diesel-Gasmotoren erfolgt durch die Abdeckung der mögli-

chen Betriebsbereiche im Bezug auf die energetischen Anteile des Brenngases und des Dieselkraftstoffes. Bei dem Konzept des Zündstrahl-Motors wird nur der Gasbetrieb abgedeckt, da nur eine geringe Menge Dieselkraftstoff zur Entflammung des Brenngases bereitgestellt wird. Ein reiner Dieselbetrieb ist hierbei nicht vorgesehen. Diesel-Gas DF-Motoren hingegen ermöglichen sowohl einen reinen Gasbetrieb mit einem energetischen Dieselanteil von <1%, als auch einen reinen Dieselbetrieb und stellen somit das Konzept mit der höchsten Flexibilität dar [30]. Der Dieselkraftstoff wird dabei entweder über einen sogenannten "Wide Range" Injektor oder eine Kombination aus zwei Injektoren unterschiedlicher Größe eingebracht [11]. Der kleinere Pilotinjektor stellt eine ausreichende Aufbereitung und eine hohe Reproduzierbarkeit des Kraftstoffsprays bei sehr geringen Dieselmengen sicher. Konventionelle Dieselinjektoren weisen insbesondere bei kleinen Dieselmengen große Schwankungen in der Kraftstoffmenge und der Ausprägung des Kraftstoffsprays auf, wodurch der Einsatz der genannten Injektoren erforderlich wird. Ein weiteres Konzept im Bereich der Diesel-Gasmotoren stellt der Substitutionsmotor dar. Bei diesem wird ausgehend vom reinen Dieselbetrieb Dieselkraftstoff durch Brenngas ersetzt, wobei die geringst mögliche Dieselmenge bei deutlich größer 1% liegt. Das Konzept wird größtenteils als Nachrüstlösung für bestehende Dieselmotoren eingesetzt, wobei die Substitutionraten durch das Motorkonzept begrenzt werden [31]. Die maximal erreichbare Substitutionsrate ist hierbei vor allem durch das Auftreten von irregulären Verbrennungsphänomenen begrenzt [2, 13].

Ein weiteres Brennverfahren im Bereich der DF-Motoren kommt im Gas-Dieselmotor zum Einsatz. Das Verfahren unterschiedet sich grundlegend vom Diesel-Gasmotor, da das Brenngas unter Hochdruck direkt in den Brennraum eingeblasen wird. Dabei wird zunächst eine kleine Menge Dieselkraftstoff nahe des oberen Totpunktes eingespritzt, welche die Verbrennung durch Selbstzündung einleitet. Nachfolgend wird das Brenngas in die Pilotflamme eingeblasen und verbrennt diffusiv. Das Verfahren zeigt somit eine starke Ähnlichkeit zum Dieselmotor. Da durch die Direkteinblasung Klopfen oder Selbstzündung im Brenngas vermieden werden, kann ein höheres Verdichtungsverhältnis zur Steigerung des Wirkungsgrades realisiert werden. Des Weiteren können Brenngase mit niedriger Methanzahl und somit hoher Klopfneigung verwertet werden [2,31]. Da der Gas-Dieselmotor nicht im Fokus der vorliegenden Arbeit liegt, beziehen sich die nachfolgenden Ausführungen auf den Diesel-Gas Dual-Fuel-Motor.

### 2.2 Charakteristik des Diesel-Gas Dual-Fuel-Brennverfahrens

Die Charakteristik der DF-Verbrennung lässt sich anhand des Verlaufs der Wärmefreisetzungsrate während des Verbrennungsvorgangs analysieren. Eine schematische Darstellung dieser ist in Abbildung 2.2 gegeben. Die Verbrennung wird zunächst durch die Selbstzündung des Pilotkraftstoffes eingeleitet, bei welcher der zündfähige Anteil des Dieselkraftstoffes

März 2022

schlagartig umgesetzt wird. Der erste rapide Anstieg der Wärmefreisetzungsrate ist auf diesen Vorgang zurückzuführen. Die Höhe des Anstiegs wird dabei durch die Menge des zündfähigen Gemisches und den Anteil des in den Strahl eingesaugten Brenngases bestimmt. Die entscheidenden Einflussgrößen sind hierbei der energetische Dieselanteil, die Luftzahl des Hintergrundgemisches und der Einspritzzeitpunkt [12, 17, 32, 33]. Nach dem Durchbrennen der Pilotstrahlen sinkt die Wärmefreisetzungsrate bis zu einem lokalen Minimum ab. In dieser Phase beginnt die Ausbildung einer Flammenfront in dem mageren Hintergrundgemisch, ausgehend von den Pilotflammen. Das kontinuierliche Anwachsen der Oberfläche der Flammenfront führt zu einem erhöhten Kraftstoffumsatz und somit zu einem erneuten Anstieg der Wärmefreisetzungsrate. Die maximale Wärmefreisetzungsrate wird hierbei maßgeblich durch die Luftzahl des Kraftstoff-Luft-Gemisches bestimmt [12, 17].



Abbildung 2.2: Schematische Darstellung des Brennverlaufs der DF-Verbrennung angelehnt an [17].

Während der turbulenten Gasverbrennung kann es zu einer schnellen Umsetzung des unverbrannten Frischgases kommen, welche sich in Form eines weiteren Peaks im Verlauf der Wärmefreisetzungsrate zeigt. Dieser spezielle Fall ist in Abbildung 2.2 als gestrichelte Linie dargestellt. Hierbei wird das Frischgas durch die bei der Verbrennung freiwerdende Wärme soweit aufgeheizt, dass die Zündtemperatur des Brenngases erreicht wird. Es folgt eine reaktionskinetisch kontrollierte Phase, in der das Brenngas im Vergleich zum turbulenten Flammenfortschritt schneller umgesetzt wird. Dieser Betriebszustand wird auch als PREMIER Verbrennung bezeichnet. Der Unterschied zur klopfenden Verbrennung besteht in der Ausprägung der Wärmefreisetzung, welche bei der klopfenden Verbrennung einen deutlich steileren Anstieg und ein höheres Maximum aufweist [34].

## 2.3 Irreguläre Verbrennungsphänomene

Die DF-Verbrennung ist durch das Auftreten irregulärer Verbrennungsphänomene limitiert, welche den möglichen Betriebsbereich des Motors begrenzen. Zum einen treten unter hoher Last und hohen Substitutionsraten Klopfen und Vorentflammungen auf, wodurch es zu schweren Schäden am Motor kommen kann. Zum anderen kommt es in stark abgemagerten Brenngas-Luft-Gemischen, welche bei geringen Substitutionsraten vorliegen, zu einem partiellen Verlöschen der Flamme, welches zu erhöhten HC- und CO-Emissionen führt. Des Weiteren kann das Flammenlöschen einen instabilen Motorbetrieb zur Folge haben. Im Folgenden werden die Ursachen und die Einflussfaktoren dieser Phänomene näher erläutert.

#### 2.3.1 Klopfen und Vorentflammungen

Unter klopfender Verbrennung versteht man partielle unkontrollierte Selbstzündungen des unverbrannten Gemisches, die im Fall der DF-Verbrennung zu einem späten Zeitpunkt im Brennverlauf auftreten [35]. Der Prozess der Selbstzündung ist hierbei reaktionskinetisch kontrolliert und somit abhängig von der Zusammensetzung und der Temperatur des unverbrannten Gemisches. Die einzelnen Bestandteile des eingesetzten Erdgases, welches normalerweise zum größten Teil aus Methan besteht, haben einen entscheidenden Einfluss auf die Klopffestigkeit des Gemisches. Die Klopffestigkeit wird im Fall von Erdgas durch die Methanzahl (MZ) beschrieben, analog zur Oktanzahl für Ottokraftstoff. Reaktive Komponenten wie Propan und Butan senken die MZ rapide, wodurch die Klopffestigkeit stark von der Zusammensetzung des vorliegenden Erdgases abhängt [17, 36]. Zusätzlich zur MZ begünstigen niedrige Luftzahlen das Auftreten von Klopfen, da die Reaktivität des Gemisches steigt und somit die Zündverzugszeit kürzer wird. Gleiches gilt für steigende Temperaturen der unverbrannten Ladung [37]. Aufgrund des im Vergleich zum Ottomotor höheren Verdichtungsverhältnisses ist die Temperatur zu Beginn der Kompression oft der limitierende Faktor für die realisierbaren Luftzahlen [38]. Die Ladungstemperatur lässt sich jedoch durch den Einsatz des Miller-Verfahrens, welches durch ein Schließen der Einlassventile vor dem unteren Totpunkt gekennzeichnet ist und im Bereich der Großmotoren weit verbreitet ist, absenken [30]. Kurze Zündverzugszeiten sind besonders im Fall von Großmotoren problematisch, da durch niedrige Drehzahlen und große Brennräume relativ viel Zeit für das Durchbrennen der Ladung benötigt wird und somit Klopfen begünstigt wird [36]. Effektive Möglichkeiten zur Vermeidung von Klopfen sind durch das Absenken der Einlasstemperatur, eine spätere Piloteinspritzung und den Einsatz gekühlter Abgasrückführung (AGR) gegeben [17]. Die klopfende Verbrennung äußert sich im Zylinderdruckverlauf durch ein hochfrequentes Oszillieren, wie in Abbildung 2.3 schematisch anhand der blauen Kurve dargestellt ist. Dieses Oszillieren ist nicht zu verwechseln mit den Druckschwingungen die durch die Zündung des

Pilotstrahls entstehen können und sich vom Beginn der Verbrennung an im Druckverlauf widerspiegeln [35, 39].



Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Zylinderdruckverlaufes für klopfende Verbrennung und Vorentflammung.

Vorentflammungen treten im Unterschied zum Klopfen bereits vor der Einleitung der Verbrennung durch den Pilotstrahl auf und sind durch eine steilen Druckanstieg gefolgt von heftigem Klopfen gekennzeichnet [35]. Die dabei auftretenden Zylinderdrücke fallen durch die schnelle Umsetzung großer Mengen von Kraftstoff zu einem sehr frühen Zeitpunkt der Verbrennung sehr hoch aus und können zu einem fatalen Motorschaden führen. Abbildung 2.3 zeigt einen schematischen Druckverlauf einer Vorentflammung anhand der roten Kurve. Die Ursachen für deren Auftreten sind vielfältig und bisher nicht abschließend geklärt. Im Bereich der DF-Motoren gelten Ablagerungen, Schmieröltropfen und spontane Selbstzündungen im Brenngas als wahrscheinlichste Ursachen. Die Düsenspitze des Injektors ist im DF-Betrieb besonders anfällig für Ablagerungsbildung durch Verkoken, da sie durch die geringen Dieselmengen nur wenig gekühlt wird. Des Weiteren wurde eine Abhängigkeit der Vorentflammungsneigung von dem Einspritzzeitpunkt festgestellt. Späte Piloteinspritzungen können zu örtlich begrenzten hohen Restgastemperaturen führen, die Selbstzündungen im Brenngas auslösen können [17,40].

#### 2.3.2 Flammenlöschen

Das Auftreten von Flammenlöschen stellt in DF-Motoren eine weitere Grenze des stabilen Betriebsbereichs dar. Flammenlöschen führt zu hohen Emissionen unverbrannter Kohlenwasserstoffe und zu hohen zyklischen Schwankungen im Motorbetrieb. Man unterscheidet hierbei das Verlöschen der Flamme in Spalten oder an den Brennraumwänden von dem Verlöschen der Flamme im mageren Brenngas-Luft-Gemisch. Bei ersterem sind die Wärmeverluste über die kälteren Brennraumwände entscheidend. Steigt der Wärmeverlust beim Annähern der Flamme an die Brennraumwand stark an, wird die Temperatur in der Vorwärmzone der Flamme so weit abgesenkt, dass die ablaufenden chemischen Reaktionen zum erliegen kommen und die Flamme erlischt [22]. Dieser Effekt ist hauptsächlich abhängig von der Verbrennungstemperatur und der Temperatur der Brennraumwände. Weitaus problematischer stellt sich das Verlöschen der Flamme während des turbulenten Flammenfortschrittes im Brennraum dar, da durch die unvollständige Verbrennung der Ladung hohe Kohlenwasserstoffemissionen emittiert werden. Der ausschlaggebende Faktor für dieses Phänomen ist die Luftzahl des Brenngas-Luft-Gemisches. Stark abgemagerte Gemische senken die laminare Flammengeschwindigkeit, wodurch die Flamme deutlich mehr Zeit benötigt um den gesamten Brennraum zu erfassen. Reicht die Zeit bis zu einem signifikanten Temperaturabfall während der Expansion nicht aus, kommt es zum Verlöschen. Abbildung 2.4(a) zeigt die Abhängigkeit der Flammengeschwindigkeit von dem Äquivalenzverhältnis, welches den Kehrwert der Luftzahl widerspiegelt. Der Einfluss der Gemischtemperatur is in Abbildung 2.4(b) dargestellt.



Abbildung 2.4: (a) Laminare Flammengeschwindigkeit von Methan in Abhängigkeit des Äquivalenzverhältnisses bei 1 bar und 300 K angelehnt an [41]; (b) Laminare Flammengeschwindigkeit von Methan in Abhängigkeit der Temperatur für 1 bar angelehnt an [42].

In sehr mageren Gemischen stellt eine gleichmäßige Entflammung bereits eine Herausforderung dar. Unzureichende Entflammung kann ebenso eine Ursache für eine unvollständige Verbrennung liefern, da die Flamme sich nachfolgend ungleichmäßig im Brennraum ausbreitet [13]. Dies kann, abhängig von den Betriebsparametern, auch den zentralen Bereich des Brennraumes betreffen. Durch eine Erhöhung der Dieselmenge kann dem entgegengesteuert werden, da die vom Einspritzstrahl generierte Turbulenz den Flammenfortschritt in diesem Bereich verbessert [17,33].

## 2.4 Emissionen

Die innermotorische Schadstoffentstehung stellt einen der wichtigsten Einflussfaktoren für die Brennverfahrensentwicklung dar. Grundlegend werden bei der Verbrennung abhängig vom Betriebsbereich Stickoxide, wobei hauptsächlich Stickstoffmonoxid (NO) entsteht, Kohlenmonoxid (CO), unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC) und Partikel gebildet. Der Anteil der Komponenten wird maßgeblich durch das Äquivalenzverhältnis bestimmt, wie in Abbildung 2.5 gezeigt ist.



Abbildung 2.5: Schematische Darstellung der Konzentrationen von NO, CO und HC in Abhängigkeit des Äquivalenzverhältnisses angelehnt an [30,41].

#### 2.4.1 Stickoxide

Die Bildung der Stickoxide kann auf Basis unterschiedlicher Mechanismen erfolgen, die im Folgenden näher erläutert werden. Der thermische Bildungspfad nach Zeldovich stellt den dominierenden Mechanismus für die Stickoxidbildung bei hohen Verbrennungstemperaturen dar, welche nahe der stöchiometrischen Gemischzusammensetzung erreicht werden. Dieser kann anhand der Reaktionsgleichungen 2.1 bis 2.3 beschrieben werden. Reaktionsgleichung 2.3 wurde hierbei später von Lavoire ergänzt, wodurch dieser Mechanismus als erweiterter Zeldovich-Mechanismus bezeichnet wird [30].

$$O + N_2 \longleftrightarrow NO + N$$
 (2.1)

$$N + O_2 \longleftrightarrow NO + O$$
 (2.2)

$$N + OH \longleftrightarrow NO + H$$
 (2.3)

Das Aufbrechen der Dreifachbindung des Stickstoffmoleküls nach Gleichung 2.1 erfordert eine sehr hohe Energie und führt dazu, dass die Reaktion erst bei sehr hohen Verbrennungstemperaturen stattfindet. Darauffolgend kommt es zu weiteren Reaktionen der dabei gebildeten Stickstoffradikale mit Sauerstoffmolekülen und Hydroxylradikalen. Die thermische Stickoxidbildung läuft hierbei kinetisch kontrolliert ab, da die Einstellung des Gleichgewichtszustands nur bei sehr hohen Temperaturen (>2500 K) ausreichend schnell abläuft. Diese Temperaturen treten im Motorbetrieb aber nur relativ kurz auf, wodurch sich das chemische Gleichgewicht nicht einstellt [30, 41].

Ein weiterer Bildungsweg der besonders in mageren Gemischen auftritt, ist durch die Bildung von Lachgas gekennzeichnet. Nach Reaktionsgleichung 2.4 reagiert Stickstoff mit einem Sauerstoffradikal und einem Stoßpartner zu Lachgas. Aufgrund der Notwendigkeit eines Stoßpartners läuft diese Reaktion bevorzugt bei hohen Brennraumdrücken ab. Das gebildete Lachgas reagiert danach mit einem weiteren Sauerstoffradikal zu Stickstoffmonoxid (siehe Gleichung 2.5) [30, 42].

$$N_2 + O + M \longleftrightarrow N_2 O + M \tag{2.4}$$

$$N_2O + O \longleftrightarrow NO + NO$$
 (2.5)

Stickoxid wird darüber hinaus in fetteren Gemischen über sogenanntes Prompt-NO in der Flammenfront gebildet. Unter fetten Bedingungen treten deutlich niedrigere Temperaturen auf, bei denen die thermische NO-Bildung nur eine geringe Rolle spielt. Das Prompt-NO entsteht bei der Reaktion von Stickstoff mit dem CH-Radikal, welches hauptsächlich in der Flammenfront zu finden ist. Dabei kommt es nach Reaktionsgleichung 2.6 zur Bildung von Blausäure, die nachfolgend über mehrere Zwischenschritte zu NO weiterreagiert [42].

$$CH + N_2 \longleftrightarrow HCN + N$$
 (2.6)

Eine weitere Quelle für Stickoxide ist durch im Brennstoff enthaltenen Stickstoff gegeben, der bei der Verbrennung zu NO reagiert. Normaler Dieselkraftstoff enthält so gut wie keinen Stickstoff, wodurch dieser Bildungspfad hier keine Rolle spielt. Schweröle können jedoch Stickstoff enthalten, da sich stickstoffhaltige Verbindungen bei der Destillation in den schwerer siedenden Fraktionen anreichern [41].

Bei der DF-Verbrennung treten im Vergleich zur Dieselverbrennung deutlich geringere Stickoxidemissionen auf, da der Großteil der Verbrennung im mageren Bereich abläuft. Die Verbrennung des Pilotstrahls kann hier als Hauptquelle für Stickoxidemissionen ausgemacht werden, da hier eine teilweise Umsetzung des Kraftstoffs nahe dem stöchiometrischen Mischungsverhältnis erfolgt. Der energetische Dieselanteil stellt somit einen ausschlaggebenden Faktor für die Höhe der Stickoxidemissionen dar und sollte zur Erzielung geringster Emissionen im Bereich von 1% liegen [12, 13, 17, 43]. Der thermische Bildungspfad spielt somit die größte Rolle für die DF-Verbrennung. Für kleine Dieselmengen ist jedoch auch mit einem Beitrag des Lachgaspfades durch die magere Gasverbrennung zu rechnen. Promt-NO und Kraftstoff-NO tragen hierbei in keinem signifikaten Ausmaß zur Stickoxidbildung bei.

#### 2.4.2 Kohlenmonoxid

Kohlenmonoxid stellt ein Zwischenprodukt der Verbrennung dar und wird nach Reaktionsgleichung 2.7 am Ende der Verbrennung zu Kohlendioxid oxidiert. Die Reaktion konkurriert hierbei im fetten und im stöchiometrischen Bereich mit anderen während der Verbrennung ablaufenden Reaktionen um die Hydroxylradikale, wodurch die Oxidation des Kohlenmonoxids erst nach der Oxidation der Brennstoffmoleküle stattfindet. Im mageren Bereich findet keine Hemmung der Reaktion mehr statt und die CO-Emissionen gehen zurück [30, 42].

$$CO + OH \longleftrightarrow CO_2 + H$$
 (2.7)

Im sehr mageren Bereich kommt es durch die niedrigeren Verbrennungstemperaturen zu einer Verlangsamung der CO-Oxidation, wodurch sich kein Gleichgewichtszustand mehr einstellt und die Reaktion zum Erliegen kommt. Aus diesem Grund steigen die CO-Emissionen in diesem Bereich wieder an. DF-Motoren weisen im Vergleich zu Dieselmotoren in niedrigen Lastbereichen teilweise höhere CO-Emissionen auf, da es hier zu einer starken Abmagerung kommt. Partielles Flammenlöschen trägt in diesem Bereich zusätzlich zu den CO-Emissionen bei [43,44].

#### 2.4.3 Unverbrannte Kohlenwasserstoffe und Ruß

Unverbrannte Kohlenwasserstoffe stellen besonders bei Gas- und DF-Motoren eine Herausforderung dar, da sie zu einem Großteil aus unverbranntem Methan bestehen. Methan weist durch vier C-H Bindungen eine höhere Stabilität auf als die bei der Verbrennung von konventionellem Kraftstoff entstehenden höheren Kohlenwasserstoffe. Die katalytische Konvertierung durch Einsatz einer zusätzlichen Abgasnachbehandlung würde aus diesem Grund hohe Betriebstemperaturen erfordern, die aufgrund der mageren Verbrennung schwer darstellbar sind [2]. Aus diesem Grund liegt der Fokus bei diesen Brennverfahren auf der innermotorischen Reduktion des unverbrannten Methans. Die Ursprünge des unverbrannten Methans sind zum einen, wie bereits dargelegt, im Verlöschen der Flamme an kalten Brennraumwänden und im partiellen Verlöschen in stark abgemagerten Gemischen zu finden. Zum anderen tragen stark zerklüftete Brennräume und große Feuerstegvolumen zu erhöhten Methanemissionen bei, da diese nur unzureichend von der Flammenfront erfasst werden. Zusätzlich gilt es die Spülverluste während der Ventilüberschneidung so gering wie möglich zu halten [17,30]. Weitere Kohlenwasserstoffemissionen können durch die Einbringung des Pilotkraftstoffes entstehen. Da die eingespritzten Mengen im Vergleich zu Dieselmotoren aber deutlich geringer ausfallen, spielt diese Emissionsquelle bei DF-Motoren eine eher untergeordnete Rolle. Die

Einspritzstrahlen treffen aufgrund der niedrigeren Eindringtiefen in keinem signifikanten Ausmaß auf kalte Brennraumwände auf, wo es zu unvollständiger Verbrennung kommen würde. Eine Quelle die auch bei DF-Motoren berücksichtigt werden muss ist durch das Sacklochvolumen des Injektors gegeben. Der dort nach der Einspritzung verbleibende Kraftstoff verlässt nur langsam den Injektor und wird meist nicht mehr vollständig verbrannt. Aus diesem Grund sollte das Sacklochvolumen des Injektors so klein wie möglich gehalten werden [45].

In lokal fetten Zonen entstehen zusätzlich zu unverbrannten Kohlenwasserstoffen Rußpartikel, die einen Großteil der gesamten Partikelemissionen ausmachen. Rußpartikel bestehen hauptsächlich aus elementarem Kohlenstoff, der durch Dissoziation von Kraftstoffmolekülen bei hohen Temperaturen in sauerstoffarmer Umgebung entsteht. Des Weiteren kann die Rußbildung durch Pyrolyse der Kraftstoffmoleküle unter Sauerstoffausschluss eingeleitet werden. Zunächst bilden sich ringförmige Strukturen, welche zu sogenannten Primärpartikeln anwachsen. Darauffolgend kommt es zu Agglomeration mehrerer Primärpartikel, wobei größere Partikel gebildet werden. Die Nachoxidation von Ruß erfolgt im Brennraum bei Temperaturen >1000 K und reduziert die ausgestoßene Rußmasse [30, 45]. Im Bereich der DF-Motoren treten nur geringe Rußemissionen auf, da aufgrund kleiner Dieselmengen weniger fette Zonen vorhanden sind, in denen die Rahmenbedingungen für Rußbildung vorliegen [43, 44]. Die Rußnachoxidation fällt hierbei jedoch auch geringer aus, da aufgrund der mageren Verbrennung niedrigere Brennraumtemperaturen erreicht werden [45].

# 3 Modellierung der motorischen Verbrennung

Der Inhalt dieses Kapitels umfasst die Grundlagen der Modellierung der motorischen Verbrennung mittels numerischer Strömungsmechanik und die für diese Arbeiten relevanten Modellierungsansätze. Zunächst wird die Charakteristik turbulenter Strömungen dargelegt und deren Abbildung in der Simulation. Darauf folgend werden die für die Berechnung der Einspritzung und der Verbrennung nötigen Modelle erläutert.

## 3.1 Berechnung turbulenter Strömungen

Die Simulation turbulenter Strömungen erfordert einen hohen Rechenaufwand und kann in der Praxis meistens nur mittels gewisser Vereinfachungen durchgeführt werden. Im Folgenden wird auf die dabei etablierten Berechnungsansätze, die auch in dieser Arbeit Anwendung finden, eingegangen.

#### 3.1.1 Charakteristik turbulenter Strömungen

Turbulente Strömungen weisen einen stark instationären Charakter auf, der durch hohe Schwankungen der Geschwindigkeitskomponenten in allen Raumrichtungen gekennzeichnet ist. Dabei treten Wirbelstrukturen unterschiedlichster Größe auf, welche die turbulente kinetische Energie (TKE) der Strömung beinhalten. Die Schwankungen zeigen dabei ein zufälliges Verhalten und erstrecken sich über unterschiedlichste Intensitäten und Frequenzen. Eine wichtige Kennzahl zur Unterscheidung turbulenter und laminarer Strömungen ist durch die Reynolds-Zahl *Re* gegeben. Die Reynolds-Zahl gibt ebenso Aufschluss über den Turbulenzgrad einer Strömung und ist nach Gleichung 3.1 als Verhältnis der Trägheitskräfte zu den Reibungskräfte definiert. Das Einsetzten der Turbulenz erfolgt ab einer kritischen Reynolds-Zahl, die unter anderem von der Phänomenologie der Strömung abhängt [46, 47].

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot l}{\mu} \tag{3.1}$$

Das Einsetzen der Turbulenz ist schematisch anhand einer Zylinderumströmung in Abbildung 3.1 dargestellt. Für  $Re = 10^{-2}$  liegt zunächst eine laminare Umströmung vor. Ein Ansteigen der Reynolds-Zahl hat zunächst ein Auftreten von Wirbelstrukturen zur Folge, welche Rezirkulationsgebiete bilden und sich beginnen periodisch abzulösen. Eine weitere Steigerung der Reynolds-Zahl über die kritische Reynolds-Zahl hinaus führt zur Bildung zufälliger turbulenter Strukturen. Zu Beginn sind hier noch periodische Anteile feststellbar, bis die Strömung für hohe Reynolds-Zahlen voll turbulent ist [30].



Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Umströmung eines Zylinders in Abhängigkeit der Reynolds-Zahl [30].

Die Geschwindigkeitsfluktuationen verlaufen trotz ihres zufälligen Charakters um einen definierten Mittelwert. Abbildung 3.2 zeigt hierzu schematisch den zeitlichen Verlauf der Strömungsgeschwindigkeit an einem fixen Punkt in einer turbulenten Strömung. Das zugrunde liegende Wirbelspektrum umfasst dabei einen weiten Bereich unterschiedlicher Wirbelgrößen und Zeitskalen, die nur für sehr einfache Strömungsvorgänge zur Gänze berechnet werden können. Aus diesem Grund muss die Turbulenz für komplexere Strömungsphänomene, wie sie meist für ingenieurtechnische Aufgabenstellungen vorliegen, zumindest teilweise modelliert werden [30, 47].



Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des zeitlichen Verlaufs der Geschwindigkeit an einem Punkt in der turbulenten Strömung [46].

### 3.1.2 Turbulenzmodelle

Die Berechnung turbulenter Strömungen erfolgt für die meisten technischen Anwendungen auf Basis der RANS Gleichungen. Diesen liegt der Ansatz nach Gleichung 3.2 zugrunde, nach dem die Strömungsgeschwindigkeit u als Summe einer mittleren Komponente  $\bar{u}$  und einer fluktuierenden Komponente u' beschrieben werden kann.

$$u = \bar{u} + u' \tag{3.2}$$

Mittels Gleichung 3.2 lassen sich die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen ausgehend von den Navier-Stokes-Gleichungen herleiten, wie anhand von Gleichung 3.3 am Beispiel der Impulsgleichungen für inkompressible instationäre Strömungen gezeigt ist. Bei der Reynoldsmittelung kommt ein zusätzlicher Term  $(-\rho \overline{u'_i u'_j})$  hinzu, der die sogenannten Reynoldsspannungen enthält. Da diese eine weitere Unbekannte darstellen, sind die Gleichungen nicht geschlossen, wodurch die Notwendigkeit der Turbulenzmodellierung zur Beschreibung dieser Spannungen gegeben ist [46, 47].

$$\rho \left[ \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \bar{u}_j \bar{u}_i \right) \right] = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \rho \overline{u'_i u'_j} \right]$$
(3.3)

Ein weit verbreiteter Ansatz zur Modellierung dieses Terms ist die Betrachtung der Turbulenz als zusätzliche Viskosität, wie in Gleichung 3.4 dargelegt. Eines der wichtigsten Modelle dieser sogenannten Wirbelviskositätsmodelle repräsentiert das k- $\epsilon$  Modell, welches diese zusätzliche turbulente Viskosität  $\mu_T$  nach Gleichung 3.5 in Abhängigkeit der turbulenten kinetischen Energie K und der Dissipationsrate  $\epsilon$  beschreibt. Die Variable  $c_{\mu}$  stellt dabei eine empirisch bestimmte Modellkonstante dar. Die TKE setzt sich aus den fluktuierenden Geschwindigkeiten in den drei Raumrichtungen zusammen (siehe Gleichung 3.6). Für die TKE und die Dissipationsrate werden zwei weitere Transportgleichungen gelöst, um die Verteilung der beiden Turbulenzgrößen im Strömungsfeld darzustellen [46, 47].

$$-\rho \overline{u'_i u'_j} = \mu_T \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right)$$
(3.4)

$$\mu_T = \rho c_\mu \frac{K^2}{\epsilon} \tag{3.5}$$

$$K = \frac{1}{2} \left( \overline{u_1'^2} + \overline{u_2'^2} + \overline{u_3'^2} \right)$$
(3.6)

Die Turbulenzgrößen zeigen in der Nähe von Wänden starke Gradienten, wodurch die Wahl geeigneter Randbedingungen schwierig wird. Meist werden sogenannte Wandfunktionen verwendet, um eine sehr feine Auflösung dieser Gradienten in Wandnähe zu umgehen. Der Hintergrund dieser Funktionen ist, dass der Verlauf der wandnahen Geschwindigkeit im Falle der turbulenten Grenzschicht einen logarithmischen Charakter aufweist. Voraussetzung für die Anwendbarkeit dieser Funktionen ist jedoch ein ausreichend großer Abstand des ersten Kontrollvolumens, der anhand des dimensionslosen Wandabstandes  $y^+$  quantifiziert werden kann. Der dimensionslose Wandabstand bezieht den Wandabstand dabei auf die Wandschubspannungsgeschwindigkeit, welche aus der Wandschubspannung abgeleitet wird. Eine Verbesserung der Ergebnisse in Wandnähe kann durch den Einsatz des k- $\zeta$ -f Modells erreicht werden, welches für die RANS Simulationen in dieser Arbeit angewendet wurde. Das Modell basiert auf dem  $v^2$ -f Modell, verwendet jedoch anstatt einer zusätzlichen Transportgleichung für die Fluktuation der wandnormalen Geschwindigkeitskomponente  $v^2$  eine Transportgleichung für das Verhältnis  $\zeta = v^2/k$ , wodurch die numerische Stabilität verbessert wird [46, 48].

#### 3.1.3 Large Eddy Simulation

Die LES stellt einen Mittelweg zwischen der RANS Simulation, welche einen Großteil der Turbulenz modelliert, und der Direkte Numerische Simulation (DNS), welcher eine vollständige Berechnung aller turbulenten Strukturen zugrunde liegt, dar. Der Ansatz der LES besteht in der direkten Auflösung der großen Skalen der Turbulenz, wohingegen die kleinen Strukturen modelliert werden. Die großen Skalen enthalten einen Großteil der TKE, wie in Abbildung 3.3 anhand des Energiespektrums einer turbulenten Strömung dargelegt ist. Im linken der drei Bereiche sind die energiereichen großen Skalen zu finden, auf denen die Produktion der TKE stattfindet. Der mittlere Bereich wird als Inertialbereich gekennzeichnet und ist dominiert von dem Energietransfer von großen zu kleinen Strukturen, wobei dies hauptsächlich auf dem Zerfall größerer Wirbel beruht. Im rechten Bereich erfolgt eine Dissipation der TKE bis zu den kleinsten Wirbelstrukturen, den sogenannten Kolmogorov Skalen, auf denen eine Umwandlung in Wärme erfolgt [47,49].



Abbildung 3.3: Energiespektrum der Turbulenz in Abhängigkeit der Wellenzahl.

Die Grenze zwischen direkter Berechnung und Modellierung befindet sich für die LES im Inertialbereich. Pope [50] schlägt eine direkte Berechnung der Wirbelstrukturen vor, die mindestens 80% der TKE enthalten. Die Herleitung der LES Gleichungen erfolgt ähnlich der RANS Gleichungen. Im Unterschied zur RANS wird anstatt der zeitlichen Mittelung eine Filterfunktion eingesetzt, wie sie in Gleichung 3.7 dargestellt ist. Als Filter kommt hierbei meist eine Gaußfunktion, ein Rechteckfilter oder ein idealer Tiefpass zum Einsatz [49]. Nachfolgend lässt sich die Geschwindigkeit ähnlich des RANS Ansatzes in Form einer gefilterten Größe und einer Schwankungsgröße darstellen.

$$\langle u(x,t)\rangle = \frac{1}{\Delta x} \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} u(x-x',t) \cdot G(x',\sigma) dx'$$
(3.7)

Die LES Gleichungen lassen sich nun, wie in Gleichung 3.8 anhand der Impulsgleichungen gezeigt ist, darstellen. Der Term  $-\rho \langle u'_i u'_j \rangle$  beinhaltet die zu modellierenden kleinen Wirbelstrukturen, welche als Sub-Grid-Scales (SGS) bezeichnet werden. Die Modellierung erfolgt meist durch die Einführung einer zusätzlichen Viskosität  $\mu_{SGS}$ , wie in den Gleichungen 3.9 und 3.10 gezeigt ist.

$$\rho \left[ \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \langle u_j \rangle \langle u_i \rangle \right) \right] = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) - \rho \langle u_i' u_j' \rangle \right]$$
(3.8)

$$\tau_{ij}^{sgs} = \rho \langle u_i' u_j' \rangle \tag{3.9}$$

$$\tau_{ij}^{sgs} = \mu_{SGS} \left( \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) = \rho \nu_{SGS} \cdot 2S_{ij} \tag{3.10}$$

Die Aufgabe des SGS Modells ist es eine Formulierung für diese Viskosität bereitzustellen. Dabei wird auf einfachere Modellansätze als sie in der RANS Modellierung zum Einsatz kommen zurückgegriffen, wodurch die erforderliche Rechenzeit an dieser Stelle geringer ausfällt. Eines der einfachsten Modelle ist durch das Smagorinski Modell gegeben, welches nach Gleichung 3.11 definiert ist.

$$\nu_{SGS} = (C_S h)^2 \sqrt{S_{ij} S_{ij}} \tag{3.11}$$

Die SGS Viskosität  $\nu_{SGS}$  wird hierbei in Abhängigkeit der lokalen Gitterweite h beschrieben. Die Modellkonstante  $C_S$  wird in den meisten Fällen mit einem Wert von  $C_S = 0, 17$  angegeben [49]. Das Modell hat jedoch den Nachteil, dass für eine exakte Berechnung der SGS eine Anpassung der Modellkonstante für unterschiedliche Strömungsphänomene erforderlich ist. Des Weiteren muss in Wandnähe eine Dämpfungsfunktion eingesetzt werden, um eine deutliche Reduktion der Wirbelviskosität in Wandnähe zu erreichen [46]. Aus diesem Grund wurde in der vorliegenden Arbeit ein sogenanntes Coherent Structure Model (CSM) nach Kobayashi [51] eingesetzt, welches laut Gleichung 3.12 anstatt der Modellkonstante  $C_S$  eine Funktion der lokalen Geschwindigkeitsgradienten C verwendet. Der Vorteil dabei ist, dass keine zusätzliche Dämpfungsfunktion in Wandnähe benötigt wird und das Modell sehr gut für komplexere Geometrien anwendbar ist.

$$\nu_{SGS} = Ch^2 \sqrt{S_{ij} S_{ij}} \tag{3.12}$$

## 3.2 Kraftstoffeinspritzung

Die Beschreibung der Kraftstoffeinspritzung stellt eine der wichtigsten Aufgaben im Bereich der Motorsimulation dar. Da es sich hier um eine Zweiphasenströmung handelt, welche sich über einen weiten Bereich räumlicher und zeitlicher Skalen erstreckt, liegt ein hoher Modellierungsaufwand vor. Die Dieseleinspritzung ist dabei besonders anspruchsvoll, da der Kraftstoff hier unter sehr hohem Druck nahe des oberen Totpunktes, an welchem hohe Temperaturen und Drücke vorliegen, eingebracht wird. Im Folgenden werden die bei der Einspritzung relevanten Prozesse und die für die Simulation angewendeten Modellierungsansätze zur Abbildung der Piloteinspritzung dargelegt.

#### 3.2.1 Beschreibung der Flüssigphase

Für die Berechnung disperser Kraftstoffsprays bietet sich die Lagrange Betrachtungsweise an, welche in Abbildung 3.4 schematisch dargestellt ist. Abweichend vom Euleransatz für die Gasströmung werden keine festen Kontrollvolumen betrachtet, sondern Partikel durch das Strömungsgebiet verfolgt. Dabei können die Partikel mit dem Strömungsfeld interagieren, wobei man zwischen 1-Weg- und 2-Wege-Kopplung unterscheidet. Ersteres geht von einer reinen Beeinflussung der Partikel durch das Strömungsfeld aus. Das Strömungsfeld wird dabei jedoch nicht von den Partikeln beeinflusst. Die 2-Wege-Kopplung berücksichtigt eine gegenseitige Interaktion zwischen Strömungsfeld und Partikel. Sie wird für die Modellierung von Einspritzprozessen vorwiegend verwendet [47].



Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Lagrangen Betrachtungsweise [47].

In der CFD Simulation können nicht alle Tropfen einzeln betrachtet werden, da ein Kraftstoffspray meist aus vielen Millionen Einzeltropfen besteht. Aus diesem Grund wird ein sogenanntes Discrete Droplet Model eingesetzt, welches das Spray anhand stochastischer Tropfenpakete (parcels) beschreibt. Die Tropfenpakete beinhalten eine bestimmte Anzahl an physikalisch identischen Tropfen, welche nicht miteinander interagieren. Ein Tropfenpaket repräsentiert somit immer eine bestimmte Tropfengröße. Die Pakete werden auf Basis der Lagrange Betrachtung durch die Simulationsdomäne verfolgt. Die Paketanzahl wird hierbei hauptsächlich durch die zu erreichende statistische Konvergenz bestimmt [52, 53].

Die Bewegung der Tropfenpakete wird durch die auf die Tropfen wirkende Widerstandskraft beeinflusst. Es treten zwar noch weitere Kräfte auf, die die Tropfenbewegung beeinflussen, wobei diese jedoch im Fall der Dieseleinspritzung eine untergeordnete Rolle spielen. Die Widerstandskraft lässt sich anhand von Gleichung 3.13 formulieren und wird maßgeblich durch die Relativgeschwindigkeit  $(\vec{u} - \vec{v})$  der Tropfen und der Gasphase, die Tropfengröße und die Dichte der beiden Phasen bestimmt [47,53].

$$\rho_l V_d \vec{F}_D = \frac{1}{2} \rho_g C_D A_d \cdot |\vec{u} - \vec{v}| \cdot (\vec{u} - \vec{v})$$
(3.13)

Zusätzlich wird in Gleichung 3.13 ein Widerstandsbeiwert benötigt, für dessen Formulierung eine Vielzahl unterschiedlicher Ansätze verfügbar ist. In der vorliegenden Arbeit wurde der Ansatz nach Schiller und Naumann angewendet, welcher nach Gleichung 3.14 in Abhängigkeit der Tropfenreynolds-Zahl  $Re_d$  definiert ist [54]. Die Tropfenreynolds-Zahl ist laut Gleichung 3.15, im Gegensatz zur Reynolds-Zahl der Strömung, durch den Tropfendurchmesser  $d_d$  und die Relativgeschwindigkeit des Tropfens definiert.

$$C_D = \begin{cases} \frac{24}{Re_d} + \frac{2,6Re_d^{0,687}}{Re_d} & Re_d < 1000\\ 0,44 & Re_d \ge 1000 \end{cases}$$
(3.14)

$$Re_d = \frac{\rho_g \vec{v}_{rel} d_d}{\mu_g} \tag{3.15}$$

#### 3.2.2 Strahlaufbruch

Am Austritt der Einspritzdüse kommt es im Fall der Dieseleinspritzung aufgrund sehr hoher Einspritzdrücke zu einem sofortigen Zerfall des flüssigen Kraftstoffstrahls. Abbildung 3.5 stellt diesen Primäraufbruch schematisch dar. Der Primäraufbruch ist von unterschiedlichsten Einflussfaktoren begleitet, die ihren Ursprung teilweise stromaufwärts in der Düse haben. Der Turbulenzgrad der Düseninnenströmung und das Auftreten von Kavitationsblasen, welche beim Düsenaustritt zerplatzten, spielen dabei eine große Rolle [55,56]. Außerhalb der Düse beginnen aerodynamische Kräfte den Strahl aufzureißen, wobei Ligamente und erste Primärtropfen entstehen. Teilweise ist auch noch ein intakter flüssiger Strahlkern feststellbar.



Abbildung 3.5: Schematische Darstellung des Strahlaufbruchs in Düsennähe [55].

Die Berechnung dieser Vorgänge ist nur in einem sehr begrenzten Bereich des Düsenaustritts möglich, wobei meist kombinierte LES und "Volume of Fluid" Ansätze, wie beispielsweise von den Autoren in [57], verwendet werden. Solche Ansätze sind für eine vollständige Betrachtung des Brennraums nicht geeignet, wodurch ein geeigneter Ansatz für die Startbedingungen gefunden werden muss. Sind keine Informationen über die Düseninnenströmung vorhanden, kommt oft eine verbreitete Methode, die "Blob Injection", zum Einsatz. Dabei werden Tropfen

März 2022

in der Größenordnung des Düsendurchmessers initialisiert und mittels eines Aufbruchsmodells schnell aufgebrochen, um bereits in Düsennähe ein ausreichend feines Spray darstellen zu können. Eine weitere Möglichkeit besteht in der Vorgabe einer initialen Tropfengrößenverteilung, da der Primäraufbruch auf einen sehr kleinen Bereich nahe der Düse beschränkt ist und das Spray stromabwärts schnell sehr fein wird [30].

Sowohl bei der "Blob Injection" als auch bei der Vorgabe einer initialen Tropfengrößenverteilung muss ein weiterer Aufbruch der Tropfen berücksichtigt werden. Dieser Aufbruch wird als Sekundäraufbruch bezeichnet und ist hauptsächlich durch aerodynamische Kräfte geprägt. Der Aufbruch kann hierbei anhand unterschiedlicher Mechanismen erfolgen, welche abhängig von den aerodynamischen Kräften und der Oberflächenspannung der Tropfen sind. Die dimensionslose Weber-Zahl  $We_g$  dient dabei als wichtige Kenngröße, um den Tropfenaufbruch zu klassifizieren. Die Weber-Zahl ist nach Gleichung 3.16 als Verhältnis des dynamischen Druckes und der Oberflächenspannung definiert [53].

$$We_g = \frac{\rho_g r v_{rel}^2}{\sigma_l} \tag{3.16}$$

Grundsätzlich ist ab einer kritischen Weber-Zahl von  $We_g = 6$  mit Tropfenzerfall zu rechnen. Für kleinere Weber-Zahlen reichen die aerodynamischen Kräfte nicht aus, um den Tropfen derart zu destabilisieren, dass die Oberflächenspannung diesen nicht mehr zusammenhalten kann. Kommt es zum Tropfenzerfall, kann in Abhängigkeit der Weber-Zahl nach unterschiedlichen Zerfallsregimen unterschieden werden. Abbildung 3.6 stellt die in der Literatur angeführten Zerfallsmechanismen schematisch in Abhängigkeit der Weber-Zahl dar [58]. Beginnend mit einem einfachen Schwingungszerfall, bei dem durch eine Anregung der Oberfläche eine Schwingung entsteht, die ab einer kritischen Intensität den Tropfen in wenige kleinere Tropfen zerreißt, werden mit steigender Weber-Zahl die Aufbruchsmechanismen und die dabei entstehenden Tropfenspektren immer komplexer.



Abbildung 3.6: Tropfenaufbruchsregime in Abhängigkeit der Weber-Zahl [52, 53, 58].

Die Modellierung dieser Prozesse wird aufgrund der vorliegenden Komplexität des Zerfalls meist mit vereinfachten Modellvorstellungen durchgeführt. In der Literatur sind unterschiedlichste Modellierungsansätze zur Beschreibung des Sekundärzerfalls zu finden [52,53], die hier nicht im Detail diskutiert werden. Ein weit verbreitetes Modell, welches auch im Rahmen dieser Arbeit Anwendung findet, ist das WAVE Modell nach [59]. Das Modell basiert auf Oberflächenschwingungen, welche durch die aerodynamischen Kräfte verursacht werden und Störungen der Tropfenoberfläche verursachen, bis es zum Zerfall des Tropfens kommt. Das Modell beschreibt dabei nach Gleichung 3.17 einen stabilen Tropfenradius r nach dem Zerfall, der von der Wellenlänge der am schnellsten anwachsenden Störung  $\Lambda$  abhängt.  $B_0$  stellt dabei eine Modellkonstante dar, die meistens mit einem Wert von  $B_0 = 0, 6$  angegeben wird. Zusätzlich berücksichtigt das Modell für niedrige Relativgeschwindigkeiten einen einmaligen Rayleigh-Zerfall, für den der stabile Tropfenradius nach Gleichung 3.18 in Abhängigkeit des Radius des Ausgangstropfens  $r_p$ , der Relativgeschwindigkeit  $v_{rel}$  und der maximalen Wachstumsrate  $\Omega$  definiert ist.

$$r = B_0 \cdot \Lambda \tag{3.17}$$

$$r = \min \begin{cases} \left(\frac{3\pi r_p^2 v_{rel}}{2\Omega}\right)^{0,33} \\ \left(\frac{3r_p^2 \Lambda}{4}\right)^{0,33} \end{cases}$$
(3.18)

März 2022
Die zeitliche Änderung des Radius des Ausgangstropfens  $r_p$  wird nach Gleichung 3.19 als Funktion der charakteristischen Zerfallszeit  $\tau$  definiert. Die charakteristische Zerfallszeit wird von Gleichung 3.20 beschrieben und beinhaltet eine Modellkonstante  $B_1$  die zur Anpassung der Zerfallszeit genutzt werden kann.

$$\frac{dr_p}{dt} = -\frac{(r_p - r)}{\tau} \tag{3.19}$$

$$\tau = \frac{3,726B_1r_p}{\Lambda\Omega} \tag{3.20}$$

Die Anpassung der Zerfallszeit wird im Rahmen der Simulation von Dieseleinspritzungen oft dazu verwendet, um das Modell auf experimentell bestimmte Eindringtiefen der flüssigen Phase abzustimmen. Bei der Implementierung des Modells, wie sie in dem in dieser Arbeit eingesetzten kommerziellen CFD Code durchgeführt wurde, ist zu beachten, dass sich die Anzahl der Tropfenpakete durch die Zerfallsprozesse nicht ändert. Prinzipiell besteht die Möglichkeit durch eine zusätzliche Funktion des Modells sogenannte "Child Parcels" beim Aufbruch zu generieren, die zusätzliche Tropfenpakete mit sehr kleinen Tropfen repräsentieren [54]. Diese Option kann besonders hilfreich sein, wenn in der Simulation zu wenig Kraftstoffdampf in Düsennähe generiert wird. Da in dieser Arbeit bereits eine Tropfengrößenverteilung, die auch eine signifikante Anzahl kleiner Tropfen enthält, initialisiert wird, wurde auf diese Zusatzfunktion verzichtet.

### 3.2.3 Verdampfung

Die Verdampfung des eingebrachten Dieselkraftstoffes stellt eine weitere wichtige Einflussgröße bei der Gemischbildung dar. Da die Einspritzung in der Nähe des oberen Totpunktes erfolgt, werden die Kraftstofftropfen einer hohen Brennraumtemperatur von mehreren Hundert Grad ausgesetzt. Die Tropfen heizen sich dabei schnell auf und beginnen zu verdampfen. Da Dieselkraftstoff ein Gemisch aus vielen verschiedenen chemischen Verbindungen mit unterschiedlichsten Siedetemperaturen repräsentiert, kommt es dabei zu einem Siedeverlauf, der zunächst von den leichter siedenden Komponenten dominiert wird [55]. Für die Simulation stellt diese Tatsache eine große Herausforderung dar, da nicht alle einzelnen Komponenten abgebildet werden können. Ein verbreiteter Ansatz ist deshalb die Wahl eines Ersatzkraftstoffes mit nur einer Komponente, dem die mittleren physikalischen Eigenschaften von Dieselkraftstoff aufgeprägt werden [54].

Für die Simulation des Verdampfungsprozesses dieses Ersatzkraftstoffes wird ein Modellansatz nach Dukowicz [60] eingesetzt. Dieser legt eine Reihe notwendiger Annahmen und Vereinfachungen zugrunde die im Folgenden ausgelistet sind [54]:

• Kugelsymmetrischer Tropfen

- Quasistationärer Gasfilm um den Tropfen
- Konstante Tropfentemperatur über den Tropfendurchmesser
- Konstante physikalische Eigenschaften des Mediums um den Tropfen
- Dampf-Flüssig-Gleichgewicht an der Tropfenoberfläche

Das Modell basiert auf einer Energiegleichung des Tropfens, welche nach Gleichung 3.21 definiert ist. Eine detaillierte Herleitung des konvektiven Wärmestroms  $\dot{Q}$ , des lokalen Dampfmassenstroms  $f_{VS}$  und des lokalen Wärmestroms an der Tropfenoberfläche  $q_s$  kann in [60] gefunden werden.

$$m_d c_{pd} \frac{T_d}{dt} = \dot{Q} (1 + L \frac{f_{VS}}{q_s}) \tag{3.21}$$

### 3.2.4 Turbulente Dispersion

Die Trajektorie der Tropfen wird zusätzlich zur Widerstandskraft in einer turbulenten Strömung durch die Interaktion mit den Wirbelstrukturen beeinflusst. Dabei kommt es zu einer zufälligen Ablenkung der Tropfen, wodurch die Dispersion im Spray erhöht wird. Eine Charakterisierung dieses Phänomens kann anhand der Stokes-Zahl St erfolgen, welche nach Gleichung 3.22 als Verhältnis der Relaxationszeit  $\tau_r$  der Tropfen und der Wirbellebensdauer  $t_e$  angegeben wird.

$$St = \frac{\tau_r}{t_e} \tag{3.22}$$

Die Relaxationszeit ist hierbei durch die Partikelbeschleunigung gegeben und lässt sich ausgehend von Gleichung 3.13 nach Gleichung 3.23 beschreiben. Die Wirbellebensdauer ergibt sich aus den integralen Skalen der Turbulenz und ist nach Gleichung 3.24 in Abhängigkeit der turbulenten kinetischen Energie K und der Dissipationsrate  $\epsilon$  definiert [53].

$$\tau_r = \frac{8}{3} \frac{\rho_l r_p}{\rho_g C_D |\vec{u} - \vec{v}|}$$
(3.23)

$$t_e = \frac{C_\mu^{3/4}}{\sqrt{2/3}} \cdot \frac{K}{\epsilon} \tag{3.24}$$

Die Auswirkung unterschiedlicher Stokes-Zahlen auf die Trajektorie der Tropfen ist in Abbildung 3.7 schematisch dargestellt. Niedrige Stokes-Zahlen führen dazu, dass die Tropfen der Wirbelstruktur folgen, wohingegen für hohe Stokes-Zahlen kaum eine Beeinflussung der Trajektorie der Tropfen zu beobachten ist. In der Simulation werden diese Effekte anhand eines Models nach Gosman und Ioannides [61] berücksichtigt. Dieser Ansatz basiert auf einer zufällig gewählten fluktuierenden Geschwindigkeit, welche der Gasgeschwindigkeit in Gleichung 3.13 hinzugefügt wird. Die einzelnen Komponenten dieser fluktuierenden Geschwindigkeit werden auf Basis der TKE mit Hilfe einer Gauß-Verteilung gewählt. Eine Aktualisierung der Geschwindigkeitskomponenten erfolgt nachdem entweder die Wirbellebensdauer oder die charakteristische Zeit, die ein Tropfen benötigt um den Wirbel zu passieren, abgelaufen ist.



Abbildung 3.7: Schematische Darstellung unterschiedlicher Tropfentrajektorien nach der Interaktion mit einem turbulenten Wirbel in Abhängigkeit der Stokes-Zahl [53].

Zusätzlich können die Trajektorien und auch die Tropfengrößen durch Kollision oder Koaleszenz der Tropfen beeinflusst werden. Da diese Phänomene aufgrund ihres hohen Modellierungsaufwands in dieser Arbeit nicht berücksichtigt wurden, wird hier nicht näher darauf eingegangen.

## 3.3 Berechnung der Zündung und der Verbrennung

Im Fall der DF-Verbrennung liegen, wie bereits diskutiert, sehr komplexe Randbedingungen für die Verbrennungsrechnung vor. Der Zündprozess ist dabei von einer Interaktion des Dieselkraftstoffes und des Brenngases geprägt, wodurch es zu einem von Dieselkraftstoff abweichenden Verhalten kommt. Des Weiteren treten bei der Verbrennung unterschiedlichste Regime auf, die von der vorgemischten Verbrennung bis zur Diffusionsverbrennung reichen. Im Folgenden werden die zugrunde liegenden Prozesse erläutert und die in dieser Arbeit verwendeten Modellierungsansätze dargelegt.

### 3.3.1 Charakteristik turbulenter Verbrennungsprozesse

Die turbulente Verbrennung zeigt sich als eine Interaktion der laminaren Flamme mit der turbulenten Strömung. Die Phänomenologie der laminaren Flammenfront ist in Abbildung 3.8 anhand der Verläufe der Temperatur und der bei der Reaktion beteiligten Spezies für den Fall der vorgemischten Verbrennung dargestellt. In der Vorwärmezone werden die Edukte der Verbrennungsreaktion auf Zündtemperatur aufgeheizt, bevor sie an der chemischen Reaktion in der Reaktionszone teilnehmen. In der Reaktionszone laufen die radikalischen Kettenreaktionen ab, die den Verbrennungsprozess am Laufen halten. In der Nachoxidationszone erfolgt dann die weitere Oxidation von CO zu  $CO_2$ , wobei die maximale Temperatur in der Flammenfront erreicht wird [62, 63].



Abbildung 3.8: Schematische Darstellung der Verläufe der Spezieskonzentrationen und der Temperatur über die Zonen einer laminaren Flamme nach [63].

Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der laminaren Flamme im Kraftstoff-Luft-Gemisch wird dabei als laminare Flammengeschwindigkeit  $s_L$  bezeichnet. Die Abhängigkeit der laminaren Flammengeschwindigkeit von dem Äquivalenzverhältnis und der Temperatur ist in Abbildung 2.4 illustriert. Durch Interaktion der laminaren Flammenfront mit den Wirbelstrukturen der turbulenten Strömung kommt es zu einer Faltung der Flammenfront, wie in Abbildung 3.9 schematisch dargestellt ist.



Abbildung 3.9: Schematische Darstellung der Faltung einer vorgemischten Flamme in einer turbulenten Strömung [64].

Durch diese Faltung vergrößert sich die Oberfläche der Flammenfront im Vergleich zur laminaren Flammenfront. Die turbulente Flammengeschwindigkeit fällt aus diesem Grund deutlich höher aus und kann nach Gleichung 3.25 als Erhöhung der laminaren Flammengeschwindigkeit  $s_L$  um einen Faktor aus dem Verhältnis der Oberflächen der gefalteten laminaren  $A_L$  und der vereinfachten ungefalteten turbulenten Flamme  $A_T$  definiert werden [64].

$$s_T = s_L \cdot \frac{A_L}{A_T} \tag{3.25}$$

Eine Möglichkeit die Art der Interaktion der Flammenfront mit der turbulenten Strömung zu charakterisieren wird durch die Auftragung im Regimediagramm nach Peters [65] gegeben. Abbildung 3.10 zeigt die unterschiedlichen Verbrennungsregime im Borghi-Peters-Diagramm, in welchem das Verhältnis der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit u' und der laminaren Flammengeschwindigkeit  $s_L$  über dem Verhältnis der integralen Längenskala  $L_x$ , welche die charakteristische Größe der energiereichsten Wirbelklasse beschreibt, und der laminaren Flammenfrontdicke  $\delta_L$  aufgetragen ist. In der linken unteren Ecke des Diagramms werden die turbulenten von den laminaren Flammen durch eine Isolinie der turbulenten Reynolds-Zahl  $Re_T = 1$ , definiert nach Gleichung 3.26, abgetrennt. Der Bereich der turbulenten Flammen wird durch Isolinien der Damköhler-Zahl Da und der Karlovitz-Zahl Ka unterteilt, welche nach Gleichung 3.27 und 3.28 beschrieben werden. Die Damköhler-Zahl liefert einen Indikator für den Einfluss der turbulenten Strömung auf die in der Flamme ablaufenden chemischen Prozesse und kann als Verhältnis der turbulenten Zeitskalen  $\tau_T$  und den Zeitskalen der Flamme  $\tau_L$  verstanden werden. Die Karlovitz-Zahl beschreibt die Interaktion der Flamme mit den kleinsten in der Strömung vorkommenden Wirbelstrukturen, den Kolmogorovskalen, welche in Gleichung 3.28 in Form der Kolmogorov-Längenskala  $\eta$  auftreten.

$$Re_T = \frac{u' \cdot L_x}{s_L \cdot \delta_L} \tag{3.26}$$

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_L} = \frac{s_L \cdot L_x}{u' \cdot \delta_L} \tag{3.27}$$

$$Ka = \frac{\tau_L}{\tau_K} = \frac{\delta_L^2}{\eta^2} \tag{3.28}$$

Im unteren Bereich des Diagramms ist das Regime der "wrinkled flamelets" angesiedelt, in dem die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit u' kleiner ist als die laminare Flammengeschwindigkeit  $s_L$ . Es liegt hier zwar eine turbulente Strömung vor, die Wirbelstrukturen sind dabei aber nicht in der Lage die Flammenstruktur signifikant zu beeinflussen und die laminare Flammengeschwindigkeit bleibt die ausschlaggebende Größe für den Flammenfortschritt. Die Flammenausbreitung wird durch die laminare Flammengeschwindigkeit bestimmt. Eine weitere wichtige Regimegrenze verläuft entlang der Isolinie Ka = 1. Für

Ka < 1 können die Wirbelstrukturen nicht in die Flammenfront eindringen und es erfolgt keine Beeinflussung der in der Flamme ablaufenden Prozesse. Übersteigt die Karlovitz-Zahl einen Wert von eins, sind kleinste Wirbel in der Lage in die Flammenfront einzudringen wodurch die Transportvorgänge in der Flamme beeinflusst werden. Dabei sind die kleinsten Wirbel immer noch zu groß um in die innere Reaktionszone, die normalerweise ein Zehntel der Flammenfrontdicke ausmacht, einzudringen. Dieses Regime wird nach Peters [63] als "thin reaction zones" bezeichnet und ist durch Ka > 1 &  $Ka_{\delta} < 1$  begrenzt.  $Ka_{\delta}$  stellt eine weitere Karlovitz-Zahl da, die sich anstatt auf die Flammenfrontdicke auf die dicke der inneren Reaktionszone bezieht. Im Bereich  $Ka_{\delta} > 1$  beginnen die kleinsten Wirbel in die innere Reaktionszone vorzudringen und führen dort zu einem erhöhten Wärme- und Stofftransport, wodurch der Ablauf der chemischen Reaktionen beeinflusst wird. Sinken die lokalen Temperaturen und die Radikalkonzentrationen dabei stark ab, kann es zu einem Erliegen der ablaufenden Reaktionen kommen, welches ein partielles Verlöschen der Flamme zu Folge hat. Dieser Vorgang wird auch als Turbulenz-Chemie-Interaktion (TCI) bezeichnet. Eine weitere Unterteilung im Regimediagramm kann anhand der Damköhler-Zahl Da = 1durchgeführt werden. Im Bereich  $Da \ll 1$  sind die Zeitskalen der Turbulenz deutlich geringer als die chemischen Zeitskalen, wodurch hier die Reaktionsgeschwindigkeit die dominierende Größe wird. Für Da >> 1 zeigt sich eine deutlich höhere Reaktionsgeschwindigkeit, wobei die chemischen Zeitskalen deutlich geringer werden als die Zeitskalen der Turbulenz. In diesem Fall wird der Prozess durch die turbulenten Mischungsvorgänge bestimmt [63].



Abbildung 3.10: Darstellung der turbulenten Verbrennungsregime im Borghi-Peters-Diagramm.

Die Analyse der Verbrennung im Regimediagramm ermöglicht eine Charakterisierung der vorliegenden Flammenstrukturen und gibt Aufschluss über die für die Modellierung zu berücksichtigenden Wechselwirkungen der Flammenfront mit der turbulenten Strömung. Im Bereich der motorischen Verbrennung wurde diese Methode bereits von zahlreichen Autoren angewendet, wie folgenden Quellen zu entnehmen ist [66–69]. Da sich diese Untersuchung auf die vorgemischte homogene Ottoverbrennung beschränken, wird in dieser Arbeit in Kapitel 7 eine Methodik dargelegt, um die Analyse für die DF-Verbrennung durchzuführen, welche eine Reihe von Inhomogenitäten im Bereich des Äquivalenzverhältnisses und der Gemischbildung aufweist.

Im Fall nicht vorgemischter Flammen, müssen Brennstoff und Oxidationsmittel zunächst miteinander gemischt werden, bevor die Verbrennungsreaktionen ablaufen können. Abbildung 3.11 zeigt das Erscheinungsbild einer turbulenten Diffusionsflamme.



Abbildung 3.11: Schematische Darstellung einer turbulenten Diffusionsflamme [63].

Die Flammenfront bildet sich in dem Bereich des stöchiometrischen Mischungsbruches  $Z_{St}$  aus, wobei hier die höchsten Temperaturen in der Flamme vorliegen. Die Lage der Flammenfront wird durch die Diffusionsvorgänge der Edukte bestimmt, wodurch sich kein Flammenfortschritt ergibt, wie er bei vorgemischten Flammen zu beobachten ist. Die chemischen Vorgänge unterliegen im nicht vorgemischten Fall einer höheren Komplexität, da das gesamte Spektrum von magerer und fetter Verbrennung berücksichtigt werden muss. Meist sind jedoch die Diffusionsvorgänge die geschwindigkeitsbestimmenden Schritte, wodurch unter Annahme sehr schneller Chemie eine vereinfachte Beschreibung der Verbrennung aus Basis der Mischungsvorgänge möglich ist. Diffusionsflammen leuchten meist gelblich, da es in den Zonen mit fetteren Gemischen zur Bildung von glühenden Rußpartikeln kommt [42,63,64]. Im Falle der DF-Verbrennung kommt es während der Umsetzung des Pilotkraftstoffes zur Diffusionsverbrennung. Dabei ist jedoch die Menge des eingespritzten Kraftstoffes und der Einspritzzeitpunkt ausschlaggebend, da hierdurch die Menge des bei der Zündung bereits vorgemischten Kraftstoffes bestimmt wird.

#### 3.3.2 Detaillierte Reaktionschemie

Die detaillierte Reaktionschemie ermöglicht, unter der Voraussetzung eines idealen Rührkessels, eine exakte Berechnung der bei der Zündung und bei der Verbrennung ablaufenden chemischen Vorgänge. Hierzu werden Reaktionsmechanismen eingesetzt, welche aus einem System von Elementarreaktionen bestehen. Die Reaktionsgeschwindigkeiten werden dabei auf Basis der Konzentrationen der Reaktanden und der Geschwindigkeitskoeffizienten berechnet. Die Geschwindigkeitskoeffizienten werden anhand der Arrhenius-Funktion nach Gleichung 3.29 definiert. Die Werte des präexponetiellen Faktors A, des Exponenten b und der Aktivierungsenergie  $E_a$  werden für jede Elementarreaktion im Mechanismus tabelliert.

$$k = A_s \cdot T^b \cdot \exp(\frac{-E_a}{RT}) \tag{3.29}$$

Die Anzahl der Elementarreaktionen ist dabei stark von dem zugrundeliegenden Kraftstoff abhängig. Für die einfache Knallgasreaktion von Wasserstoff und Sauerstoff werden bereits 40 Elementarreaktionen benötigt. Für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen fällt die Anzahl der Reaktionen weit höher aus und befindet sich oft im Bereich mehrerer Hundert oder Tausend Reaktionen. Die Problematik kann anhand von Abbildung 3.12, welche eine Flussanalyse der Methanoxidation  $(CH_4)$  für eine stöchiometrische und eine fette Mischung zeigt, dargelegt werden. Im Fall des fetten Gemisches (Abbildung 3.12(b)) werden größere Mengen Ethan  $(C_2H_6)$  gebildet, wodurch ein Reaktionsmechanismus zur umfassenden Beschreibung der Methanoxidation ebenso die Reaktionen des Ethans berücksichtigen muss [64].



Abbildung 3.12: Flussanalyse der Methanoxidation bei einem Umgebungsdruck von 1 bar und einer Umgebungstemperatur von 25 °C im Falle eines stöchiometrischen (a) und eines fetten Gemisches (b) [64].

Da Dieselkraftstoff aus einer Vielzahl unterschiedlichster Kohlenwasserstoffe besteht, muss für die reaktionskinetische Berechnung ein Ersatzkraftstoff definiert werden. Zumeist wird n-Heptan als Ersatzkraftstoff eingesetzt, da das Zündverhalten eine hohe Ähnlichkeit aufweist und für n-Heptan einige Reaktionsmechanismen zur Verfügung stehen [20, 27, 30, 53]. Im Bezug auf die DF-Verbrennung muss für Erdgas ebenso ein Ersatzkraftstoff gewählt werden. Hierbei eignet sich ein Mischung aus Methan und Propan, welche die gleiche MZ aufweist wie das im Experiment verwendete Erdgas. Die MZ beschreibt analog zur Oktanzahl die Klopffestigkeit des Kraftstoffgemisches. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Reaktionsmechanismus eingesetzt, welcher speziell für die DF-Verbrennung optimiert wurde und eine Gesamtzahl von 301 Reaktionen und 64 Spezies berücksichtigt. Der Mechanismus umfasst die Reaktionschemie der Gasmischungen aus Methan und Propan, sowie die des n-Heptans. Eine detaillierte Beschreibung dieses Mechanismus und des Optimierungsvorganges, bei dem die Arrheniusparameter ausgewählter Reaktionen adaptiert wurden, ist in [70] zu finden. Die im Rahmen dieser Arbeit in den Kapiteln 4 und 5 durchgeführten CFD Simulationen trugen dabei zur Optimierung bei und dienten unter anderem zur Validierung des Reaktionsmechanismus.

Die Implementierung der Reaktionschemie im kommerziellen CFD Code folgt dem in Abbildung 3.13 dargestellten Schema. Zu Beginn eines jeden Zeitschritts erfolgt eine Lösung

März 2022

eines 0D-Reaktormodells für jede Zelle, wodurch sich die Quellterme für die Speziestransportgleichungen und die Energiegleichung ergeben. Dieses Vorgehen führt zu einem hohen Berechnungsaufwand, aufgrund der Lösung der Reaktormodelle und der zusätzlichen Transportgleichungen für jede einzelne Komponente. Der Aufwand für die Berechnung der Reaktormodelle lässt sich durch den Einsatz eines sogenannten "Multizone" Modells verringern. Dieses Modell basiert auf der Zusammenfassung der Zellen mit ähnlichen Zusammensetzungen und Eigenschaften. Somit muss das Reaktormodell nur für das Zellcluster gelöst werden und nicht für jede einzelne Zelle [71].



Abbildung 3.13: Schema der Integration der Reaktionschemie in den Berechnungsablauf im CFD Code [71].

### 3.3.3 Verbrennungsmodell

Der Einsatz der detaillierten Reaktionschemie zur Beschreibung der vorgemischten Gasverbrennung gestaltet sich im vorliegenden Anwendungsfall als schwer umsetzbar. Da mittels der Reaktionschemie Reaktormodelle in jeder einzelnen Zell gelöst werden, erfordert eine physikalisch korrekte Berechnung der Flammenausbreitung eine ausreichend genaue Auflösung der Flammenfront. Das vorliegende DF-Brennverfahren zeichnet sich durch hohe Brennraumdrücke und Brennraumtemperaturen aus, wodurch die Flammenfrontdicke im Bereich von wenigen Hundert Mikrometern liegt [22]. In der vorliegenden Arbeit wurde deshalb zur Berechnung der Flammenausbreitung im Forschungsmotor von dem Ansatz der direkten Integration der Reaktionschemie abgewichen.

Der Einsatz eines Verbrennungsmodells ermöglicht eine ausreichend genaue Bestimmung des Flammenfortschritts und der Wärmefreisetzung, wobei der Rechenaufwand in einem handhabbaren Rahmen gehalten wird. Eine umfangreiche Bewertung der Prädiktivität etablierter Verbrennungsmodelle im Bereich der Simulation von Großmotoren wird von Lauer in [72] gegeben. Einen weit verbreiteten Vertreter dieser Modelle stellt das Extended Coherent Flame Model (ECFM) dar, welches auch für die Motorsimulation in dieser Arbeit Anwendung fand. Das Modell basiert auf einer Transportgleichung für die Flammenfrontdichte  $\Sigma$ , welche anhand von Gleichung 3.30 definiert ist. Die Flammenfrontdichte kann als Flammenfläche pro Volumenelement interpretiert werden. Die Terme  $P_1$ ,  $P_2$  und  $P_3$  auf der rechten Seite von Gleichung 3.30 beinhalten die Produktion der Flammenfrontdichte  $\Sigma$  durch turbulente Streckung, Ausbreitung der mittleren Strömung und thermische Ausdehnung. Der Term D repräsentiert eine Senke der Flammenfrontdichte. Zusätzlich zur Transportgleichung für die Flammenfrontdichte wird noch eine Transportgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable gelöst, welche in die Terme auf der rechten Seite von Gleichung 3.30 einfließt. Die Reaktionsfortschrittsvariable (RFV) weist im unverbrannten Gemisch einen Wert von 0 auf und steigt über die Flammenfront auf einen Wert von 1 im verbrannten Gemisch an, wohingegen die Flammenfrontdichte ihr Maximum in der Flammenfront hat und zu beiden Seiten abfällt [30]. Eine detaillierte Beschreibung des Modells kann [73] entnommen werden.

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u}_i \Sigma}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \frac{\mu_t}{Sc_t} + \frac{\mu}{Sc} \right) \frac{\partial \Sigma/\bar{\rho}}{\partial x_i} \right) = (P_1 + P_2 + P_3)\Sigma - D$$
(3.30)

Die Reaktionsrate des unverbrannten Kraftstoffes  $\dot{\omega}_{uF}$  kann grundlegend nach Gleichung 3.31, in Abhängigkeit der Dichte der unverbrannten Mischung  $\rho_u$ , des Kraftstoffmassenbruchs  $y_{uF}$ , der laminaren Flammengeschwindigkeit  $s_L$  und der Flammenfrontdichte  $\Sigma$  beschrieben werden [74].

$$\bar{\dot{\omega}}_{uf} = \rho_u \cdot y_{uf} \cdot \bar{s}_L \cdot \Sigma \tag{3.31}$$

### 3.3.4 Stickoxidbildung

Die Mechanismen der Stickoxidbildung wurden bereits in Kapitel 2 dargelegt. Für die CFD Simulation wird meist nur der Mechanismus der thermischen Stickoxidbildung nach Zeldovich berücksichtigt, da der Großteil der innermotorischen Stickoxidbildung darauf zurückzuführen ist. Es existieren zwar bereits Modelle, die ebenso die Bildung von promptem NO oder den Bildungspfad über Lachgas berücksichtigen, diese wurden jedoch in dieser Arbeit nicht berücksichtigt. Für die Simulation der Stickoxidbildung wird eine zusätzliche Transportgleichung für die NO-Konzentration eingeführt. Der Quellterm in dieser Transportgleichung wird mittels der Radikalkonzentrationen aus den Reaktionsgleichungen der thermischen NO-Bildung berechnet [30,75].

# 4 Ansatz zur Modellierung der Piloteinspritzung

In diesem Kapitel werden die Methodik und die Ergebnisse der Simulation der Piloteinspritzung dargelegt. Die Piloteinspritzung wurde im Rahmen des Forschungsprojektes Dual Flame (FFG Nr. 850690) am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) in Erlangen experimentell untersucht. Die Ergebnisse dieser Untersuchung dienten als Basis für die in dieser Arbeit durchgeführten CFD Simulationen.

# 4.1 Experimentelle Untersuchung der Strahlausbreitung

Die Vermessung der Einspritzstrahlen wurde mit Hilfe der optisch zugänglichen Verbrennungsbombe, welche in Abbildung 4.1 dargestellt ist, durchgeführt. Die Brennkammer ist mit einem Volumen von 10 L ausgeführt und wird kontinuierlich mit Luft oder Stickstoff durchströmt, wodurch eine hohe Messfrequenz unter inerten und reaktiven Bedingungen ermöglicht wird. Die Kammer kann über Heizelemente in den Einlasskanälen auf eine Temperatur von bis zu 1000 K aufgeheizt werden. Der Kammerdruck wird über ein Drosselventil auf bis zu 100 bar eingestellt. Die Strömungsgeschwindigkeiten, die sich dabei in der Kammer einstellen bewegen sich im Bereich von 30 mm/s, wodurch davon ausgegangen werden kann, dass es zu keiner Beeinflussung der Strahlausbreitung der Dieseleinspritzung kommt [76].



Abbildung 4.1: Verbrennungsbombe am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik in Erlangen [76].

Die Kammer ermöglicht eine optische Zugänglichkeit über Fenster aus Quarzglas von fünf Seiten aus. Am Boden der Kammer befindet sich die Aufnahme für den Kraftstoffinjektor, welche mit einer zusätzlichen Heizfunktion zur Temperierung der Injektorspitze ausgestattet ist. Der Injektor wird über ein Common Rail System mit einem Kraftstoffdruck von bis zu 2500 bar versorgt. Bei dem untersuchten Injektor handelt es sich um einen "Wide Range" Injektor mit einem Düsenlochdurchmesser von 280 µm und einer Düsenlochanzahl von sieben. Die Kraftstoffstrahlen bilden dabei einen Schirmwinkel von 145°. Die Betriebsbedingungen der durchgeführten Untersuchungen sind in Tabelle 4.1 aufgelistet. Für die Vermessungen wurde ein Referenzdieselkraftstoff (CEC RF-06-03) eingesetzt.

Druck [bar]	60-90
Temperatur $[^{\circ}C]$	550-700
Einspritzdruck [bar]	1000
Kraftstoffmasse [mg]	34-88
Kraftstofftemperatur [°C]	60

Tabelle 4.1: Randbedingungen der Messreihe in der Verbrennungsbombe.

Die Vermessung der flüssigen Phase des Kraftstoffsprays wurde mittels der Mie-Streulicht-Technik durchgeführt. Diese basiert auf der elastischen Lichtstreuung an der Oberfläche der Kraftstofftropfen. Die Beleuchtung des Sprays erfolgte dabei durch eine Blitzlampe, welche mit einer Hochgeschwindigkeitskamera synchronisiert war. Mit dieser Konfiguration wurden zu unterschiedlichen Zeitpunkten der Sprayausbreitung jeweils 32 Aufnahmen generiert, um eine statistische Signifikanz sicherzustellen. Die Dampfphase wurde mittels der Schieren-Technik vermessen, welche auf der Beugung gebündelter Lichtstrahlen an Dichtegradienten basiert. Die Aufnahmen wurden ebenso mit einer Hochgeschwindigkeitskamera mit einer Frequenz von 20 µs durchgeführt. Die Auswertung der Messdaten lieferte detaillierte Verläufe der Eindringtiefe und des Kegelwinkels des Sprays. Diesen Daten kommt für die Modellierung in der CFD insbesondere im ballistischen Betriebsbereich des Injektors eine hohe Bedeutung zu, da die Einspritzung eine sehr kurze Dauer und ein stark transientes Verhalten aufweist.

Die Zündung und die Verbrennung des Pilotstrahls wurde mit Hilfe der Visualisierung des Leuchtens des angeregten OH\*-Radikals durchgeführt. Das Signal ist bei einer Wellenlänge von 308 nm detektierbar und wird mittels eines Bandpassfilters und einem Lichtverstärker von einer Hochgeschwindigkeitskamera detektiert. Während des Zündverzuges bildet sich eine gewisse Menge zündfähiges Gemisch, welches bei der Zündung schnell unter hohem OH\*-Leuchten konvertiert wird. Aus diesem Grund eignet sich das OH\*-Signal zur Bestimmung des Zündzeitpunktes. Die Zündung wird dabei zu dem Zeitpunkt definiert, an dem in der Hälfte der durchgeführten Messungen OH\*-Signal detektierbar ist. Für eine detaillierte Beschreibung der Messtechnik und der Auswertemethodik sei auf [76–78] verwiesen.

# 4.2 Modellaufbau und Bestimmung der Randbedingungen der CFD Simulation

Die Simulation der Piloteinspritzung wurde für eine einzelne Spraykeule auf einem zylinderförmigen Rechennetz im kommerziellen CFD Code AVL FIRE<sup>TM</sup> durchgeführt. Eine Schnittdarstellung durch die Mittelachse des Rechennetzes ist in Abbildung 4.2 gegeben. Das Netz weist eine Länge von 120 mm und einen Durchmesser von 40 mm auf, wobei sichergestellt wurde, dass der Einspritzstrahl nicht durch die Randbedingungen beeinflusst wird. Die Randbedingungen sind als fixe Wände mit einer Wandtemperatur gleich der Kammertemperatur ausgeführt. Einzig die Randbedingung gegenüber der Düse ist als nicht-reflektierender Auslass definiert.



Abbildung 4.2: Schnittdarstellung des Rechennetzes der Spraybox.

Des Weiteren sind in dem Rechennetz drei unterschiedliche Verfeinerungen integriert, deren Abmessungen in Tabelle 4.2 dargelegt sind. Die kleinsten Zellen mit 125 µm Kantenlänge sind in der Nähe der Düsenspitze platziert, um eine ausreichende Auflösung der steilen Gradienten am Strahlaustritt zu gewährleisten. Stromab der Düse steigen die Zellgrößen dann stufenweise auf die Basisgröße von 1 mm an. Die Form der Verfeinerungen ist dabei konisch angelehnt an die Strahlausbreitung in radialer Richtung gewählt worden. Die gewählte Netzstruktur resultiert dabei in einer Gesamtzahl von 700.000 Zellen.

Netzverfeinerung	L [mm]	R1 [mm]	R2 [mm]	Zellgröße [µm]
1	80	5	10	500
2	50	3	5	250
3	20	2	3	125

Tabelle 4.2: Abmessungen der Netzverfeinerungen in der Spraybox.

Aufgrund der Kombination von sehr kleinen Zellen in der Nähe der Düse und den hohen Einspritzgeschwindigkeiten, welche bei der Hochdruckeinspritzung auftreten, wird ein sehr kleiner Zeitschritt erforderlich, um eine ausreichende numerische Stabilität zu garantieren. Für die RANS Simulationen wurde der Zeitschritt während der Einspritzung auf 1 µs festgesetzt und danach auf 2,5 us erhöht. Für die LES Rechnung wurde der Zeitschritt auf 0,5 us abgesenkt, da hier die Anforderungen an die numerische Genauigkeit höher sind. Die räumlichen Diskretisierungsverfahren wurden in beiden Fällen auf zweite Ordnung gesetzt, um auch hier eine ausreichende Genauigkeit zu garantieren. Für die LES Simulation wurde die zeitliche Diskretisierung von einem Verfahren erster Ordnung auf zweite Ordnung erhöht. Die Wahl der Randbedingungen der Einspritzung gestalten sich im Falle der DF-Verbrennung äußerst komplex, da der Injektor durch die geringen Dieselmengen hauptsächlich im ballistischen Betriebsbereich arbeitet. Hierbei erreicht die Injektornadel aufgrund einer sehr kurzen Ansteuerdauer teilweise nicht den maximalen Hub und folgt damit einer ballistischen Flugbahn. Dies führt zu einer starken Beeinflussung der Düseninnenströmung und somit auch der Randbedingungen am Düsenaustritt. Für die Simulation ergibt sich dadurch die Notwendigkeit stark transiente Massenstrom- und Geschwindigkeitsverläufe am Düsenaustritt vorzugeben. Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Methodik angewendet, welche diese Verläufe auf Basis der Schlieren-Messdaten ableitet. Die Methodik basiert dabei auf den Untersuchungen in [78–81] und legt eine Impulserhaltung entlang der Strahlachse zugrunde. Der Impulsstrom am Düsenauslass, definiert nach Gleichung 4.1, kann somit dem Impulsstrom an einer beliebigen Position x auf der Strahlachse stromab der Düse, definiert nach Gleichung 4.2, gleichgesetzt werden. Abbildung 4.3a zeigt hierzu schematisch den Verlauf des Impulses entlang der Strahlachse. Daraus lässt sich ein Ausdruck für die initiale Geschwindigkeit des Dieselkraftstoffes am Düsenauslass  $v_0$  nach Gleichung 4.3 auf Basis der experimentell bestimmten Eindringtiefe x und des Kegelwinkels  $\alpha$  des Strahls herleiten.

$$\dot{M} = \rho_l A_n v_0^2 \tag{4.1}$$

$$\dot{M}(x) = \rho_g v^2 \pi x^2 \tan^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \tag{4.2}$$

$$v_0 = \frac{x^2}{t} \cdot \tan(\frac{\alpha}{2}) \cdot \sqrt{\frac{\rho_g}{\rho_l \cdot d_n^2}}$$
(4.3)

Hierbei beschreibt  $\alpha$  den theoretischen Öffnungswinkel eines konischen Strahls, welcher nach Naber und Siebers [80] von dem experimentell bestimmten Kegelwinkel  $\Theta$  aufgrund der realen Form des Sprays abweicht. Aus diesem Grund wird ein Korrekturfaktor *a* nach Gleichung 4.4 eingeführt, dessen Wert von Naber und Siebers [80] mit 0,66 bestimmt wurde. Zusätzlich wird die Gasdichte  $\rho_g$  durch die Mischdichte  $\rho_M$  ersetzt, da sich der Strahl aus einem Kraftstoff-Luft-Gemisch zusammensetzt. Des Weiteren wird der Kontraktionsbeiwert  $C_A$  eingeführt, welcher die Einschnürung des Strahls im Düsenloch durch Kavitationsblasen und Reibungsvorgänge berücksichtigt [30], um schließlich Gleichung 4.5 zu erhalten.

$$\tan(\alpha) = a \cdot \tan(\Theta) \tag{4.4}$$

$$v_0 = \frac{x^2}{t} \cdot a \tan(\frac{\Theta}{2}) \cdot \sqrt{\frac{\rho_M}{\rho_l d^2 \sqrt{C_A}}}$$
(4.5)

Für  $C_A$  wird meist ein Wert von 0,9 angenommen [30], womit sich in Kombination mit dem experimentell bestimmten Kegelwinkel und der Eindringtiefe der Dampfphase die initiale Geschwindigkeit am Düsenaustritt berechnen lässt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 4.3b als Funktion der Zeit nach Einspritzbeginn (Start of Injection) (SOI) für die einzelnen Messungen und für den Mittelwert aller Messungen dargestellt.



Abbildung 4.3: (a) Schematische Darstellung des Impulsstroms entlang der Strahlachse; (b) Aus den Schlierendaten berechnete Geschwindigkeitsverläufe.

Die maximale Einspritzgeschwindigkeit liegt im Mittel bei ca. 380 m/s und kann im Folgenden zur Bestimmung des Geschwindigkeitsbeiwertes  $C_v$ , welcher nach Gleichung 4.6 als Verhältnis der tatsächlichen Einspritzgeschwindigkeit  $v_0$  und der nach der Bernoulligleichung theoretisch möglichen Einspritzgeschwindigkeit  $v_{Bern}$  definiert ist. Das Produkt des Geschwindigkeitsbeiwertes  $C_v$  und des Kontraktionsbeiwertes  $C_A$  liefert den Durchflussbeiwert  $C_d$  der Düse. Mit diesem lässt sich der maximale Massenstrom  $\dot{m}_l$  nach Gleichung 4.7 für ein gegebenes Druckverhältnis  $\Delta p$  über die Düse bestimmen.

$$C_v = \frac{v_0}{v_{Bern}} \le 1 \tag{4.6}$$

$$\dot{m}_l = C_d A_n \sqrt{2\rho_l \Delta p} \tag{4.7}$$

Der Einspritzratenverlauf kann mittels des nach Gleichung 4.7 berechneten maximalen Massenstroms und den aus einer Einspritzratenmessung abgeleiteten Steigungen der Flanken während des Öffnens und des Schließens des Injektors, illustriert in Abbildung 4.4a, abgeleitet werden. Diese Methodik erlaubt eine Ableitung des Einspritzratenverlaufs für unterschiedliche Einspritzbedingungen. Abbildung 4.4b zeigt beispielsweise die für zwei unterschiedliche Ansteuerdauern des Injektors hergeleiteten Einspritzratenverläufe.



Abbildung 4.4: (a) Ableitung der Steigungen der Flanken aus einem gemessenen Einspritzverlauf; (b) Berechnete Einspritzverläufe für die untersuchten Betriebspunkte.

Zusätzlich zu den Profilen der Einspritzrate und der initialen Geschwindigkeit erfordert die Simulation noch eine geeignete Wahl der initialen Tropfengrößen. Wie bereits dargelegt, wurde in dieser Arbeit von dem klassischen Ansatz der "Blob Injection" abgewichen. Die "Blob Injection" basiert auf der Initialisierung von Tropfen in der Größenordnung des Düsendurchmessers, die nachfolgend schnell aufgebrochen werden, um ein feines Spray zu generieren. Die Interaktion der Tropfen mit der Gasströmung in Düsennähe wird somit nur unzureichend erfasst, da durch experimentelle Untersuchungen von einem feinen Spray bereits kurz nach dem Düsenaustritt ausgegangen werden kann [30]. Da diese Interaktion jedoch gerade im ballistischen Betriebsbereich des Injektors aufgrund stark transienter Randbedingungen am Düsenaustritt eine hohe Bedeutung zukommt, wurde eine initiale Trop-

März 2022

fengrößenverteilung gewählt, um den Impulsaustausch und das Aufheizen des Kraftstoffes im Düsennahbereich besser abzubilden. Dabei wurde auf eine Rosin-Rammler-Verteilung mit einem Sauterdurchmesser (Sauter Mean Diameter) (SMD) von 20 µm zurückgegriffen, da das Dieselspray bereits kurz nach dem Düsenaustritt als sehr fein charakterisiert werden kann. Die implementierte Verteilung ist in Abbildung 4.5 dargestellt. Zusätzlich zu den bereits beschriebenen Randbedingungen wurde der experimentell bestimmte Kegelwinkel des Strahls als Eingangsgröße vorgegeben.



Abbildung 4.5: Initiale Tropfengrößenverteilung.

## 4.3 Ergebnisse der Einspritzsimulation

Die Einspritzsimulationen wurden nach Tabelle 4.1 für unterschiedliche Kammerbedingungen durchgeführt, um den Einfluss von Druck und Temperatur auf die Sprayausbreitung im ballistischen Bereich zu untersuchen. Um einen sinnvollen Abgleich der Simulationen mit den Messdaten zu ermöglichen, wurden geeignete Auswertekriterien definiert. In der Simulation wird die Eindringtiefe der Flüssigphase dabei als Abstand zwischen dem Düsenaustritt und dem Punkt, hinter dem 99% der Kraftstoffmasse ausgemacht werden können, angesehen. Diese wird in der Messung dem am weitesten entfernten Punkt gegenübergestellt, an dem in 50% der Messungen Mie-Signal detektiert wurde. Die Eindringtiefe der Dampfphase wird in der Simulation durch die am weitesten entfernten Zellen mit einem Kraftstoffmassenbruch von 0,001 kg/kg definiert. Im Experiment einspricht die Eindringtiefe der Dampfphase dem Punkt an dem in 50% der Messungen ein Schlieren-Signal detektiert wurde.

Abbildung 4.6a zeigt einen Abgleich der simulierten und gemessenen Eindringtiefen für einen Kammerdruck von 60 bar und eine Kammertemperatur von 550 °C. Zusätzlich sind die Konturen des Sprays anhand der Schlieren-Signalintensität und des Kraftstoffmassenbruchs bei 500 µs und bei 900 µs nach SOI dargestellt. Die Darstellung des Schlieren-Signals beschränkt sich dabei auf den vorderen Bereichs des Sprays, da der Bereich nahe der Düse

aufgrund des Messaufbaus nicht detektiert werden konnte. Die simulierten Eindringtiefen der Flüssigphase und er Dampfphase stimmen sehr gut mit den gemessenen Werten bei den vorliegenden thermodynamischen Randbedingungen überein. Der Anstieg der Eindringtiefe in der ersten Phase der Einspritzung wird dabei vom Modell korrekt wiedergegeben. Dabei wird die Eindringtiefe stark durch den transienten Impulsstrom am Düsenaustritt beeinflusst, welcher mittels der bereits vorgestellten Methodik zur Wahl der Randbedingungen ausreichend genau erfasst wurde. Nach einer gewissen Zeit flacht die Eindringtiefe der Dampfphase ab, wobei der Verlauf der Eindringtiefe grundlegend einer Wurzelfunktion folgt. Dieses Verhalten ist durch eine Aufweitung des Strahls in radiale Richtung und der damit einhergehenden Verbreiterung des Impulsstromes zu erklären. Ein Vergleich der Spraykonturen legt nahe, dass der Effekt der Strahlaufweitung vom Modell korrekt erfasst wird.



Abbildung 4.6: Gemessene und simulierte Eindringtiefe der Dampf- und Flüssigphase mit zugehörigen Spraykonturen für einen Kammerdruck von 60 bar und eine Kammertemperatur von (a) 550 °C und (b) 650 °C.

Der Verlauf der Eindringtiefe der Flüssigphase zeigt nach Ende der Einspritzung einen rapiden Abfall, der sich durch einen deutlich niedrigeren initialen Impuls der Tropfen kurz vor dem Schließen des Injektors und eine schnelle Verdampfung durch die relativ hohe Umgebungstemperatur erklären lässt. Hierbei zeigt sich der Vorteil der initialen Tropfengrößenverteilung, da keine großen Tropfen initialisiert werden, die nur langsam aufbrechen und verdampfen. Somit ist das Modell in der Lage dieses Verhalten korrekt wiederzugeben.

Der korrekten Beschreibung des Verdampfungsverhaltens kommt bei der Simulation der Gemischbildung eine wichtige Rolle zu. Das Verdampfungsverhalten hängt zum einen von den physikalischen Eigenschaften des Kraftstoffes und zum anderen von den Umgebungsbedingungen ab. Abbildung 4.6b zeigt die Charakteristik des Sprays für eine um 100 °C

gesteigerte Kammertemperatur. Die Messwerte zeigen hier einen deutlichen Rückgang der Eindringtiefe der Flüssigphase, der durch eine höhere Verdampfungsrate bedingt ist. Dieses Phänomen wird von der Simulation qualitativ korrekt wiedergegeben, quantitativ fällt der Rückgang der Eindringtiefe in der Simulation jedoch etwas zu gering aus. Dies deutet auf eine Unterschätzung der Einmischung heißen Umgebungsgases in das Spray und somit auf eine geringere Verdampfungsrate in der Simulation hin.

Einen weiteren wichtigen Faktor, der die Strahlausbreitung maßgeblich beeinflusst, stellt der Umgebungsdruck dar. Abbildung 4.7 zeigt hierzu die Eindringtiefen eines Sprays bei einem Kammerdruck von 90 bar und einer Kammertemperatur von 650 °C. Hierbei zeigt sowohl die Eindringtiefe der Flüssigphase als auch die Eindringtiefe der Dampfphase einen deutlichen Rückgang. Der gesteigerte Kammerdruck hat eine höhere Gasdichte zur Folge, die zu einer Einmischung einer größeren Masse heißer Luft in den Strahl führt. Gleichung 4.8 beschreibt dieses Verhalten, wobei das Verhältnis des eingesaugten Luftmassenstroms  $\dot{m}_a(x)$  und dem Kraftstoffmassenstrom  $\dot{m}_f$  proportional zu der Wurzel des Verhältnisses der Dichten ist [78].



Abbildung 4.7: Gemessene und simulierte Eindringtiefe der Dampf- und Flüssigphase mit zugehörigen Spraykonturen für einen Kammerdruck von 90 bar und eine Kammertemperatur von 650 °C.

Der deutlich höhere Anteil an heißer Luft in der Spraykeule führt zu einer Beschleunigung der Verdampfung der Flüssigphase und somit zu einer Reduktion der Eindringtiefe. Dieses Verhalten wird vom Simulationsmodell nur unzureichend erfasst. Es ist zwar auch in der Simulation ein Rückgang der Eindringtiefe feststellbar, dieser fällt jedoch deutlich geringer aus als experimentell beobachtet. Eine mögliche Ursache für dieses Verhalten ist eine Unterschätzung der Einmischung der heißen Luft in den Strahl, welche maßgeblich durch den Impulsaustausch zwischen Lagrangephase und Gasströmung geprägt ist. Hierbei muss betont werden, dass der Lagrangeansatz in Düsennähe eine starke Vereinfachung darstellt und somit gewisse Ungenauigkeiten bei der Beschreibung des Sprays in Düsennähe mit sich bringt. Des Weiteren spielt die vom Strahl generierte Turbulenz eine wichtige Rolle bei der Einmischung heißer Luft in den Strahl. Da das hier eingesetzte RANS Modell ebenso eine gewisse Vereinfachung bei der Beschreibung der Ausprägung der Turbulenz im Strahlbereich darstellt, liegt hier eine weitere mögliche Fehlerquelle bei der Berechnung der Gaseinmischung und des Abtransportes des verdampften Kraftstoffes vor.

$$\frac{\dot{m}_a(x)}{\dot{m}_f} \propto \sqrt{\frac{\rho_a}{\rho_f}} \cdot \frac{\tan\frac{\Theta}{2}}{d} \cdot x \tag{4.8}$$

Der Einfluss des Kammerdruckes und der Kammertemperatur auf die Eindringtiefe der Dampfphase ist abschließend in Abbildung 4.8 zusammengefasst. Abbildung 4.8a illustriert die gemessene und die simulierte Dampfeindringtiefe für einen Kammerdruck von 60 bar und 90 bar bei gleichbleibender Kammertemperatur. Der deutliche Rückgang der Eindringtiefe wird vom Modell korrekt wiedergegeben und lässt sich durch den Anstieg der Dichte von 22,2 kg/m<sup>3</sup> auf 33,0 kg/m<sup>3</sup> erklären. In Abbildung 4.8b ist für eine Steigerung der Kammertemperatur um 100 °C kaum ein Einfluss auf die Eindringtiefe der Dampfphase feststellbar. Da die Dichte hierbei jedoch nur von 24,9 kg/m<sup>3</sup> auf 22,2 kg/m<sup>3</sup> absinkt, erscheint diese Beobachtung plausibel zu sein.



Abbildung 4.8: Gemessene und simulierte Eindringtiefe der Dampfphase in Abhängigkeit des Kammerdruckes (a) und der Kammertemperatur (b).

Zusätzlich zu dem Einfluss der Kammerbedingung auf die Eindringtiefe des Sprays wurde der Einfluss der Einspritzrate auf die Ausbreitung der Dampfphase untersucht. Abbildung 4.9a zeigt die beiden untersuchten Einspritzratenverläufe, wobei Profil 2 eine höhere maximale Einspritzrate und einen längeren Einspritzverlauf aufweist. Die zugehörigen Eindringtiefen sind in Abbildung 4.9b dargestellt, wobei der Verlauf der Eindringtiefen von der Simulation korrekt wiedergegeben wird. Profil 2 zeigt dabei nach dem ersten Anstieg aufgrund des höheren initialen Impulses der Kraftstofftropfen eine deutlich schnellere Strahlausbreitung. Dies führt zu einem größeren Bereich im Brennraum, der von dem Strahl erfasst wird und somit zu einem größeren Zündbereich.



Abbildung 4.9: (a) Untersuchte Einspritzratenverläufe; (b) Gemessene und simulierte Eindringtiefe der Dampfphase in Abhängigkeit des Einspritzratenverlaufs.

# 4.4 Analyse der Entflammungscharakteristik des Pilotstrahls

Der korrekten Beschreibung der Zündung und der Ausbildung der ersten Flammenstrukturen kommt eine große Bedeutung zu, da die magere Gasverbrennung im Falle der DF-Verbrennung durch den Pilotstrahl eingeleitet und maßgeblich beeinflusst wird. Aus diesem Grund wird die Entflammung des Pilotstrahls im Folgenden detailliert untersucht. Zunächst wird die Zündung des Sprays in reinem Lufthintergrund untersucht. Der Einfluss des Brenngases auf die Zündung wird im nächsten Kapitel getrennt betrachtet. Den hier durchgeführten Untersuchungen liegen die Messdaten des OH\*-Signals aus der Verbrennungsbombe zugrunde. Dabei wurde der Zündzeitpunkt als der Punkt definiert, an dem in der Hälfte der durchgeführten Messungen OH\*-Signal detektierbar war. Die Simulationen wurden mittels der direkten Lösung der detaillierten Chemie auf Basis des in [70] entwickelten Mechanismus durchgeführt. Der Zündverzug wurde dabei als Zeit zwischen SOI und dem Punkt definiert, an dem der höchste Temperaturgradient in der Simulationsdomäne feststellbar war.

Die simulierten und die experimentell bestimmten Zündverzugszeiten sind in Abbildung 4.10a in Abhängigkeit der Kammertemperatur für einen konstanten Kammerdruck von 60 bar dargestellt. Die Zündverzugszeit sinkt dabei mit steigender Temperatur stark ab, da die Reaktionsgeschwindigkeit der Radikalreaktionen stark temperaturabhängig ist. Die Simulation gibt diese Verhalten wieder, zeigt jedoch bei 550 °C Kammertemperatur eine leichte Unterschätzung der Zündverzugszeit. Die Differenz der Zündverzugszeit von 550 °C auf 650 °C fällt im Vergleich zur Differenz von 650 °C auf 700 °C relativ hoch aus. Dies ist zum einen durch ein exponentielles Ansteigen der Zündverzugszeit hin zu niedrigen Temperaturen erklärbar, ist zum anderen aber auch auf das Verlassen des NTC-Bereiches unterhalb von 650 °C zurückzuführen. Der NTC-Bereich beschreibt ein Verhalten, welches besonders bei größeren Kohlenwasserstoffen auftritt und in einem gewissen Temperaturfenster zu einer konstant bleibenden Zündverzugszeit oder teilweise sogar zu einem kurzweiligen Anstieg der Zündverzugszeit mit steigender Temperatur führt [82]. Für n-Heptan, welches als Ersatzkraftstoff in der Gasphase der Simulationen eingesetzt wurde, liegt der NTC-Bereich auf dem betrachteten Druckniveau bei ca. 600 °C bis 750 °C [83].



Abbildung 4.10: Gemessene und simulierte Zündverzugszeiten für die Zündung des Pilotstrahls in Lufthintergrund in Abhängigkeit (a) des Kammerdruckes für eine Kammertemperatur von 550 °C und (b) der Kammertemperatur für einen Kammerdruck von 60 bar.

Ein weiterer wichtiger Einflussparameter auf die Zündverzugszeit ist durch den Kammerdruck gegeben. Abbildung 4.10b zeigt die simulierte und die experimentell bestimmte Zündverzugszeit in Abhängigkeit des Kammerdruckes für eine konstante Kammertemperatur von 550 °C. Ein steigender Kammerdruck führt hierbei zu einem Absinken der Zündverzugszeit, wie auch in [82] diskutiert wird. Die Begründung liegt zum einen in der beschleunigten Verdampfung durch einen höheren Anteil eingemischter heißer Luft im Spray, der nach Gleichung 4.8 eine Funktion der Gasdichte darstellt. Zum anderen führt die höhere Dichte zu einer höheren Konzentration an Reaktanden. Der Effekt wird prinzipiell von der Simulation korrekt wiedergegeben, zeigt sich jedoch nicht so stark ausgeprägt wie im Experiment. Die

simulierten Zündverzugszeiten liegen im Mittel leicht unter den experimentell bestimmten Zündverzugszeiten, kommen aber größtenteils noch im Streuband der Messung zum liegen. Abschließend kann die Berechnung der Zündverzugszeit in der Simulation in qualitativer und quantitativer Hinsicht als plausibel eingestuft werden und liefert somit eine fundierte Basis für weitere Untersuchungen.

Zusätzlich zur Zündverzugszeit ist die Ausbildung der initialen Flammenstrukturen des Pilotstrahls von entscheidender Bedeutung, da hierdurch eine Einleitung der Gasverbrennung erfolgt. Aus diesem Grund wurde die Entflammung des Pilotstrahls anhand des OH\*-Signals genauer untersucht. Abbildung 4.11 stellt die Flammenkontur zu unterschiedlichen Zeitpunkten nach SOI anhand der gemessenen OH\*-Signalintensität und des simulierten OH-Massenbruchs für einen Kammerdruck von 60 bar und eine Kammertemperatur von 700 °C dar. Der simulierte OH-Massenbruch ist dabei auf einer Schnittdarstellung durch die Sprayachse aufgetragen und wird durch einen Wert von 0,0001 kg/kg begrenzt. Das gemessene OH\*-Signal repräsentiert einen Mittelwert aus 32 Messungen und basiert auf einer tomographischen Rekonstruktion, welche eine Darstellung des Spraykerns ermöglicht.



Abbildung 4.11: Mittels RANS simulierter OH-Massenbruch (oben) und gemessene OH\*-Signalintensität (unten) zu unterschiedlichen Zeitpunkten nach der Einspritzung für einen Kammerdruck von 60 bar und eine Kammertemperatur von 700 °C.

Die Düsenspitze des Injektors ist in der unteren linken Ecke der Darstellungen positioniert und die Einspritzung erfolgt unter einem 45° Winkel. Die erste Darstellung zeigt das Spray kurz nach der Zündung 0,6 ms nach SOI, wobei eine Entflammung der äußeren Bereiche des Sprays nahe der Düse feststellbar ist. Die Simulation gibt dieses Verhalten qualitativ korrekt wieder, zeigt jedoch eine etwas höhere Abhebelänge der Flamme. Die Zündung erfolgt in diesen Bereichen, da hier durch das Einmischen der heißen Umgebungsluft eine schnelle Gemischaufbereitung und ein schnelles Aufheizen des Gemisches erfolgt, wodurch Zündbedingungen erreicht werden. Nach Ende der Einspritzung beginnt die Flamme in den Strahlkern vorzudringen, wobei es zeitgleich zur Entzündung der Randbereiche in der vorderen Sprayhälfte kommt. Ab 1,4 ms nach SOI verlagern sich die Reaktionszonen mit der höchsten OH\*-Signalintensität in den vorderen Spraybereich. Darauffolgend bildet sich eine kugelförmige Reaktionszone, welche sich von der Düsenspitze abhebt und kontinuierlich in den Brennraum vordringt. Diese Verhalten kann von dem gewählten Modellierungsansatz korrekt erfasst werden. Die höhere Abhebelänge zum Zündzeitpunkt und das etwas spätere Abheben der Flamme von der Düse in der Simulation kann zum einen auf eine mögliche Unterschätzung des Anteils eingemischter heißer Luft im Spray zurückzuführen sein. Zum anderen spielt der eingesetzte Reaktionsmechanismus eine entscheidende Rolle bei der Ausbildung der ersten Zündorte, wie bereits in [84] gezeigt wurde.

Zusätzlich zu den in diesem Kapitel durchgeführten RANS Simulation wurde eine LES Rechnung der Strahlzündung durchgeführt. Im Gegensatz zur RANS ermöglicht die LES eine detailliertere Beschreibung der durch den Strahl erzeugten Turbulenz, da hierbei ein Großteil der TKE direkt gelöst und nicht modelliert wird. Somit kann die Anisotropie der turbulenten Strukturen und deren Einfluss auf die Ausbildung zündfähiger Gemische entlang des Strahls berücksichtigt werden. Des Weiteren werden durch die LES lokale Temperatur- und Konzentrationsgradienten exakter abgebildet. Abbildung 4.12 zeigt hierzu die Flammenkonturen anhand des simulierten OH-Massenbruchs und der gemessenen OH\*-Signalintensität für einen Kammerdruck von 60 bar und 700 °C. Auffällig ist die deutlich kürzere Abhebelänge die mittels LES berechnet wurde, wodurch bei der Ausbildung der ersten Zündorte 0,6 ms nach SOI eine sehr gute Übereinstimmung mit der Messung feststellbar ist. Des Weiteren wird der Abhebevorgang der Flamme von 1,4 ms auf 1,8 ms nach SOI sehr gut wiedergegeben. Besonders die Reaktionszonen mit hoher Intensität sind hier deckungsgleich. Die räumliche Verteilung der gemittelten Signalintensität legt jedoch nahe, dass es hier zu höheren Schwankungen der Einzelmessungen kommt, wodurch eine korrekte Beschreibung der ersten Flammenstrukturen und des Abhebens der Flamme auf Basis des gemittelten Strömungsfeldes einer RANS Simulation erschwert wird. Die LES beschreibt im Vergleich zur RANS keine gemittelte Lösung sondern ein einzelnes Einspritzevent und ist somit in der Lage diese Schwankungen zu berücksichtigen. Um einen repräsentativen Vergleich mit den gemittelten Messdaten durchzuführen, müsste eine repräsentative Anzahl an LES Zyklen berechnet werden, was für die in diesem Kapitel durchgeführten Untersuchungen jedoch einen erheblichen Mehraufwand bedeuten würde.



Abbildung 4.12: Mittels LES simulierter OH-Massenbruch (oben) und gemessene OH\*-Signalintensität (unten) zu unterschiedlichen Zeitpunkten nach der Einspritzung für einen Kammerdruck von 60 bar und eine Kammertemperatur von 650 °C.

# 5 Untersuchung des Zündvorgangs in Brenngashintergrund

In diesem Kapitel wird die Zündung des Pilotstrahls in einem mageren Brenngas-Luft-Gemisch untersucht. Da der im vorherigen Kapitel beschriebene Versuchsaufbau nicht geeignet war die DF-Verbrennung zu untersuchen, wurde ein weiterer Versuchsträger am LTT eingesetzt. Hierbei handelte es sich um eine optisch zugängliche RCEM, welche ein mageres Erdgas-Luft-Gemisch zunächst rasch verdichtet und darauffolgend mit einer kleinen Piloteinspritzung entzündet. Die in der Brennkammer dieser Maschine aufgenommenen Druckverläufe dienten als Ausgangspunkt für die Validierung des Simulationsmodells.

# 5.1 Rapid Compression Expansion Machine

Der Aufbau der RCEM ist in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt. Die Funktionsweise der RCEM basiert auf einem pneumatisch angetriebenen Zylinder, an dessen Ende ein Kolben mit Glasfenster montiert ist. Durch eine Anpassung des Antriebsdruckes können unterschiedliche Verdichtungsverhältnisse untersucht werden. Der Zylinder ist über eine hydraulische Kopplung mit einem zweiten Ausgleichszylinder verbunden, der sich entgegen des ersten Zylinders bewegt. Dieser Aufbau ermöglicht eine zusätzliche Dämpfung von Vibrationen, die bei dem Verfahren der Zylinder auftreten. Das Beschleunigen und Abbremsen der Zylinder wird über Steuerventile im Ölkreislauf realisiert. Zu beachten ist, dass der bei der Kompression ansteigende Druck im Brennraum ebenso zur Verzögerung des Zylinders beiträgt [76]. Für eine detaillierte Beschreibung der Funktionsweise der RCEM sei auf [85] verwiesen.



Abbildung 5.1: Messaufbau der RCEM [86].

Die Kinematik des Kolbens, die sich aufgrund der Ausführung des Antriebs der RCEM

ergibt, gleicht der Kinematik eines regulären Kurbeltriebs in einem begrenzten Bereich um den oberen Totpunkt. Das Kräftegleichgewicht zwischen Antriebsdruck und Kammerdruck bestimmt dabei die vorliegende Kompressionshöhe. Dabei ist zu beachten, dass die Beimischung von Brenngas zu einer Änderung der spezifischen Wärmekapazität und somit zu einer Beeinflussung der Kompressionskurve führt. Aus diesem Grund unterscheidet sich die Kompressionshöhe bei gleichem Antriebsdruck leicht zwischen reinem Diesel- und DF-Betrieb [76]. Für den DF-Betrieb in der RCEM wurde eine Gasmischung aus 95,3% Methan und 4,7% Propan eingesetzt, um eine MZ von 80 nachzubilden. Dies entspricht zum einen der MZ der Gasmischung, die am Forschungsmotor für die Motoruntersuchungen zum Einsatz kam, und zum anderen können diese zwei Komponenten von dem gewählten Reaktionsmechanismus in der Simulation abgebildet werden. Die Gaszumischung in der RCEM erfolgt über Einlasskanäle im Zylinderkopf. Hierbei wird zuerst die gewünschte Menge Gas zugegeben, bevor der für die diese Untersuchung festgelegte Ladedruck von 2 bar durch Zugabe von Frischluft eingestellt wird. Die Brennraumwände werden elektrisch auf 60 °C geheizt und heizen somit auch die Frischladung auf. Da ausreichend Zeit zwischen dem Beladen und der Kompression zur Verfügung steht, stellt sich bis Kompressionsbeginn ein homogenes Gemisch mit einer Temperatur von 60 °C ein [76].

Der Umstand, dass die Brennkammer der RCEM in ihren Abmessungen eher einem Pkw-Motor gleicht führte dazu, dass der im vorherigen Kapitel analysierte Großinjektor nicht in der RCEM verbaut werden konnte. Aus diesem Grund kam ein kleinerer Referenzinjektor mit drei Düsenlöchern und einem Lochdurchmesser von 115 µm zum Einsatz. Der Injektor ist im Zentrum des Zylinderkopfes verbaut und wird mit einem konstanten Kraftstoffdruck von 1600 bar versorgt. Zur Aufzeichnung des Zylinderdruckes ist zusätzlich ein Druckaufnehmer im Zylinderkopf verbaut. Da der Fokus der Untersuchungen an der RCEM auf dem Einfluss des Brenngashintergrundes auf die Entflammungscharakteristik des Pilotstrahls lag, wurden Vergleichsmessungen des Referenzinjektors mit reinem Lufthintergrund an der Verbrennungsbombe und der RCEM durchgeführt, um eine Übertragbarkeit der gewonnenen Erkenntnisse auf den Großinjektor zu ermöglichen. Die Messungen wurden mit einem konstanten Energiegehalt von 3,7 kJ durchgeführt, wobei der energetische Dieselanteil von 5% bis 20% variiert wurde. Dies ermöglicht zusammen mit den durchgeführten Vergleichsmessungen in reinem Lufthintergrund eine Beurteilung des Einflusses des Brenngases auf den Zündvorgang. Die Ergebnisse dienten als Basis für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen und ermöglichen eine Validierung des eingesetzten Reaktionsmechanismus für die DF-Verbrennung.

## 5.2 CFD Modell der RCEM

Die Modellierung der RCEM in der CFD erfolgte mittels eines vereinfachten geometrischen Modells der Brennkammer der RCEM. Auf Basis dieses Modells und dem zeitlichen Verlauf der Kolbenbewegung wurde ein bewegtes Netz erstellt, welches in Abbildung 5.2 als Schnittdarstellung 1,7 ms vor dem oberen Totpunkt gezeigt ist.



Abbildung 5.2: Schnittdarstellung des Rechennetzes der RCEM 1,7 ms vor dem oberen Totpunkt.

Die Basisgröße der Rechenzellen beträgt hierbei 1 mm, wobei im Bereich nahe der Brennraumwände eine Netzverfeinerung auf 0,5 mm integriert ist. Die Netzverfeinerungen im Bereich der Einspritzstrahlen entsprechen der in Kapitel 4 beschriebenen Verfeinerungsstrategie. Das Netz beinhaltet zusätzlich drei Randschichtzellen mit einer Höhe der ersten Zelle von 0,125 mm. Die resultierende maximale Zellzahl des Netzes beträgt 1,9 Mio. Zellen.

Die Wandtemperaturen wurden in der Simulation, entsprechend der Vorkonditionierung in der Messung, konstant mit 60 °C vorgegeben. Der Startzeitpunkt der Simulationen wurde zum Kompressionsbeginn mit einer Ladungstemperatur von 60 °C und einem Kammerdruck von 2 bar gewählt. Die Zündung und die Verbrennung wurden mit dem bereits in Kapitel 4 dargelegten Ansatz zur direkten Lösung der Reaktionschemie berechnet. Die Modellierung der Einspritzung erfolgte ebenfalls nach der im vorherigen Kapitel vorgestellten Methodik. Hierbei wurden Schlieren-Messungen und gemessene Massenstromverläufe des Referenzinjektors eingesetzt, um die initiale Geschwindigkeit der Tropfen anhand des Ansatzes der Impulserhaltung entlang der Strahlachse und die Einspritzrate zu bestimmen. Die Kalibrierung des Aufbruchsund Verdampfungsmodells wurde ebenso wie die initiale Tropfengrößenverteilung beibehalten. Die Validierung der Einspritzung erfolgte anhand der für den Referenzinjektor gemessenen Verläufe der Eindringtiefe der Flüssig- und der Dampfphase aus der Verbrennungsbombe. Die Ergebnisse der Validierungsrechnung in der in Kapitel 4 gezeigten Spraybox sind Abbildung 5.3 dargestellt. Es zeigt sich, dass die angewendete Methodik in der Lage ist auch den Referenzinjektor in ausreichender Genauigkeit abzubilden. Die Verläufe der Eindringtiefen, besonderes der Verlauf der Dampfphase, stimmen hier sehr gut mit den Messdaten überein. Lediglich zu Beginn der Einspritzung zeigt sich eine leichte Abweichung der Eindringtiefe der Flüssigphase.



Abbildung 5.3: Gemessene und simulierte Eindringtiefe der Flüssig- und der Dampfphase für einen ausgewählten Betriebspunkt des Referenzinjektors.

### 5.3 Analyse der Dual-Fuel-Zündung

Die Analyse der DF-Zündung erfolgt anhand einer Gegenüberstellung der simulierten und gemessenen Zylinderdruckverläufe der RCEM. Abbildung 5.4a zeigt hierzu die Druckverläufe für einen Betrieb mit 20% energetischen Dieselanteil, wobei der reine Dieselbetrieb in roter und der DF-Betrieb in blauer Farbe dargestellt ist. Zusätzlich zu den Druckverläufen ist der Verlauf der eingespritzten Dieselmasse aufgetragen. Der SOI ist mit einer gestrichelten vertikalen Linie dargestellt. Die gestrichelten farbigen Linien repräsentieren die jeweils aus sechs Messungen gemittelten Druckverläufe mit zugehörigem Streuband. Die Simulationen, dargestellt als durchgezogene Linien, zeigen sowohl für den Diesel- als auch für den DF-Betrieb bezüglich des Zündverzuges eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten. Der Zündverzug wird in diesem Fall durch den Zeitraum zwischen SOI und dem ersten Abheben des Druckverlaufes von der Kompressionskurve definiert. Für den DF-Betrieb zeigt sich, im Vergleich zum Dieselbetrieb, eine deutlich längere Zündverzugszeit. Dies ist zum einen auf die durch das Brenngas abgesenkte Sauerstoffkonzentration im Spraybereich und zum anderen auf eine chemische Interaktion des Methans mit den während der Zündung gebildeten Radikalen zurückzuführen [87]. Dabei wird das Anwachsen der Radikalkonzentration durch die konkurrierenden Reaktionen mit den Methanmolekülen gebremst. Hinzu kommt eine Änderung der spezifischen Wärmekapazität durch die Anwesenheit des Brenngases. Diese führt zu einer abgesenkten Kompressionsendtemperatur und einem niedrigeren Kompressionsenddruck, die die Reaktionsgeschwindigkeit der Radikalreaktionen während des Zündverzuges verlangsamen. Dieser Effekt ist bereits am Auseinanderlaufen der Druckkurven nahe des oberen Totpunktes feststellbar. Das Simulationsmodell ist jedoch in der Lage diese Effekte korrekt zu erfassen und eignet sich somit zur Berechnung der DF-Zündung. Im weiteren Verlauf der Verbrennung zeigt sich jedoch ein deutlicher Unterschied zwischen simulierten und gemessenen Druckverläufen. Im Falle der Dieselverbrennung fällt diese Abweichung geringer aus und lässt sich unter anderem durch eine Beeinflussung der Kolbenbewegung durch den Verbrennungsdruck erklären, die so nicht von der Simulation berücksichtigt werden kann. Des Weiteren ist in der RCEM mit erhöhtem Blowby zu rechnen. Im Falle der DF-Verbrennung fällt der Druckverlauf in der Simulation hingegen deutlich höher aus, was auf eine zu schnell berechnete Wärmefreisetzung hinweist. Eine mögliche Ursache hierfür ist eine unzureichende Auflösung der Flammenfront im mageren Brenngas-Luft-Gemisch durch den gewählten Ansatz der direkten Integration der detaillierten Chemie.



Abbildung 5.4: (a) Gemessener und simulierter Druckverlauf in der RCEM für 20% energetischen Dieselanteil in Luft- und Brenngashintergrund; (b) Gemessener und simulierter Druckverlauf in der RCEM für 5% und 20% energetischen Dieselanteil in Brenngashintergrund.

Der Einfluss des energetischen Dieselanteils bei der DF-Verbrennung ist in Abbildung 5.4b anhand der simulierten und gemessenen Druckverläufe für 5% und 20% energetischen Dieselanteil dargestellt. Der Gesamtenergiegehalt wurde bei dieser Variation konstant gehalten, wodurch für 5% Dieselanteil ein leicht fetteres Brenngas-Luft-Gemisch vorliegt. Die leicht höhere Konzentration an Brenngasmolekülen führt im Fall von 5% energetischen Dieselanteil zu einem etwas längeren Zündverzug, wobei dieser Effekt von der Simulation korrekt wiedergegeben wird. Ein Vergleich der beiden Betriebspunkte zeigt jedoch einen signifikant höheren initialen Druckanstieg in der Nähe des oberen Totpunktes für 20% Dieselanteil. Dies lässt sich auf einen größeren Bereich des Brennraums zurückführen, der zum Zündzeitpunkt von den Spraykeulen erfasst wird und somit entzündet wird. Die Brenngaskonzentration fällt in diesem Betriebspunkt zwar geringer aus, durch den größeren vom Spray erfassten Bereich wird jedoch insgesamt eine größere Brenngasmenge bei der Zündung umgesetzt. Des Weiteren ist deutlich mehr Dieselkraftstoff zum Zündzeitpunkt vorhanden, der schlagartig umgesetzt werden kann, wie an den in Abbildung 5.4b dargestellten Verläufen der eingespritzten Masse erkennbar ist.

Ein weiterer wichtiger Punkt, um die Entflammung des Brenngas-Luft-Gemisches zu beurteilen, ist die Ausprägung der durch die Pilotstrahlen erzeugten Flammenstrukturen. Besonders für stark abgemagerte Gemische, wie sie in DF-Motoren zum Einsatz kommen, ist eine ausreichende Entflammung wichtig, um eine möglichst vollständige Verbrennung zu ermöglichen. Aufgrund der starken Abmagerung sinkt die laminare Flammengeschwindigkeit, wodurch der Flammenfortschritt verlangsamt wird und eine initiale Entflammung eines weiten Bereichs des Brennraums erforderlich wird. Die Ausbreitung der initialen Flammenstrukturen ist in Abbildung 5.5 anhand der simulierten Temperaturverteilung im Brennraum der RCEM auf einer Schnittebene durch eine Spraykeule für die beiden betrachteten Betriebspunkte dargestellt.

In der ersten Reihe, 0,33 ms vor dem oberen Totpunkt, ist eine deutliche Abkühlung im Spraybereich feststellbar, die durch die Verdampfung des Kraftstoffes verursacht wird. Für 20% Dieselanteil ist hier eine höhere Eindringtiefe feststellbar, die durch den höheren Strahlimpuls und die im Vergleich zu 5% Dieselanteil weiterhin andauernde Einspritzung bedingt ist. Kurz nach der Zündung, 0,11 ms nach dem oberen Totpunkt, lässt sich für 5% Dieselanteil bereits eine vollständige Entflammung des Strahlbereichs feststellen, wohingegen für 20% Dieselanteil nur im Randbereich des Strahls Flammenstrukturen feststellbar sind. Dies lässt sich durch die noch unvollständige Verdampfung im Strahlkern und das weitere Andauern der Einspritzung erklären. Zum nächsten Zeitpunkt, 0,78 ms nach dem oberen Totpunkt, entflammt jedoch auch hier der Strahlkern und die Flammenfronten beginnen sich durch den Brennraum auszubreiten. Für 20% Dieselanteil ist bereits ein deutlich größerer Bereich des Brennraums von der Flamme erfasst, was auf den höheren Strahlimpuls, der zu einer schnelleren Verbreitung des Kraftstoffdampfes führt, zurückzuführen ist. Bei 1,44 ms nach dem oberen Totpunkt erfassen die Flammen bereits einen großen Bereich des Brennraums und treten bereits in den Quetschspalt über. Abschließend lässt sich schlussfolgern, dass die schnelle Ausbreitung des Kraftstoffes im Fall von 20% Dieselanteil die Verbrennung deutlich

mehr beschleunigt als die etwas höhere laminare Flammengeschwindigkeit im fetteren Gemisch mit 5% Dieselanteil. Eine Möglichkeit die Verbrennung noch weiter zu beschleunigen wird in [85] durch eine Erhöhung der Anzahl der Düsenlöcher von drei auf sechs diskutiert.



Abbildung 5.5: Simulierte Temperaturverteilung zu unterschiedlichen Zeitpunkten während der Verbrennung in der RCEM für 5% und 20% energetischen Dieselanteil.

Die an der RCEM durchgeführten Untersuchungen zur Zündung der Pilotstrahlen in Brenngashintergrund haben gezeigt, dass der in [70] entwickelte Reaktionsmechanismus in der Lage ist die chemische Interaktion des Brenngasgemisches mit dem Pilotkraftstoff und die daraus folgende Verlängerung der Zündverzugszeit korrekt zu erfassen. Der Reaktionsmechanismus und die in diesem Kapitel gewonnen Erkenntnisse zur DF-Zündung dienen im Folgenden als Basis für die Verbrennungsmodellierung im Forschungsmotor. Dabei wird der Reaktionsmechanismus für die Adaption eines Flammenfortschrittsmodells eingesetzt.

# 6 Simulation der Verbrennung im Forschungsmotor

In diesem Kapitel wird die motorische Verbrennung mittels eines Simulationsmodells eines Einzylinder-Forschungsmotors analysiert. Hierzu wurden von der AVL List GmbH Messdaten von einem Motorprüfstand zur Verfügung gestellt. Ausgehend von den in den beiden vorherigen Kapiteln erläuterten Modellierungsansätzen wurde ein Motormodell generiert, welches für die LES mehrerer konsekutiver Motorzyklen eingesetzt wurde. Die Verbrennungsrechnung wurde dabei mittels eines adaptierten Flammenfortschrittsmodells durchgeführt.

# 6.1 Randbedingungen für die CFD Simulation

Bei dem untersuchten Forschungsmotor handelt es sich um einen Einzylinder-Motor, dessen geometrische Daten in Tabelle 6.1 aufgelistet sind. Der Motor wird grundlegend als schnelllaufender Großmotor klassifiziert.

Bohrung [mm]	170
Hub [mm]	210
Hubvolumen [cm <sup>3</sup> ]	4960
Verdichtungsverhältnis [-]	13,25

Tabelle 6.1: Technische Daten des Forschungsmotors.

Die zur Verfügung gestellten Messdaten umfassen die Drucksignale der Niederdruckindizierung in den Ein- und Auslasskanälen, sowie das Drucksignal der Hochdruckindizierung im Zylinder. Des Weiteren wurden die Temperaturen im Ein- und Auslass aufgenommen. Der mittlere Luftmassenstrom und die im Abgasmassenstrom enthaltenen Schadstoffe wurden ebenso vermessen. Für die Simulation wurden drei Betriebspunkte (OPs) ausgewählt, deren Parameter in Tabelle 6.2 dargestellt sind. Die Betriebspunkte unterscheiden sich dabei in dem energetischen Dieselanteil, dem Äquivalenzverhältnis des Brenngas-Luft-Gemisches, der Rate der AGR und dem Einspritzzeitpunkt. Die Motordrehzahl, der effektive Mitteldruck und der Einspritzdruck wurden konstant gehalten. Der Kraftstoff wurde mittels des in Kapitel 4 untersuchten Injektors eingebracht. Bei zwei der betrachteten Betriebspunkte wurden am Prüfstand teilweise irreguläre Verbrennungsphänomene wie Klopfen bei OP2 und Flammenlöschen bei OP3 beobachtet. Das Auftreten klopfender Verbrennung wurde dabei von einem am Prüfstand eingesetzten Klopfsensor erfasst. Flammenlöschen konnte anhand erhöhter Konzentrationen unverbrannter Kohlenwasserstoffe im Abgasmassenstrom nachgewiesen werden.
Parameter	OP1	OP2	OP3
Motordrehzahl [1/min]	1800	1800	1800
Effektiver Mitteldruck [bar]	19,5	19,5	19,5
Energetischer Dieselanteil	1%	5%	20%
Äquivalenzverhältnis Gas	0,59	0,55	$0,\!54$
AGR-Rate	0,5%	0,5%	20,5%
Ansaugluft temperatur [°C]	60	60	60
Einspritzdruck [bar]	1000	1000	1000
Einspritzbeginn (SOI) [°KW aTDC]	-18	-20	-17

Tabelle 6.2: Parameter der untersuchten Motorbetriebspunkte.

Die Randbedingungen für die CFD Simulationen wurden mittels eines 0D/1D-Ladungswechselmodells in der Software AVL BOOST<sup>TM</sup> abgeleitet. Das Modell lieferte dabei Kurbelwinkel-aufgelöste Druck-, Temperatur- und Massenstromverläufe an den Einund Auslassrandbedingung des 3D-Modells. Zusätzlich wurde die nach dem Ladungswechsel gefangene Ladungsmasse und deren Zusammensetzung berechnet. Die generierten Daten wurden nachfolgend auf das 3D-Modell übertragen und dienen zusätzlich zur Validierung des Ladungswechsels.

## 6.2 Aufbau des Simulationsmodells für die Large Eddy Simulation

Der Aufbau des Simulationsmodells des Forschungsmotors erfolgte im CFD Code AVL FIRE<sup>TM</sup> (R2018.1). Für die Erstellung des bewegten Netzes kam der automatisierte Vernetzer FAME<sup>TM</sup> Hexa zum Einsatz. Das Modell umfasst auf der Einlassseite die beiden Einlasskanäle von denen einer als Drallkanal ausgeführt ist und einen Teil des Sammlers. Auf der Auslassseite endet das Modell nach der Zusammenführung der Auslasskanäle, wobei die Randbedingung ausreichend weit weg von der Zusammenführung gesetzt wurde, um Rückströmungen und Instabilitäten zu vermeiden. Die Abmessungen der Rechenzellen bewegen sich im Bereich von 4 mm im Sammler und 0,125 mm im Bereich des Sprays. Der Brennraum wurde mit Zellgrößen von 0,5 mm aufgelöst, um ein ausreichend feines Netz für die LES bereitzustellen. Als Kriterium für die Netzauflösung wird hier von Pope [50] eine direkte Auflösung der turbulenten Strukturen, welche 80% der TKE tragen, vorgeschlagen. Zusätzlich sind im Bereich der sieben Spraykeulen Netzverfeinerungen integriert, um eine korrekte Beschreibung der Strahlausbreitung zu ermöglichen. Die Struktur der Verfeinerungen wurde dabei gleich den Netzverfeinerungen in der Spraybox in Kapitel 4 gewählt, um eine Übertragbarkeit der

generierten Modelle für die Piloteinspritzung zu gewährleisten. Abbildung 6.1 zeigt eine Schnittdarstellung des Rechennetzes im Bereich einer der sieben Verfeinerungen.

Abbildung 6.1: Schnittdarstellung des Motornetzes in Bereich der Sprayverfeinerungen.

Des Weiteren ist das Netz mit drei Lagen von Randschichtzellen ausgestattet, welche mit einer Höhe von 0,0075 mm an der Wand beginnen und nachfolgend mit einem Faktor von 1,5 anwachsen. Während des Öffnens und des Schließens der Ventile sind in dem Ventilspalt ebenso Rechenzellen mit 0,125 mm platziert, um eine ausreichend genaue Auflösung des Einund Ausströmens sicherzustellen. Das Rechennetz umfasst aufgrund der Netzverfeinerungen eine maximale Zellzahl von 12 Mio. am unteren Totpunkt.

Die exakte Beschreibung der Randbedingungen an Ein- und Auslass stellt die Basis für eine korrekte Berechnung des Ladungswechsels dar. Für die Einlassrandbedingung wurde der Kurbelwinkel-aufgelöste Massenstrom und die Temperatur aus der 0D/1D-Simulation vorgegeben. Als Auslassrandbedingung wurde eine Druckrandbedingung gesetzt. Des Weiteren wurden die 0D/1D-Simulationen dazu eingesetzt um eine homogene Initialisierung des Strömungsfeldes durchzuführen. Der Startzeitpunkt der Rechnungen wurde dabei zum Zeitpunkt des Öffnens der Auslassventile gewählt. Der erste berechnete Zyklus diente zur Initialisierung des Strömungsfeldes und wurde nicht in die Auswertung der Multizyklensimulation einbezogen. Der Zeitschritt wurde während des Ladungswechsels, der Kompression und der Expansion mit 0,1 °KW festgelegt. Im Zeitraum der Eindüsung erfolgte eine Absenkung des Zeitschrittes auf 0,02 °KW, um die Strahlausbreitung korrekt zu erfassen. In der nachfolgenden Verbrennung wurde der Zeitschritt wieder auf 0,05 °KW angehoben.

Die örtliche und zeitliche Diskretisierung wurde durch Schemata zweiter Ordnung in der Genauigkeit realisiert, da dies eine wichtige Anforderung der LES darstellt. Schemata zweiter Ordnung müssen hier aber bereits als Kompromiss angesehen werden, da sie gerade noch genau genug sind, sich Schemata höherer Ordnung jedoch nur schwer in Kombination mit komplexen Geometrien anwenden lassen [88]. Zusätzlich zu den LES Zyklen wurde noch eine RANS Simulation durchgeführt, um die Unterschiede in der Beschreibung des Strömungsfeldes zwischen den beiden Ansätzen zu untersuchen. Die zugrundeliegenden Modelle und Annahmen wurden bereits in Kapitel 3 dargelegt.

## 6.3 Adaption des ECFM Verbrennungsmodells

Aufgrund der bereits erwähnten Problematik der unzureichenden Auflösung der Flammenfront im mageren Brenngas-Luft-Gemisch für die direkte Integration der detaillierten Chemie, wurde das in Kapitel 3 beschriebene ECFM für die Motorsimulationen eingesetzt. Das ECFM muss um ein Zündmodell ergänzt werden, welches die Initialisierung der Flammenfront vornimmt. Hierzu wurde das sogenannte Diesel-Ignited Gas Engine (DIGE) Modell herangezogen, welches auch von den Autoren in [89] zur Analyse der DF-Verbrennung eingesetzt wurde und im Rahmen der vorliegenden Arbeit adaptiert wurde. Dieses Modell berechnet den Zündverzug anhand einer Arrheniusfunktion, welche die Temperatur, den Druck, den Kraftstoff- und den Sauerstoffmassenbruch als Eingangsgrößen aufweist. Die Zündung wird dabei nur in Zellen berechnet, die ein höheres Äquivalenzverhältnis als die Hintergrundmischung aufweisen, da das ECFM auf nur einer Kraftstoffkomponente basiert [74]. Der eingespritzte Dieselkraftstoff wird somit in der Gasphase als Methan betrachtet und führt zu lokal fetten Zonen im Spraybereich. Da die Parametrierung der Arrheniusfunktion auf n-Heptan basiert, wird der Effekt des Brenngases auf den Zündverzug zunächst nicht berücksichtigt. Das Modell wurde aus diesem Grund adaptiert, um die in dieser Arbeit bereits dargelegten Verlängerung des Zündverzuges von Diesel in Brenngas zu berücksichtigen. Hierzu wurde der in Kapitel 4 und 5 eingesetzte Reaktionsmechanismus für eine Tabellierung der Zündverzugszeiten in Abhängigkeit des Druckes, der Temperatur und des Äquivalenzverhältnisses herangezogen. Die Ergebnisse der Tabellierung sind in Abbildung 6.2 für einen Umgebungsdruck von 60 bar und 100 bar dargestellt. Das Äquivalenzverhältnis beschreibt dabei die Summe aus Dieselanteil und magerem Brenngashintergrund. Die Parameter der im Modell hinterlegten Zündfunktion wurden daraufhin mittels einer Optimierung in MATLAB<sup>®</sup> (R2019b) adaptiert, um die tabellierten Zündverzugszeiten abzubilden. Die Ergebnisse der adaptierten Zündfunktion sind in Abbildung 6.2 als blaue Flächen dargestellt. Unterhalb von einer Temperatur von 900 K zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit den tabellierten Zündverzugszeiten des Mechanismus, wohingegen für höhere Temperaturen etwas kürzere Zündverzugszeiten von der Funktion vorhergesagt werden. Da die Zylindertemperaturen zu Beginn der Piloteinspritzung im Bereich von 823 K bis 873 K liegen, können die Ergebnisse der Funktion jedoch als ausreichen genau eingestuft werden. Zusätzlich wurden die laminaren Flammengeschwindigkeiten für die vorliegende Gasmischung aus Methan und Propan mit Hilfe des Mechanismus tabelliert und in das Verbrennungsmodell integriert.



Abbildung 6.2: Zündverzugszeit in Abhängigkeit der Temperatur und des Äquivalenzverhältnisses berechnet mittels Reaktionsmechanismus und Zündfunktion für einen Umgebungsdruck von 60 bar (a) und 100 bar (b).

Die Modellierung der drei untersuchten Betriebspunkte erforderte eine Betriebspunktspezifische Anpassung eines Parameters des Verbrennungsmodells. Hierbei wurde der "stretch factor", welcher zur Anpassung der Produktion der Flammenfrontdichte eingesetzt wird, gewählt. Abbildung 6.3 zeigt die dabei gewählten Werte in Abhängigkeit des energetischen Dieselanteils. Hier zeigt sich eine indirekte Proportionalität des "stretch factors" zum energetischen Dieselanteil. Eine mögliche Ursache für dieses Verhalten ist in der Ausbildung der initialen Flammenfront zu finden, die mit höherem Dieselanteil ein höheres Volumen im Brennraum einnimmt. Somit wird für die gleiche Brenngeschwindigkeit eine niedrigere Produktionsrate der Flammenfrontdichte benötigt.



Abbildung 6.3: Stretch factor in Abhängigkeit des energetischen Dieselanteils.

### 6.4 Simulationsergebnisse

Im Folgenden werden die Simulationsergebnisse der LES Multizyklenrechnungen dargelegt und analysiert. Die Simulationen wurden am Vienna Scientific Cluster (VSC) auf 300 Rechenkernen durchgeführt. Ein Motorzyklus wurde dabei im Schnitt innerhalb von drei Tagen berechnet. Für die Betriebspunkte OP1 und OP3 wurden jeweils 5 bis 10 Zyklen berechnet. Eine deutlich höhere Anzahl von 25 Zyklen wurde für OP2 berechnet, um für diesen Betriebspunkt detaillierte Analysen der turbulenten Verbrennung und der zyklischen Schwankungen durchzuführen, welche in Kapitel 7 aufgezeigt werden. Eine Untersuchung stochastisch auftretender irregulärer Verbrennungsphänomene würde eine noch höhere Zyklenzahl erfordern, wie von Lauer in [72] aufgezeigt wurde.

### 6.4.1 Zylinderdruckverlauf und Wärmefreisetzung

Die simulierten und gemessenen Zylinderdruckverläufe sind in Abbildung 6.4 für OP1 und OP3 um den oberen Totpunkt dargestellt. Die Messdaten sind dabei als mittlerer Druckverlauf mit zugehörigem Streuband dargestellt, welcher aus 250 Einzelmessungen berechnet wurde. Der obere Totpunkt befindet sich in dieser Darstellung bei 720 °KW. Der Einspritzzeitpunkt ist für beide Betriebspunkte als gestrichelte vertikale Linie dargestellt.



Abbildung 6.4: Gemessene und simulierte Zylinderdruckverläufe für (a) OP1 und (b) OP3 mit zugehörigen Mittelwerten.

Für OP1 in Abbildung 6.4a liegen die simulierten Druckverläufe im Streuband der Messung. Die Druckverläufe zeigen hier zunächst nur ein geringes Abheben von der Kompressionskurve, worauf nach dem oberen Totpunkt aber ein steiler Anstieg folgt. Das Streuband der Messung fällt deutlich größer aus als in der Simulation, wobei die doch relativ geringe Anzahl an Zyklen zu berücksichtigen ist. Dies führt dazu, dass aufgrund der großen Schwankungsbreite einzelne schnell und langsam brennende Zyklen stochastisch nicht erfasst werden.

Für OP3, dargestellt in Abbildung 6.4b, werden die gemessenen Druckverläufe von den Simulationen ebenso gut wiedergegeben. Das Streuband fällt hier im Vergleich zu OP1 deutlich geringer aus, was sich auf den höheren Dieselanteil zurückführen lässt. Die zeitliche Differenz bezüglich des ersten Druckanstieges lässt darauf schließen, dass die Zündung in der Simulation etwas früher stattfindet. Somit wird der erste steile Druckanstieg in der Messung, der durch die schlagartige Verbrennung des während der Zündverzugszeit vorgemischten Dieselkraftstoffs bedingt ist, vom Modell unzureichend erfasst.

Eine deutlich höhere Zyklenzahl wurde für OP2 simuliert und ist in Abbildung 6.5a in Form der Zylinderdruckverläufe dargestellt. Die Messungen sind hier, im Gegensatz zu Abbildung 6.4, als einzelne Verläufe mit zugehörigem Mittelwert dargestellt. Zu Beginn der Verbrennung zeigt sich der schon für OP3 beobachtete etwas zu kurze Zündverzug in der Simulation, wodurch der erste steile Druckanstieg vom Modell nicht richtig erfasst wird. Nachfolgend kann das Streuband der Messung durch die 25 simulierten Zyklen jedoch gut wiedergegeben werden. Drei dieser Zyklen zeigen jedoch einen etwas zu steilen Druckanstieg, gefolgt von einem erhöhten Spitzendruck. Dieses Verhalten lässt sich anhand der Wärmefreisetzungsraten, dargestellt in Abbildung 6.5b, näher analysieren.



Abbildung 6.5: (a) Gemessene und simulierte Zylinderdruckverläufe für OP2 mit zugehörigen Mittelwerten; (b) Aus den Zylinderdruckverläufen berechnete Wärmefreisetzungsraten mit zugehörigen Mittelwerten.

Die Wärmefreisetzungsraten wurden für die Messungen als auch für die Simulationen anhand der Zylinderdruckverläufe berechnet. Hier wird nochmals der frühere Beginn der Verbrennung in der Simulation anhand des früheren Anstiegs der Wärmefreisetzungsrate deutlich, wobei die Abweichung mit ca. 2 °KW als eher gering einzustufen ist. Die Abweichung kann einerseits auf geringe Unterschiede in der Berechnung des Zündverzuges zwischen Reaktionsmechanismus und Arrheniusfunktion zurückgeführt werden. Andererseits stellt die Modellierung der Zündung des Pilotstrahls mit nur einer Kraftstoffkomponente eine gewisse Vereinfachung dar, die nicht in der Lage ist alle Phänomene zur Gänze zu erfassen. Der nachfolgende Verlauf der Wärmefreisetzungsrate wird vom Modell prinzipiell gut wiedergegeben. Der Verlauf ist dabei durch einen ersten Peak gekennzeichnet der durch die Zündung des Pilotstrahls verursacht wird. Danach erfolgt ein kurzer Rückgang der Wärmefreisetzungsrate bevor es zum zweiten großen Anstieg verursacht durch die magere Gasverbrennung kommt. Die drei zu schnell brennenden Zyklen sind hierbei durch einen zu schnellen Übergang in die magere Gasverbrennung gekennzeichnet. Die Wärmefreisetzungsrate zeigt für diese Zyklen kaum einen Rückgang zwischen Diesel- und Gaspeak.

Eine weitere Beurteilung der Qualität der Simulationen kann anhand des Variationskoeffizienten (COV), welcher nach Heywood [41] auf Basis von Gleichung 6.1 berechnet werden kann, durchgeführt werden. Der COV ermöglicht eine Gegenüberstellung der Schwankungsintensität der Simulationen und der Messungen.

$$COV_{P_{max}} = \frac{\sigma_{P_{max}}}{\overline{P_{max}}} \cdot 100 \tag{6.1}$$

Der COV des Spitzendruckes ist für die drei betrachteten Betriebspunkte in Abbildung 6.6a dargestellt. Für OP2 ist zusätzlich der aus den ersten 10 Zyklen berechnete Wert dargestellt, um eine bessere Vergleichbarkeit mit den anderen beiden Betriebspunkten, für die nur eine geringere Anzahl von 5 bis 10 Zyklen berechnet wurde, darzustellen. Der COV nimmt mit steigendem Dieselanteil ab, da die größere Dieselmenge zu einer stabileren Ausprägung der initialen Flammenfront führt. Für OP1 fallen die Schwankungen in der Simulation geringer aus als in der Messung. Dies lässt sich durch die niedrige Zyklenzahl erklären, mit der nicht das gesamte Streuband erfasst werden kann, da einzelne deutlich schneller oder langsamer brennende Zyklen fehlen. Hier kommt hinzu, dass die Dieseleinspritzung bei sehr kleinen Mengen aufgrund reduzierter Dosiergenauigkeit eine zusätzliche Quelle für Schwankungen darstellt, die so bei der Modellierung nicht berücksichtigt ist. Für OP3 kann trotz der geringen Zyklenzahl eine gute Übereinstimmung erzielt werden. Dies liegt in der im Vergleich zu OP1 deutlich geringeren Schwankungsbreite begründet. Die Bedeutung der Zyklenzahl zeigt sich beim Vergleich der Werte des COV für OP2. Die ersten 10 Zyklen zeigen hier einen deutlich geringeren Wert als die Gesamtzahl der berechneten 25 Zyklen. Bei Betrachtung der 25 Zyklen, ergibt sich ein etwas höherer COV als experimentell beobachtet. Dies lässt sich auf die drei zu schnell brennenden Zyklen in der Simulation zurückführen. Grundlegend wird der in der Messung beobachtete Trend des mit dem Dieselanteil abfallenden COV des Spitzendruckes korrekt von der Simulation erfasst. Aufgrund der hohen berechneten

Zyklenzahl für OP2 wurde für diesen Betriebspunkt zusätzlich eine Analyse des COV der Verbrennung durchgeführt. Abbildung 6.6b zeigt hierzu den COV des Umsatzpunkts (MFB) an dem 50% des im Brennraum vorhandenen Kraftstoffes umgesetzt sind. Dieser Punkt wird auch als Schwerpunktlage der Verbrennung bezeichnet und gibt unter anderem Aufschluss über den Wirkungsgrad. Zum Vergleich sind auch hier die aus den ersten 10 Zyklen berechneten Werte aufgetragen. Im Experiment zeigt sich hier eine gewisse Schwankungsbreite, die auf eine nicht optimal reproduzierbare Verbrennung hindeutet. In der Simulation wird der COV des MFB 50 überschätzt, was auf die drei zu schnell brennenden Zyklen zurückzuführen ist, wie der Vergleich mit dem Wert der ersten 10 Zyklen zeigt. Der COV des MFB 90 Punktes gegen Ende der Verbrennung zeigt jedoch wieder eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation.



Abbildung 6.6: (a) COV des Spitzendruckes (P<sub>max</sub>) der drei untersuchten Betriebspunkte berechnet aus den gemessenen und simulierten Zylinderdruckverläufen; (b) COV des Spitzendruckes (P<sub>max</sub>), des 50% und 90% Umsatzpunktes (MFB) für 5% energetischen Dieselanteil (OP2).

Die durchgeführten Simulationen gewähren einen detaillierten Einblick in den Verbrennungsablauf, welcher sich anhand der Flammenausbreitung im Brennraum analysieren lässt. Abbildung 6.7 zeigt hierzu die Isoflächen der Temperatur mit einem Wert von 1500 K, da sich in diesem Bereich die Flammenfront lokalisieren lässt. Zusätzlich zur Isofläche der Temperatur sind die Spraykeulen in Form der Lagrange-Partikel dargestellt. Der Ablauf der Verbrennung ist in dieser Darstellung für jeweils einen repräsentativen Zyklus mit mittlerer Brenngeschwindigkeit der drei Betriebspunkte dargestellt. In der ersten Reihe, kurz vor der Zündung bei 705 °KW, sind die sieben Spraykeulen dargestellt. Die Eindringtiefe des Sprays ist hierbei für OP2 mit 5% Dieselanteil am größten. Dies lässt sich auf den im Vergleich zu den anderen Betriebspunkten früheren SOI zurückführen, wie in Tabelle 6.2 dargestellt ist.



Abbildung 6.7: Isofläche der Temperatur von 1500 K und Darstellung des Sprays zu unterschiedlichen Zeitpunkten um den oberen Totpunkt für die drei untersuchten Betriebspunkte.

März 2022

Bei 710 °KW ist die Zündung bei allen drei Betriebspunkten erfolgt. OP1 mit 1% Dieselanteil zeigt dabei einen lokal sehr begrenzten Bereich der bereits entflammt wurde und erinnert damit eher an die Punkt-förmige Zündung eines Ottomotors. Für OP2 ist bereits ein großflächiges Brennen der Spraykeulen feststellbar und die einzelnen Flammenfronten beginnen sich bereits zwischen den Spraykeulen zu vereinigen. Der höhere Dieselanteil von 20% führt für OP3 zu einer höheren Eindringtiefe der Spraykeulen, welche in einem weiten Bereich entlang der äußeren Sprayränder brennen. Bei 715 °KW ist für OP1 der gesamte Spraybereich entflammt und bildet eine zusammenhängende Flammenfront, die beginnt sich im Brennraum auszubreiten. Gleiches ist für OP2 zu beobachten, wobei die Flammenfront aufgrund der größeren Dieselmenge bereits deutlich weiter in den Brennraum eindringt. Für OP3 ist ein großflächiges Brennen der Spraykeulen beobachtbar und die einzelnen Flammenfronten beginnen sich zu vereinigen. Nachfolgend ist am oberen Totpunkt in allen drei Betriebspunkten eine zusammenhängende Flammenfront vorhanden, die sich durch das magere Brenngas-Luft-Gemisch ausbreitet. Zehn Grad Kurbelwinkel nach dem oberen Totpunkt, bei 730 °KW, ist eine deutliche Expansion der Flammenfront für OP1 feststellbar. Diese rasche Expansion kann als Ursache für den in Abbildung 6.4a beobachteten steilen Druckanstieg ausgemacht werden. Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten kann in dem im Vergleich zu den anderen beiden Betriebspunkten fetteren Hintergrundgemisch gefunden werden. Die daraus resultierende höhere laminare Flammengeschwindigkeit resultiert in Kombination mit einem hohen Turbulenzniveau in einer beschleunigten Umsetzung des Gemisches in der Kolbenmulde. Dieser Effekt wird durch ein zusätzliches Aufheizen des Gemisches in der Kolbenmulde durch die Dieselverbrennung verstärkt. Zu diesem Zeitpunkt ist durch die größeren Dieselmengen in OP2 und OP3 bereits die gesamte Kolbenmulde entflammt und die Flammenfront beginnt in den Quetschspalt überzutreten. Bei 740 °KW ist für alle drei Betriebspunkte ein Großteil des Brennraums entflammt und somit ein Großteil des Kraftstoffes umgesetzt.

### 6.4.2 Emissionen

Im Folgenden werden die bei der DF-Verbrennung auftretenden Emissionen näher beleuchtet. Der Fokus liegt dabei auf der Vorhersage der Stickoxidbildung und deren Lokalisierung. Die Entstehung der Stickoxide wurde, wie bereits beschrieben, mit einem Ansatz auf Basis der thermischen Stickoxidbildung nach Zeldovich in der Simulation berücksichtigt. Zur Validierung der Simulationsergebnisse stehen Messungen der Stickoxidkonzentrationen im Abgasmassenstrom zur Verfügung. Abbildung 6.8 stellt die simulierten und die gemessenen Stickoxidmassenströme der drei untersuchten Betriebspunkte gegenüber.



Abbildung 6.8: Gemessene und simulierte NO-Massenströme für die drei untersuchten Betriebspunkte.

Die mit dem Dieselanteil ansteigenden Stickoxidemissionen werden von der Simulation qualitativ korrekt wiedergegeben, zeigen quantitativ aber leichte Abweichungen. Für OP3 mit 20% energetischem Dieselanteil fallen die Emissionen geringer aus als für OP2, da hier eine hohe AGR-Rate von 20,5% eingesetzt wird. Diese führt zu einer Erhöhung der Wärmekapazität des Arbeitsgases und somit zu einem Absinken der Spitzentemperaturen, welche für die Stickoxidbildung entscheidend sind. Die AGR stellt eine weitverbreitete Methode zur Reduktion der Stickoxidemissionen dar [2, 30]. Der Effekt der AGR auf die Stickoxidbildung wird von dem Simulationsmodell korrekt wiedergegeben. Da es sich bei den experimentellen Daten um Mittelwerte mehrerer Hundert Motorzyklen handelt, muss für den Abgleich mit den Simulationsdaten berücksichtigt werden, dass gerade für OP1 und OP3 nur eine sehr geringe Anzahl an Zyklen für die Mittelwertbildung zur Verfügung steht. Vereinzelt auftretende sehr schnell oder langsam brennende Zyklen, die aufgrund der unterschiedlichen Brennraumtemperaturen abweichende Stickoxidemissionen aufweisen, werden somit nur unzureichend berücksichtigt. Die Simulationsergebnisse ermöglichen einen Einblick in die Entstehungsorte der Stickoxide im Brennraum. Hierzu zeigt Abbildung 6.9 Isoflächen des Stickoxidmassenbruchs im Zylinder zu unterschiedlichen Zeitpunkten während der Verbrennung für die drei untersuchten Betriebspunkte. Dabei wurden die drei repräsentativen Zyklen mit mittlerer Brenngeschwindigkeit ausgewählt, welche bereits zur Darstellung der Flammenausbreitung in Abbildung 6.7 verwendet wurden. Bei 710 °KW ist in allen drei Betriebspunkten die Zündung erfolgt, wobei nur für OP2 eine geringe Stickoxidbildung im Zentrum der Kolbenmulde feststellbar ist, da dieser Betriebspunkt aufgrund des früheren SOI bereits eine größere Flammenfront aufweist. OP1 zeigt ab 715 °KW ebenso eine Stickoxidbildung im zentralen Bereich der Kolbenmulde, wohingegen für OP3 trotz eines signifikant brennenden Bereichs keine Stickoxide lokalisiert werden können. Erst ab dem oberen Totpunkt, bei 720 °KW, ist eine geringfügige Emissionsbildung feststellbar.



Abbildung 6.9: Isoflächen des NO-Massenbruchs zu unterschiedlichen Zeitpunkten um den oberen Totpunkt für die drei untersuchten Betriebspunkte.

Diese Beobachtung lässt sich zum einen auf die hohe AGR-Rate zurückführen und liegt zum anderen in der Abkühlung durch die Verdampfung größerer Mengen Dieselkraftstoff im Bereich der Spraykeulen begründet. Dieses Phänomen wird bei 730 °KW deutlich. Hier lassen sich für OP3 zwar signifikante Mengen Stickoxid lokalisieren, diese befinden sich jedoch im äußeren Bereich der Kolbenmulde. Im Zentrum der Kolbenmulde lassen sich hier kaum Stickoxide nachweisen, wohingegen für die anderen beiden Betriebspunkte größere Mengen in diesem Bereich ausgemacht werden können. Dies lässt sich ebenso bei 740 °KW beobachten, wobei hier bereits ein Großteil des Kraftstoffes umgesetzt ist. Einen weiteren Einflussfaktor auf die hauptsächlich auf den Randbereich der Mulde konzentrierte Stickoxidbildung stellt der Strahlimpuls der Spraykeulen dar. Dieser ist im Falle von OP3 durch die höhere Dieselmenge deutlich ausgeprägter und drückt die Dieselflammen in Richtung des äußeren Bereichs der Mulde.

Die höchste Konzentration an Stickoxiden ist für OP2 feststellbar und verteilt sich in der Kolbenmulde. Im Quetschsplat und in dem Bereich der Kolbenmulde die nicht von den Dieselstrahlen erfasst wurden sind kaum Stickoxide feststellbar, da hier die magere Gasverbrennung dominierend ist. Deutlich wird dies bei der Betrachtung von OP1, da sich die Stickoxide hier aufgrund der sehr kurzen Dieseleinspritzung, die nur eine geringe Eindringtiefe aufweist, auf das Zentrum des Brennraums beschränken.

Zusätzlich zur Lokalisierung der Entstehungsorte der Stickoxide stellt der Einfluss der zyklischen Schwankungen auf die Stickoxidbildung eine wichtige Information für die Brennverfahrensentwicklung dar. Abbildung 6.10 stellt die aus den einzelnen Simulationszyklen berechneten Stickoxidmassenströme im Vergleich zu den Mittelwerten der Messungen und der Simulationen dar. Hierbei zeigt sich eine ausgeprägte Schwankungsbreite der Stickoxidemissionen der Einzelzyklen. Einzelne schnell brennende Zyklen verursachen deutlich erhöhte Stickoxidemissionen wie anhand der drei Ausreißer-Zyklen 12, 18 und 23 zu erkennen ist. Für sehr langsam brennende Zyklen sind deutlich niedrigere Stickoxidemissionen feststellbar. Die Beobachtungen legen nahe, das eine repräsentative Anzahl an Zyklen erforderlich ist, um das Streuband der Messungen hinreichend abbilden zu können.



Abbildung 6.10: Gemessener und simulierter NO-Massenstrom mit detaillierter Auflistung der einzelnen Zyklen für OP2.

### 6.4.3 Analyse des Strömungsfeldes

Im Folgenden wird das nach dem Abschluss des Ladungswechsels vorliegende Strömungsfeld eines ausgewählten Betriebspunktes näher untersucht. Hierfür wurde OP2 herangezogen, da für diesen eine statistisch signifikante Anzahl an Motorzyklen berechnet wurde. Für eine Betrachtung der Schwankungsgrößen der Strömung sollten mindestens 25 Zyklen vorliegen, wohingegen zur Analyse der Mittelwerte bereits 10 Zyklen als ausreichend erachtet werden können [90]. Zur Minimierung statistischer Fehler wird von den Autoren in [16] sogar eine Zahl von 50 Zyklen für die Schwankungsgrößen und 25 Zyklen für die Mittelwerte empfohlen. Die in dieser Arbeit berechnete Anzahl von 25 Zyklen stellt somit einen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand dar.

Eine detaillierte Validierung des berechneten Strömungsfeldes würde Messdaten aus einem optisch Zugänglichen Motor erfordern. Da diese hier nicht zur Verfügung stehen, wurde eine RANS Simulation durchgeführt und den Mittelwerten der 25 LES Zyklen gegenübergestellt, um die Qualität und die Vorteile der LES bei der Beschreibung des turbulenten Strömungsfeldes zu untersuchen.

Eine wichtige Strömungsgröße im Bereich selbstzündender Brennverfahren ist durch die Drallintensität gegeben. Die Drallströmung unterstützt dabei die Gemischaufbereitung und die Flammenausbreitung in der Kolbenmulde. Abbildung 6.11 zeigt die für die RANS und LES Simulationen ausgewertete Drallintensität. Zusätzlich zu den Einzelzyklen ist der Mittelwert der LES farbig hervorgehoben dargestellt. Die Drallströmung bewegt sich hierbei in einem Bereich von 950 1/min bis 1150 1/min, wobei mittels der Motordrehzahl von 1800 1/min die Drallzahl als Verhältnis der beiden Größen berechnet werden kann. Es ergeben sich Werte im Bereich von 0,5 bis 0,75, die im Vergleich zu konventionellen Dieselmotoren als eher gering eingestuft werden können. Die LES Simulationen zeigen ausgehend von dem Schließen der Einlassventile (IVC) über einen weiten Bereich der Kompression einen relativ konstanten Verlauf, bevor es in der Nähe des oberen Totpunktes durch die einsetzende Quetschströmung zu einem Anstieg kommt. Für die RANS Simulation ist ein deutlich höherer Wert nach IVC feststellbar, der im oberen Bereich des Streubandes der LES zum liegen kommt. Über die Kompression nimmt der Drall jedoch deutlich ab, bevor nahe des oberen Totpunktes der Mittelwert der LES erreicht wird. Dieses Verhalten lässt sich auf den dissipativen Charakter der RANS zurückführen. Der durch die Quetschströmung bedingte Anstieg wird auch von der RANS erfasst.



Abbildung 6.11: Drall im Zylinder während der Kompression berechnet aus der RANS Simulation und den LES Einzelzyklen.

Eine detailliertere Untersuchung der Strömung im Brennraum kann anhand der berechneten Strömungsfelder erfolgen. Abbildung 6.12 stellt die Geschwindigkeitsfelder der RANS und der LES zu unterschiedlichen Zeitpunkten während der Kompression auf einer Schnittebene durch die Zylinderachse gegenüber. Für die LES ist ein repräsentativer Einzelzyklus und der Mittelwert aus den 25 Einzelzyklen dargestellt. Während der einzelne LES Zyklus kaum eine Ähnlichkeit mit dem RANS Ergebnis aufweist, zeigt sich der Effekt der Ensemble-Mittelung deutlich. Der Mittelwert zeigt hierbei eine gute Übereinstimmung mit der RANS Lösung für alle drei betrachteten Zeitpunkte. Auffällig ist dabei das Gebiet moderater Geschwindigkeiten im mittleren oberen Bereich des Zylinders, welches eine gute Übereinstimmung aufweist. Die niedrigen Geschwindigkeiten in diesem Bereich können unter anderem auf einen geringen Einfluss der Drallströmung zurückgeführt werden.



Abbildung 6.12: Strömungsgeschwindigkeit im Brennraum für die RANS und die LES Simulation zu drei unterschiedlichen Zeitpunkten während der Kompression.

Ein weiterer wichtiger Parameter der Zylinderströmung ist durch die TKE gegeben. Die TKE im Zylinder entsteht zunächst während des Einströmvorgangs, da es hier zu sehr hohen Strömungsgeschwindigkeiten und hohen Gradienten über die Einlassventile kommt. Des Weiteren sind die Quetschströmung nahe des oberen Totpunktes und besonders die Piloteinspritzung Quellen der Turbulenz. Die TKE hat einen großen Einfluss auf die Gemischbildung und den turbulenten Flammenfortschritt, wobei eine hohe TKE zunächst eine Beschleunigung dieser Vorgänge zur Folge hat. Abbildung 6.13a zeigt den Verlauf der TKE im Zylinder während der Kompression für die RANS Simulation und den Mittelwert aus den LES Zyklen. Während die TKE in der RANS einen Ausgabewert des Turbulenzmodells darstellt, muss sie für die LES erst aus den Strömungsfeldern der Einzelzyklen berechnet werden. Hierbei wurde die in [29,91] eingesetzte Methodik, die TKE aus dem Mittelwert der Geschwindigkeitsfluktuationen zu berechnen, eingesetzt. Die Geschwindigkeitsfluktuationen der Einzelzyklen werden dabei mit Hilfe des mittleren Strömungsfeldes aller 25 Zyklen berechnet. Bei dieser Methode ist zu beachten, dass zyklische Schwankungen des mittleren Strömungsfeldes teilweise der TKE zugerechnet werden. Die TKE wird somit geringfügig überschätzt. Die Methode stellt jedoch einen guten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand dar. Eine Übersicht über die vorhanden Ansätze zur Ableitung der TKE aus vorhanden Strömungsfeldern wird in [92] gegeben.



Abbildung 6.13: (a) Verlauf der TKE während der Kompression für RANS und LES; (b) Verlauf der integralen Länge und der integralen Zeit berechnet aus der RANS während der Kompression.

Die TKE im Zylinder nimmt über die Kompression zunächst ab, da die während der Einlassphase erzeugten Wirbelstrukturen teilweise dissipieren. Beim Annähern des Kolbens an den oberen Totpunkt kommt es darauf wieder zu einem Anstieg der TKE, welcher vor allem auf die Quetschströmung zurückzuführen ist. Kurz nach Einlassschluss bei 525 °KW ergibt sich aus der LES eine höhere Turbulenz als aus der RANS. Dieses Verhalten wurde auch in [91] beobachtet und liegt unter anderem an einer Unterschätzung der Turbulenzproduktion im Ventilspalt durch die RANS Simulation. Des Weiteren kann es durch die vereinfachte Turbulenzbeschreibung der RANS zu einer Unterschätzung der durch die Scherströmung im Zylinder erzeugten Turbulenz kommen. Die LES ermöglicht hier eine deutlich genauere Abbildung der Turbulenz, da die großen Energie-tragenden Wirbelstrukturen direkt gelöst werden. Während der Kompression gleichen sich die Verläufe der RANS und der LES langsam an. Ab einem Kurbelwinkel von 630 °KW werden von beiden Verfahren ähnliche Werte für die TKE berechnet. Für den Fall der LES ist zusätzlich der Verlauf der Summe der aus den mittleren Geschwindigkeitsfluktuationen berechneten TKE und der SGS TKE dargestellt. Dabei zeigt sich, dass bereits ein sehr großer Anteil der TKE von über 90% durch die berechneten Geschwindigkeitsfluktuationen wiedergegeben wird und nur ein sehr kleiner Anteil vom SGS Modell modelliert werden muss. Dies entspricht dem von Pope [50] vorgeschlagenen Kriterium für die minimale Auflösung von 80% der TKE durch die LES.

Zusätzlich zur TKE stellen die integrale Längen- und Zeitskala weitere charakteristische Größen der turbulenten Strömung dar. Als integrale Skalen werden große Wirbelstrukturen bezeichnet, auf denen ein Großteil der TKE produziert wird. Diese sind durch charakteristische geometrische Abmessungen der Strömung geprägt. Abbildung 6.13b zeigt den aus der RANS Simulation berechneten Verlauf der integralen Länge und der integralen Zeitskala während der Kompression. Kurz nach dem Schließen der Einlassventile bei 525 °KW liegt die integrale Länge bei 12,8 mm und entspricht somit ungefähr dem maximalen Hub der Einlassventile. Dies lässt sich darauf zurückführen, dass der Luftstrom durch die Einlassventile eine sehr hohe kinetische Energie aufweist und somit die Strömung im Zylinder maßgeblich beeinflusst [41]. Die integrale Länge steigt nachfolgend bis ca. zur Hälfte der Kompression bei 630° KW an und fällt danach wieder steil bis auf einen Wert von 11,3 mm bei 700 °KW ab. In diesem Bereich kann der Abstand vom Kolben zum Zylinderkopf als charakteristische Abmessung gesehen werden. Heywood [41] schlägt hier einen Faktor von 0,22 vor, der mit diesem Abstand multipliziert wird, um die integrale Länge abzuschätzen. Daraus ergibt sich ein Wert von 8,8 mm, der in der Nähe der aus der RANS berechneten 11,3 mm liegt.

Die Simulationen liefern darüber hinaus Informationen über die Verteilung der TKE im Brennraum, die in Abbildung 6.14 auf einer Schnittebene durch die Zylinderachse für RANS und LES dargestellt ist. Auf der linken Seite nach dem ersten Drittel der Kompression zeigt sich noch eine deutlich höhere TKE im Falle der LES, erkennbar an den großflächigen roten Bereichen. Die TKE konzentriert sich dabei auf den mittleren Bereich nahe der Zylinderachse. Im zweiten Drittel der Kompression, bei 70 °KW vor dem oberen Totpunkt, gleicht sich das Turbulenzniveau der LES dem der RANS Lösung an. Die räumliche Verteilung zeigt dennoch gewisse Abweichungen. Dies zeigt sich auch kurz vor Einspritzbeginn, 20 °KW vor dem oberen Totpunkt, wobei hier die Zonen höchster Turbulenz gut übereinstimmen. Der Vergleich der räumlichen Verteilung der TKE zeigt die Unterschiede in den beiden Ansätzen zur Modellierung der Turbulenz auf. Die LES liefert hier deutlich detaillierte Ergebnisse bezüglich der Turbulenzstrukturen und bietet somit eine deutliche Verbesserung im Hinblick auf die Vorhersage des turbulenten Strömungsfeldes.



Abbildung 6.14: TKE im Brennraum für die RANS und die LES Simulation zu drei unterschiedlichen Zeitpunkten während der Kompression.

# 7 Detaillierte Analyse der turbulenten Dual-Fuel-Verbrennung

In diesem Kapitel wird auf Basis der Simulationsergebnisse von OP2 eine detaillierte Analyse der bei der DF-Verbrennung auftretenden Phänomene durchgeführt. Zunächst wird die Charakteristik der Wärmefreisetzung im Hinblick auf die Anteile der Diesel- und der Gasverbrennung untersucht. Darauffolgend wird eine Methodik vorgestellt, um die turbulenten Verbrennungsregime zu analysieren und eine Einordnung der unterschiedlichen Verbrennungsphasen zu ermöglichen. Abschließend wird die Herkunft zyklischer Schwankungen näher beleuchtet.

## 7.1 Charakteristik der Wärmefreisetzung

Der Ablauf der DF-Verbrennung ist für OP2 mit einem Dieselanteil von 5% in Abbildung 7.1 anhand der Temperatur und des Äquivalenzverhältnisses auf kegelförmigen Schnittebenen durch die Spraykeulen dargestellt. Für die Darstellung wurde ein repräsentativer Einzelzyklus ausgewählt, der eine mittlere Brenngeschwindigkeit aufweist. Zusätzlich zur Temperatur und dem Äquivalenzverhältnis ist die Reaktionsfortschrittsvariable (RFV) als Isofläche mit einem Wert von 0,5 dargestellt. Die RFV beschreibt das Verhältnis der vorliegenden Verbrennungsprodukte zu den theoretisch maximal möglichen Verbrennungsprodukten. Der Wert von 0,5 beschreibt in einer gewissen Näherung die aktuelle Position der Flammenfront.

Die Zündung findet bei 706 °KW zunächst im linken unteren Bereich statt, erkennbar an den Bereichen, die eine Temperatur oberhalb von 1500 K aufweisen. Die Zündung ist dabei auf drei der sieben Spraykeulen begrenzt. Eine mögliche Ursache für dieses Verhalten erschließt sich bei der Betrachtung des Äquivalenzverhältnisses, welches im rechten Teil der Kolbenmulde auf eine höhere Durchmischung hindeutet. Durch die Interaktion der Spraykeulen mit der turbulenten Strömung kann es hier zu einem schnelleren Stofftransport kommen, welcher zum Abtransport der während des Zündverzuges entstehenden Radikale führt, kommen. Hierdurch wird der Zündverzug in diesen Bereichen verlängert. Bei 710 °KW sind alle Spraykeulen entzündet, wobei auf der linken Seite bereits erste Flammenstrukturen zwischen den Spraykeulen feststellbar sind. Die Verbrennung beschränkt sich zu diesem Zeitpunkt aber größtenteils auf separate Flammenstrukturen im Bereich der einzelnen Spraykeulen. Darauffolgend zeigt sich am oberen Totpunkt eine zusammenhängende Flammenfront, die bereits einen weiten Bereich der Kolbenmulde erfasst. Hier kommt es nach einem Entzünden des Gasgemisches zwischen den Spraykeulen zu einer hauptsächlich durch die turbulente Gasverbrennung geprägten Flammenausbreitung. Bei 730 °KW ist der gesamte Bereich der Kolbenmulde erfasst und die Flammenfront beginnt in den Quetschspalt überzutreten, deutlich erkennbar an der Isofläche

der RFV.



Abbildung 7.1: Verteilung der Temperatur, des Äquivalenzverhältnisses und der RFV auf einem Kegelschnitt durch die Spraykeulen zu drei unterschiedlichen Zeitpunkten um den oberen Totpunkt.

Ein bisher nicht im Detail betrachteter Vorgang im Ablauf der DF-Verbrennung, der Übergang von der Diesel- in die Gasverbrennung, soll nun näher analysiert werden. Dafür wurde eine Auswertung der Anteile der Diesel- und der Gasverbrennung am Verlauf der Wärmefreisetzungsrate durchgeführt. Abbildung 7.2 zeigt die Wärmefreisetzungsrate und die kumulierte Wärmefreisetzungsrate aufgeteilt in Diesel- und Gasverbrennung. Die Wärmefreisetzungsraten wurden dabei aus den einzelnen LES Zyklen extrahiert und spiegeln die vom Verbrennungsmodell ausgegeben Werte wieder. Die so berechneten Werte sind nicht direkt mit den anhand der Zylinderdruckverläufe berechneten Werte, die zuvor zum Abgleich mit den Messdaten eingesetzt wurden, vergleichbar. Zusätzlich zu den Werten der Einzelzyklen sind die Mittelwerte anhand der dicken Linien dargestellt. Die Aufteilung der Wärmefreisetzung in die Dieselund die Gasverbrennung erfolgte anhand eines Grenzwertes für das Äquivalenzverhältnis von 0,6. Dieser Wert liegt leicht über dem Äquivalenzverhältnis des Brenngas-Luft-Gemisches und ermöglicht somit eine klare Abtrennung der Bereiche der Hintergrundmischung und des Pilotstrahls. Hierbei gilt es zu berücksichtigen, dass die für den Pilotstrahl berechnete Wärmefreisetzung etwas zu hoch ausfällt, da das bei der Einspritzung eingesaugte Brenngas dem Pilotstrahl zugerechnet wird. Diese Vereinfachung ist jedoch aufgrund der Tatsache, dass im Verbrennungsmodell keine zwei Kraftstoffe berücksichtigt werden, erforderlich.



Abbildung 7.2: (a) Anteile der Diesel- und der Gasverbrennung an der simulierten Wärmefreisetzungsrate; (b) Anteile der Diesel- und der Gasverbrennung an der kumulierten Wärmefreisetzung.

Zu Beginn der Verbrennung ist ein steiler Anstieg der Wärmefreisetzungsrate feststellbar, der sich auf die Zündung der Pilotstrahlen zurückführen lässt. Dabei wird der während des Zündverzuges aufbereitete Pilotkraftstoff und das in den Spraykeulen vorhandene Brenngas schlagartig umgesetzt. Der Anteil des Brenngases ist dabei von den Randbedingungen der Einspritzung, der Dichte des Arbeitsgases im Brennraum und der Brenngaskonzentration abhängig [93]. Kurz nach dem ersten Anstieg der blauen Dieselkurve, steigt auch die in Rot dargestellte Wärmefreisetzung in der Gasphase an und erreicht schnell das Niveau der Dieselverbrennung. Dies deutet daraufhin, dass ein signifikanter Anteil Brenngas in der Nähe der Spraykeulen in dieser Phase mit umgesetzt wird. Darauffolgend ist ein Rückgang der Dieselkurve feststellbar, welcher den Übergang in die diffusive Dieselverbrennung charakterisiert. Die Verbrennung des Pilotkraftstoffes trägt hier jedoch immer noch in einem großen Ausmaß zur Summenkurve bei. Der Gradient der Gasverbrennung zeigt in diesem Bereich ebenso einen Rückgang, wodurch es zur Abflachung der Wärmefreisetzungsrate kommt. Dieser Bereich kann als Übergangsbereich gesehen werden, in dem die Zwischenräume zwischen den Spraykeulen durch eine Ausdehnung der Flammenfront in diese Bereiche aufgeheizt werden

und es daraufhin zu einem Zünden dieser Zone kommt. Daraufhin beginnen sich die einzelnen Flammenfronten zu einer zusammenhängenden Flammenfront zu vereinigen, die sich durch die Interaktion mit der turbulenten Strömung rasch ausdehnt. Dies zeigt sich an einem erneuten Anstieg der Wärmefreisetzungsrate der Gasverbrennung bis zu einem Maximum in der Nähe von 726 °KW. Danach kommt es zu einem Rückgang der Wärmefreisetzung, da die Flammenfront einen Großteil des Brennraums bereits erfasst hat und die Expansion beginnt. Diese Charakteristik stimmt gut mit den experimentellen Beobachtungen in [94] überein. Der Beginn der DF-Verbrennung und der Übergang in die turbulente Gasverbrennung stellen komplexe Prozesse dar, die anhand einer detaillierten Betrachtung der zur Wärmefreisetzung beitragenden Regime genauer analysiert werden können. Zu diesem Zweck zeigt Abbildung 7.3 eine Auswertung der Bereiche des Äquivalenzverhältnisses, die zu unterschiedlichen Zeitpunkten an der Verbrennung beteiligt sind. Die Auftragung auf Basis einer volumenbasierten Wahrscheinlichkeitsverteilung beinhaltet die Mittelwerte der 25 berechneten Zyklen, wobei die Auswertung der Regime vor der Mittelung durchgeführt wurde. Dabei wurde der Bereich hinter der Flammenfront mit einer RFV von 0,9 bis 0,95 betrachtet, da in dieser Zone bereits ein Großteil des Kraftstoffes umgesetzt ist und somit die höchsten Temperaturen während der Verbrennung auftreten. Die rot eingefärbten Bereiche charakterisieren Regime in denen ein Großteil des Volumens der ausgewerteten Zellen zu finden ist. Zum Zündzeitpunkt bei 705 °KW ist ein weiter Bereich von sehr mageren bis sehr fetten Gemischen an der Verbrennung beteiligt. Dies lässt sich durch die schlagartige Umsetzung des vorgemischten Pilotkraftstoffes unter hoher Wärmefreisetzung erklären, die weite Bereiche der äußeren Ränder der Spraykeulen entzündet. Danach verschiebt sich die Verbrennung in Richtung des stöchiometrischen und mageren Bereichs. Dies ist auf eine weitere Durchmischung von Luft und Kraftstoff im Pilotstrahl und durch eine Entzündung des mageren Brenngas-Luft-Gemisches in der Nähe der Spraykeulen zurückzuführen. Bei 707 °KW trägt die magere Gasverbrennung, gekennzeichnet durch die gestrichelte vertikale Linie mit einem Äquivalenzverhältnis von 0.55. bereits in signifikantem Ausmaß zur Wärmefreisetzung bei. Diese Beobachtung deckt sich sehr gut mit der Auswertung der Wärmefreisetzungsraten in Abbildung 7.2. Bei 710 °KW zeigt sich eine weitere Verschiebung in Richtung der mageren Gasverbrennung, wobei zu beachten ist, dass die Dieselverbrennung noch zu ca. einem Drittel zur Gesamtwärmefreisetzung beiträgt. Dieser Bereich ist durch das langsame Ausbilden einer geschlossen Flammenfront geprägt. Darauffolgend, bei 715 °KW und 720 °KW, nimmt die Gasverbrennung rasch zu und es liegt nur noch ein kleiner Anteil oberhalb des Äquivalenzverhältnisses von 0.55 vor. Das schnelle Verschieben der Verbrennung weg vom stöchiometrischen in den mageren Bereich ist der Grund für die deutlich reduzierten Stickoxidemissionen bei der DF-Verbrennung. Die Stickoxidbildung läuft relativ langsam ab und benötigt hohe Temperaturen, wie sie im stöchiometrischen Bereich über einen längeren Zeitraum gegeben sind. Dies ist bei dem



gegebenen Verbrennungsablauf nur kurzzeitig der Fall.

Abbildung 7.3: Volumenbasierte Wahrscheinlichkeitsverteilung der Temperatur und des Äquivalenzverhältnisses in der Flammenfront zu unterschiedlichen Zeitpunkten während der Verbrennung.

## 7.2 Untersuchung der Verbrennungsregime im Borghi-Peters-Diagramm

Im Folgenden werden die bei der DF-Verbrennung auftretenden turbulenten Flammenstrukturen näher untersucht. Hierzu wird das bereits in Kapitel 3 vorgestellte Regimediagramm nach Peters [63] eingesetzt. Da es sich bei der DF-Verbrennung um einen sehr inhomogenen Prozess handelt, wurde eine Methodik entwickelt, um die Werte für die Auftragung im Borghi-Peters-Diagramm aus den einzelnen LES Zyklen zu extrahieren. Hierbei wurde der Bereich vor der Flammenfront, begrenzt durch eine RFV von 0,1 bis 0,5, für jeden einzelnen Zyklus ausgewertet und nachfolgend gemittelt. Die integrale Länge, welche für die Auftragung benötigt wird, wurde aus der RANS Lösung, welche im vorherigen Kapitel zur Analyse des Strömungsfeldes im Zylinder herangezogen wurde, ermittelt, da sich diese nicht ohne weiteres aus der LES ableiten lässt. Für die Berechnung der laminaren Flammenfrontdicke wurde anstatt des Diffusionskoeffizienten die kinematische Viskosität eingesetzt, was unter Annahme einer Schmidt-Zahl von eins möglich ist. Die gemittelten Werte sind in Abbildung 7.4a für unterschiedliche Zeitpunkte während der Verbrennung aufgetragen. Zur Verdeutlichung der angewendeten Auswertemethodik sind die Isolinien der RFV, beginnend mit der weißen Linie mit einem Wert von 0,1 bis zur schwarzen Linie mit einem Wert von 0,5, auf einem Kegelschnitt durch die Spraykeulen bei 710 °KW in Abbildung 7.4b dargestellt. Auf diesem Schnitt ist zusätzlich die Verteilung des Äquivalenzverhältnisses zur Visualisierung der Spraykeulen dargestellt.



Abbildung 7.4: (a) Turbulente Verbrennungsregime der ensemble-gemittelten LES Ergebnisse aufgetragen im Borghi-Peters Diagramm zu unterschiedlichen Zeitpunkten;
(b) Verteilung des Äquivalenzverhältnisses mit Isolinien der RFV, die den Auswertebereich für das Borghi-Peters Diagramm umfassen, auf einem Kegelschnitt durch die Spraykeulen.

Zu Beginn der Verbrennung bei 706 °KW befindet sich die Flamme nahe der  $Ka_{\delta} = 1$  Linie, welche die obere Grenze des von Peters eingeführten Bereichs der dünnen Reaktionszonen darstellt. Oberhalb dieser Linie ist mit einem signifikanten Einfluss der TCI zu rechnen, da die kleinsten Wirbelstrukturen in die innere Reaktionszone der Flamme eindringen können. Die Lage zu diesem Zeitpunkt ist hauptsächlich ein Resultat der hohen Turbulenz, die durch die Einspritzung erzeugt wird. Nachfolgend bewegt sich die Flamme im Borghi-Peters-Diagramm nach unten. Dies ist auf einen Übergang in die Gasverbrennung zurückzuführen, die durch die Turbulenz der Zylinderströmung geprägt ist. In dem Bereich von 715 °KW bis 740 °KW ähnelt der Verlauf der DF-Verbrennung dem von Linse [69] beobachteten Verlauf einer Ottoverbrennung. Die DF-Verbrennung ist im Vergleich dazu aber im Borghi-Peters-Diagramm nach rechts oben verschoben. Dies ist zum einen auf das hohe Turbulenzniveau in Kombination mit niedrigen laminaren Flammengeschwindigkeiten im mageren Brenngasgemisch und zum anderen auf die hohen Zylinderdrücke, die eine geringe laminare Flammenfrontdicke zur Folge haben, zurückzuführen. Ab einem Kurbelwinkel von 725 °KW bewegt sich die Flamme nahe der Ka = 1 Linie. Unterhalb dieser Linie können die kleinsten Wirbelstrukturen nicht mehr in die Flamme eindringen. Die DF-Verbrennung bewegt sich in einem weiten Bereich der dünnen Reaktionszonen und ist somit durch eine Interaktion mit den kleinsten Strukturen der turbulenten Strömung geprägt. Diese dringen in die Flammenfront ein und beeinflussen die dort vorliegenden Temperatur- und Konzentrationsgradienten.

Der Umfang des Bereichs, der von der DF-Verbrennung im Regimediagramm eingenommen wird, wird durch eine Auswertung der Damköhler- (Da) und der Karlovitz-Zahl (Ka) deutlich. Der Verlauf der beiden Kennzahlen ist in Abbildung 7.5 in Abhängigkeit des Kurbelwinkels dargestellt.



Abbildung 7.5: Verlauf der Damköhler-Zahl (Da) und der Karlovitz-Zahl (Ka) während der Verbrennung.

Die Damköhler-Zahl steigt über die Verbrennung um eine Größenordnung an, wodurch der steigende Einfluss der Turbulenz auf die Flammenausbreitung deutlich wird. Dies lässt sich durch den Übergang in die Gasverbrennung erklären, die durch den hohen Abmagerungsgrad relativ geringe Flammengeschwindigkeiten aufweist und somit hauptsächlich durch die Turbulenz vorangetrieben wird. Für die Karlovitz-Zahl lässt sich ein Abfallen um eine Größenordnung über die Verbrennung feststellen, wodurch der geringer werdende Einfluss der kleinsten Wirbelstrukturen auf die Transportprozesse in der Flammenfront deutlich wird. Dies lässt sich hauptsächlich durch den Druckanstieg im Zylinder während der Verbrennung erklären, der eine immer dünner werdende Flammenfront zu Folge hat.

Bisher wurden zu den untersuchten Zeitpunkten während der Verbrennung nur die über die Flammenfront gemittelten Werte analysiert. Eine detaillierte Auswertung der Verteilung der einzelnen Regime in der Flammenfront zu einem definierten Zeitpunkt kann hier Aufschluss über den Umfang der beteiligten Prozesse geben. Abbildung 7.6 zeigt hierzu eine volumenbasierte Wahrscheinlichkeitsverteilung der einzelnen Regime in der Flammenfront zu unterschiedlichen Zeitpunkten. Kurz nach der Zündung, bei 706 °KW, wird ein weiter Bereich unterschiedlicher Verbrennungsregime von der Flammenfront eingenommen. Ein großer Teil kommt dabei im Bereich oberhalb der  $Ka_{\delta} = 1$  Linie zum liegen. Dies deutet auf einen signifikanten Einfluss der TCI auf einen Teil der Flammenfront hin. Dieser Teil kann der schlagartigen Zündung und der diffusiven Verbrennung des Pilotkraftstoffes zugeordnet werden. Dies lässt die Schlussfolgerung zu, dass eine Verbesserung der Modellierung dieser Vorgänge durch die Berücksichtigung der TCI möglich ist. Ein großer Teil der Flamme bewegt sich kurz nach der Zündung jedoch auch im Bereich der dünnen Reaktionszonen, in der TCI keine große Rolle spielt. Diese Bereiche sind auf die bereits eingeleitete Gasverbrennung nahe der Spraykeulen zurückzuführen. Darauffolgend verschiebt sich die Flammenfront bei 710 °KW vollständig in den Bereich der dünnen Reaktionszonen, weist dabei jedoch immer noch eine weite Ausdehnung im Regimediagramm auf. Dieser Zeitpunkt ist durch den Übergang in die Gasverbrennung unter Bildung einer zusammenhängenden Flammenfront gekennzeichnet. In der nachfolgenden Phase, welche durch die Gasverbrennung dominiert wird, konzentriert sich der im Regimediagramm eingenommene Bereich und bewegt sich in Richtung der Ka = 1Linie. Am oberen Totpunkt liegen bereits weite Bereiche der Flammenfront unterhalb dieser Linie, wodurch sich schlussfolgern lässt, dass ein Teil der Flamme nicht mehr von den kleinsten Wirbelstrukturen beeinflusst wird. Nach dem oberen Totpunkt vergrößert sich dieser Anteil und der von der Flamme eingenommene Bereich beginnt sich nach links auszudehnen. Eine mögliche Ursache ist in der beginnenden Expansion zu finden, welche zu einer Verbreiterung der Flammenfrontdicke führt. Die in diesem Abschnitt durchgeführten Untersuchungen zeigen die Komplexität bei der Beschreibung des turbulenten Flammenfortschrittes im Falle der DF-Verbrennung auf.



Abbildung 7.6: Volumenbasierte Wahrscheinlichkeitsverteilung der turbulenten Verbrennungsregime im Bereich vor der Flammenfront zu unterschiedlichen Zeitpunkten während der Verbrennung.

### 7.3 Herkunft zyklischer Schwankungen

Im Folgenden werden die Ursachen zyklischer Schwankungen im Rahmen der DF-Verbrennung näher untersucht. Zyklische Schwankung stellen im Hinblick auf einen stabilen Motorbetrieb oft eine Problematik dar, die es zu minimieren gilt. Dabei kann es zu irregulären Verbrennungsphänomenen wie Klopfen oder Flammenlöschen kommen, die zu erhöhtem Verschleiß oder hohen Emissionen unverbrannten Brenngases führen. Im Bereich der DF-Verbrennung liegen viele mögliche Ursachen für zyklische Schwankungen vor. So kommt es, wie bereits dargelegt, für geringe Dieselmengen oft zu Schwankungen, die durch die unzureichende Reproduzierbarkeit der Einspritzung verursacht werden. Des Weiteren können Gemischinhomogenitäten eine Ursache für zyklische Schwankungen sein. In dieser Arbeit liegt der Fokus bei der Analyse der Schwankungen auf der Stochastik des turbulenten Strömungsfeldes. Aus diesem Grund wurden die Randbedingungen bei der konsekutiven Simulation der LES Zyklen konstant gehalten.

Zunächst wird die Flammenausbreitung für unterschiedlich schnell brennende Zyklen analysiert, um einen Einblick in die während der Verbrennung auftretenden Quellen für zyklische Schwankungen zu erhalten. Abbildung 7.7 stellt hierzu die Temperaturverteilung in der Kolbenmulde auf einer konischen Schnittebene durch die Spraykeulen für drei unterschiedlich schnell brennende Zyklen dar. Ein Vergleich der Zündorte bei 706 °KW zeigt bereits eine stark schwankende Ausprägung und Position der ersten Flammenstrukturen. Dabei entzünden sich zunächst nur ein Teil der Spraykeulen. Für den schnell brennenden Zyklus ist im unteren rechten Bereich der Kolbenmulde bereits eine großflächig entzündete Spraykeule feststellbar, welche bereits sehr hohe Temperaturen aufweist. Die zu diesem Zeitpunkt beobachtete Fluktuation der Zündorte ist hauptsächlich auf die Interaktion der Pilotstrahlen mit dem turbulenten Strömungsfeld zurückzuführen, wobei es zu Variationen in der Ausbreitung der Spraykeulen und somit zu unterschiedlicher Ausprägung der zündfähigen Bereiche kommt. Zum nächsten Zeitpunkt bei einem Kurbelwinkel von 710 °KW sind in den drei Zyklen alle Spraykeulen entzündet und brennen bereits großflächig. Für den schnell brennenden Zyklus zeigen sich erste Flammenstrukturen im Bereich zwischen den Spraykeulen, die zu einer Bildung einer geschlossenen Flammenfront beitragen. Dieser Bereich ist hauptsächlich durch das magere Gasgemisch geprägt, welches durch die Wärmefreisetzung der Pilotflammen schnell aufgeheizt und entzündet wird. Für den mittleren und den langsamen Zyklus ist dieser Effekt nur vereinzelt zu erkennen. Der Entzündung des Gemisches zwischen den Spraykeulen kann ein wichtiger Einfluss auf die zyklischen Schwankungen zugeordnet werden, da es hierbei zur Bildung einer geschlossenen Flammenfront kommt, welche sich nachfolgend durch den Brennraum ausbreitet. Dies wird am oberen Totpunkt bei einem Kurbelwinkel von 720 °KW deutlich, da hier im Falle des schnell brennenden Zyklus bereits ein Großteil der Kolbenmulde von den Flammenstrukturen erfasst wird. Die anderen beiden Zyklen zeigen hingegen noch

weite Bereiche unverbrannten Gemisches. Bei 730 °KW wird die Kolbenmulde für alle drei Zyklen nahezu vollständig von der Flamme erfasst. Zu diesem Zeitpunkt kommt es bereits zu einem Übertreten der Flamme in den Quetschspalt, welches in dieser Darstellung aufgrund des Schnittes durch die Spraykeulen nicht erkennbar ist.



Abbildung 7.7: Temperaturverteilung auf einem Kegelschnitt durch die Spraykeulen für drei unterschiedlich schnell brennende Zyklen zu unterschiedlichen Zeitpunkten während der Verbrennung.

Wie bereits aufgezeigt stellt die Interaktion der Pilotstrahlen mit dem turbulenten Strömungsfeld eine wichtige Quelle für zyklische Schwankungen dar. Zu diesem Zweck wurde der Einfluss der Schwankungsgrößen der Strömungsgeschwindigkeit zum Zeitpunkt der Einspritzung auf den Spitzendruck untersucht. Abbildung 7.8 zeigt den Spitzendruck in Abhängigkeit der einzelnen Komponenten der Schwankungsgrößen der Geschwindigkeitskomponenten. Für die Schwankungsgröße  $U_{rms}$  in x-Richtung lässt sich keine sehr ausgeprägte Abhängigkeit zum Spitzendruck feststellen. In y-Richtung  $(V_{rms})$  zeigt sich hingegen bereits ein gewisser Zusammenhang zwischen der Intensität der Geschwindigkeitsfluktuationen und dem Spitzendruck. Dieser Zusammenhang stellt sich in z-Richtung  $(W_{rms})$  am deutlichsten dar. Die Geschwindigkeitsfluktuationen in Richtung der Kolbenachse haben somit den höchsten Einfluss auf die Brenngeschwindigkeit und folglich den Spitzendruck. Eine Erklärung hierfür kann in dem Einfluss der Quetschströmung gefunden werden, welche die Transportprozesse und die Flammenausbreitung in der Kolbenmulde beschleunigt. Um diesen Einfluss abschließend zu klären, sind jedoch weitere Untersuchungen zum Einfluss der Quetschströmung auf die Fluktuationen der Geschwindigkeitskomponenten in der Kolbenmulde erforderlich.



Abbildung 7.8: Spitzendruck (P<sub>max</sub>) in Abhängigkeit der Brennraum-gemittelten Schwankungsgrößen der Geschwindigkeiten (a) U und (b) V parallel zum Zylinderkopf und (c) W in Richtung der Zylinderachse.

Eine weitere Möglichkeit die Ursachen zyklischer Schwankungen zu analysieren, ist durch die Auftragung im Borghi-Peters-Diagramm gegeben. Abbildung 7.9a zeigt die Mittelwerte der Flammenfronten der Einzelzyklen in Abhängigkeit des Spitzendruckes zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten im Borghi-Peters-Diagramm. Der erste Zeitpunkt repräsentiert den Zündzeitpunkt bei 706 °KW. Die Einzelzyklen sind hierbei nahe der  $Ka_{\delta} = 1$  Linie verteilt, wobei sich keine Korrelation zwischen Spitzendruck und vorliegendem Regime feststellten lässt. Dies lässt sich darauf zurückführen, dass der turbulente Flammenfortschritt hier noch keine große Rolle spielt und mögliche Schwankungen, die in dieser Phase hervorgerufen werden, eher auf die Gemischbildung zurückzuführen sind. Zum nächsten betrachteten Zeitpunkt bei 715 °KW ist die Gasverbrennung bereits dominierend und der turbulente Flammenfortschritt spielt eine entscheidende Rolle. Hier lässt sich eine klare Zuordnung der schnell brennenden Zyklen zur Lage im Regimediagramm feststellen. Der höhere Spitzendruck in diesen Zyklen kann klar einer ausgeprägteren Interaktion der turbulenten Wirbelstrukturen mit der Flammenfront zugerechnet werden. Die Interaktion ist sowohl durch eine stärkere Faltung der Flamme als auch eine Beschleunigung der Transportprozesse in der Vorwärmzone der Flamme geprägt. Dies lässt sich in Abbildung 7.9b anhand einer Auftragung der Damköhler-Zahl und der Karlovitz-Zahl in Abhängigkeit des Spitzendruckes während der Verbrennung verdeutlichen. Für die Karlovitz-Zahl ist ein klarer Zusammenhang mit dem Spitzendruck feststellbar. Sobald eine Dominanz der Gasverbrennung vorliegt, reihen sich die Zyklen mit hohem Spitzendruck im oberen Bereich des Streubandes auf. Dies verdeutlicht den Effekt der verstärken Interaktion der kleinsten Wirbelstrukturen mit der Flamme und deren Einfluss auf die Brenngeschwindigkeit. Im Falle der Damköhler-Zahl ist kein ausgeprägter Zusammenhang feststellbar.



Abbildung 7.9: (a) Auftragung der einzelnen LES Zyklen im Borghi-Peters-Diagramm in Abhängigkeit des Spitzendruckes zu zwei unterschiedlichen Zeitpunkten; (b) Verlauf der Damköhler-Zahl (Da) und der Karlovitz-Zahl (Ka) für die einzelnen LES Zyklen in Abhängigkeit des Spitzendruckes.

# 8 Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Ansatz zur Modellierung der DF-Verbrennung vorgestellt und für die Untersuchung des Brennverfahrens angewendet. Die DF-Verbrennung stellt dabei eine große Herausforderung dar, da sowohl Elemente der klassischen Diesel- als auch der Ottoverbrennung berücksichtigt werden müssen. Die Modellierung der Piloteinspritzung, die durch den ballistischen Betriebsbereich des Injektors geprägt ist, und die Interaktion der beiden Kraftstoffe während des Zündvorganges standen dabei im Fokus. Des Weiteren wurde der Ablauf der Wärmefreisetzung und des turbulenten Flammenfortschrittes mittels LES näher untersucht.

Der Ansatz zur Modellierung der Piloteinspritzung basiert auf einer Ableitung der transienten Düsenaustrittsbedingungen anhand der experimentell beobachteten Ausbreitung des Kraftstoffstrahls. Hierzu wurden vom LTT Messdaten aus einer Verbrennungsbombe zur Verfügung gestellt, die die zeitlich hoch aufgelöste Ausbreitung der Flüssig- und der Dampfphase des Sprays beinhalten. Ausgehend von diesen Daten konnte mittels eines Ansatzes der Impulserhaltung entlang der Strahlachse der transiente Verlauf der Austrittsgeschwindigkeit der Flüssigphase abgeleitet werden. Durch die Wahl eines geeigneten Tropfenspektrums in Kombination mit einem WAVE Sekundäraufbruchsmodell konnten somit geeignete Startbedingungen für die Lagrange-Phase in der Simulation definiert werden. Das Modell ermöglichte dabei eine korrekte Beschreibung der Eindringtiefen der Flüssig- und der Dampfphase für unterschiedliche Umgebungsdrücke und Temperaturen. Die eingesetzte Methodik zeigte sich als geeignet die Ausbreitung der Kraftstoffstrahlen und die Gemischbildung im ballistischen Bereich korrekt zu beschreiben.

Einen weiteren entscheidenden Faktor für den Ablauf der Verbrennung stellt die Zündung und die Ausbildung der ersten Flammenstrukturen dar, da sie den weiteren Ablauf der Verbrennung beeinflussen. Hierzu wurde die Zündung der Pilotstrahlen mittels eines speziell für die DF-Verbrennung entwickelten Reaktionsmechanismus untersucht. Die Simulationen wurden zunächst in Lufthintergrund durchgeführt und mit den Ergebnissen der OH\*-Messungen aus der Verbrennungsbombe abgeglichen. Es zeigte sich eine gute Übereinstimmung der Zündverzugszeiten für unterschiedliche Umgebungsbedingungen. Die Reduktion der Zündverzugszeit mit steigendem Druck und steigender Temperatur konnte dabei korrekt wiedergegeben werden. Zusätzlich zeigten die Simulationsergebnisse den in der Messung beobachteten Ablauf der Ausbildung der ersten Flammenstrukturen. Der Kraftstoffstrahl entzündet sich dabei an den Rändern, bevor sich die Flammenfronten nach Ende der Einspritzung zum Strahlzentrum bewegen und sich anschließend als eine kugelförmige Flamme von der Düse entfernen.

Die Zündung des Pilotstrahls in Brenngashintergrund wurde mittels einer RCEM experimentell am LTT untersucht. Die gemessenen Druckverläufe dienten als Basis für die in dieser Arbeit durchgeführten Simulationen. Die Simulationen der RCEM wurden auf einem bewegten Netz mit der zuvor entwickelten Methodik zur Beschreibung der Einspritzung und der Zündung durchgeführt. Die Zündung des Pilotstrahls in Brenngashintergrund zeigte dabei deutlich längere Zündverzugszeiten als bei der Zündung in Luft beobachtet wurde. Diese Beobachtung ist auf einen reduzierten Sauerstoffgehalt im Kraftstoffstrahl als auch auf eine Interaktion der Brenngasmoleküle mit dem während der Zündung gebildeten Radikalpool zurückzuführen. Diese Effekte konnten von dem Modell hinreichend erfasst werden, wodurch die Einleitung der Verbrennung in der Simulation auch für den DF-Betrieb richtig wiedergegeben wurde. Die Geschwindigkeit der nachfolgenden turbulenten Gasverbrennung wurde von dem gewählten Ansatz der direkten Integration der detaillierten Chemie jedoch maßgeblich überschätzt. Dies ist unter anderem auf eine unzureichende Auflösung der Flammenfront, welche zu den vorliegenden Randbedingungen in einem Bereich von wenigen 100 µm zum liegen kommt, zurückzuführen.

Der Flammenfortschritt wurde aus diesem Grund für die LES am Forschungsmotor mittels eines ECFM Modells beschrieben. Dieses Modell wurde mittels eines geeigneten Ansatzes für die Zündung im DF-Betrieb adaptiert. Hierzu wurden mittels des zuvor eingesetzten Reaktionsmechanismus Zündverzugszeiten und laminare Flammengeschwindigkeiten tabelliert. Die Zündverzugszeiten dienten der Optimierung der Zündfunktion des Modells, wohingegen die Flammengeschwindigkeiten direkt in das Modell einflossen. In Kombination mit der für die Piloteinspritzung entwickelten Methodik konnten die am Motorprüfstand gemessenen Druckverläufe korrekt von dem Simulationsmodell wiedergegeben werden. Das Modell zeigte für die drei betrachteten Motorbetriebspunkte, welche sich in dem energetischen Dieselanteil und der AGR-Rate unterscheiden, in gewissen Grenzen prädiktiv, wobei eine Anpassung eines Modellparameters in Abhängigkeit des Dieselanteils erforderlich war. Des Weiteren war aufgrund der Tatsache, dass das Verbrennungsmodell nur für eine Kraftstoffkomponente ausgelegt ist, eine Unterscheidung der Diesel- und der Gasverbrennung nur anhand des Äquivalenzverhältnisses möglich.

Für die Untersuchung des Einflusses der Betriebsparameter auf den Verbrennungsablauf und die Emissionsbildung wurden aufgrund des hohen Rechenaufwandes nur einige wenige Zyklen berechnet. Es konnte jedoch gezeigt werden, dass der Brennverlauf und die auftretenden zyklischen Schwankungen ausreichend wiedergegeben werden konnten. Der energetische Dieselanteil stellte sich dabei als entscheidende Größe für die Phänomenologie der Verbrennung dar. Für größere Dieselmengen wird ein größerer Teil des Brennraums von den Spraykeulen erfasst und entflammt. Somit können auch sehr magere Gemische verbrannt werden. Für kleine Mengen im Bereich von 1% energetischem Dieselanteil wird initial nur ein sehr kleiner Bereich entflammt, der eher der Punkt-förmigen Zündung eines Ottomotors ähnelt. Für die Stickoxidbildung ist der Dieselanteil ebenso ausschlaggebend, da dieser zu Zonen stöchiometrischer Verbrennung führt in denen hohe Temperaturen vorliegen. Die Simulationen waren dabei in der Lage die Stickoxidemssionen in Abhängigkeit des Dieselanteils korrekt wiederzugeben. Zusätzlich wurden die Entstehungsorte der Stickoxide untersucht. Dabei zeigte sich für hohe Dieselanteile eine Verschiebung der Entstehungsorte von der Brennraummitte zum Rand der Kolbenmulde, zurückzuführen auf den hohen Strahlimpuls und die hohen Verdampfungsraten des Kraftstoffs in Düsennähe. Zusätzlich zeigten sich zyklische Schwankungen in der Emissionsbildung.

Eine detaillierte Untersuchung der Abläufe während der DF-Verbrennung wurde an einem ausgewählten Betriebspunkt mit 5% energetischem Dieselanteil durchgeführt, für den eine repräsentative Anzahl von 25 Zyklen berechnet wurde. Das Ensemble-gemittelte Strömungsfeld der LES Zyklen wurde einer RANS Rechnung gegenübergestellt, um die Qualität der LES zu beurteilen. Dabei zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung der gemittelten Strömungsgrößen. Der Vergleich der Turbulenz lieferte ebenso plausible Ergebnisse.

Ausgehenden von diesen Ergebnissen zeigte eine detaillierte Analyse der Wärmefreisetzung, dass bereits kurz nach der Zündung ein signifikanter Anteil des mageren Hintergrundgemisches zur Wärmefreisetzung beiträgt. Darauffolgend erfolgt ein relativ schneller Übergang in die Gasverbrennung der hauptsächlich durch das Entzünden der Bereiche zwischen den Spraykeulen geprägt ist. Hier kommt es zur Bildung einer geschlossenen Flammenfront, die sich nachfolgend durch den Brennraum ausdehnt. Die Flammenfront ist hauptsächlich durch die Interaktion mit der turbulenten Strömung geprägt. Eine Analyse der Verbrennungsregime im Borghi-Peters-Diagramm zeigte, dass sich die Flamme größtenteils im Regime der dünnen Reaktionszonen bewegt. Hier können die kleinsten Wirbelstrukturen in die Vorwärmzone der Flamme eindringen und erhöhen so die Transportprozesse in diesem Bereich.

Die zyklischen Schwankungen, die während der Verbrennung auftreten, konnten zum einen der Interaktion der Pilotstrahlen und zum anderen der Interaktion der Flammenfront mit dem turbulenten Strömungsfeld zugeordnet werden. Hierbei konnte eine gewisse Korrelation zwischen der Intensität der Schwankungsgeschwindigkeit der Strömung in Zylinderachse mit dem Spitzendruck festgestellt werden, welche unter anderem auf die Quetschströmung zurückgeführt werden kann. Zusätzlich zeigte sich das Entzünden der Bereiche zwischen den Spraykeulen als wichtige Quelle für zyklische Schwankungen. Im weiteren Verlauf der Verbrennung konnten den Zyklen, die im Borghi-Peters-Diagramm auf eine erhöhte Interaktion mit den kleinsten Wirbelstrukturen hinweisen, höhere Spitzendrücke zugeordnet werden, was den Einfluss der Stochastik der Turbulenz auf das Auftreten zyklischer Schwankungen bestätigt. Die durchgeführten Untersuchungen tragen zum Verständnis der DF-Verbrennung bei und geben einen detaillierten Einblick in die dabei ablaufenden Prozesse. Die generierten Ergebnisse stellen zusätzlich einen Ausgangspunkt für die Weiterentwicklung bestehender Verbrennungsmodelle dar.

# 9 Ausblick

Die Ergebnisse dieser Arbeit stellen eine Basis für weitere Untersuchungen im Bereich der DF-Verbrennung dar. Ausgehend von den in dieser Arbeit dargelegten Modellierungsansätzen wird im Folgenden ein kurzer Überblick über potentielle Forschungsschwerpunkte und zukünftige Entwicklungen gegeben.

Beginnend mit der Modellierung der Piloteinspritzung liefert die hier vorgestellt Methodik eine Möglichkeit die stark transienten Randbedingung am Düsenaustritt im ballistischen Betriebsbereich des Injektors zu beschreiben. Hierzu sind jedoch weiterhin Messdaten der Strahlausbreitung der Dampfphase erforderlich, da die in der Düse auftretenden Zustände weitestgehend unbekannt sind. Eine detaillierte Simulation der Düseninnenströmung würde maßgeblich zum Verständnis der Charakteristik der Pilotstrahlen beitragen und die Lücke zu einer prädiktiven Methodik zur simulativen Abbildung der Piloteinspritzung schließen.

Im Bereich der Modellierung der Zündung hat sich die Reaktionschemie als gut geeignete Methode für eine exakte Berechnung des Zündverzugs und der Zündorte erwiesen. Die Reaktionschemie basiert hier zumeist auf reduzierten Mechanismen für n-Heptan und kleinere Brenngasmoleküle. Die Notwendigkeit dieser reduzierten Mechanismen ergibt sich aus dem mit der Größe des Mechanismus stark ansteigenden Rechenaufwand. Eine vorab durchgeführte Tabellierung der Mechanismen, wie sie in [95] vorgestellt wurde, könnte den erforderlichen Rechenaufwand dabei deutlich reduzieren und auch den Einsatz umfangreicherer Mechanismen ermöglichen. Die Untersuchungen in dieser Arbeit haben darüber hinaus gezeigt, dass sich zum Zündzeitpunkt Zustände in der Flamme finden, in denen ein Eindringen der kleinsten Wirbelstrukturen in die innere Reaktionszone möglich ist, wodurch es zu TCI kommt. Eine Berücksichtigung der TCI könnte somit die Modellierungsergebnisse zu Beginn der Verbrennung verbessern.

Der Übergang in die magere Gasverbrennung nach der Zündung stellt immer noch eine große Herausforderung für die Modellierung dar, da es wie in dieser Arbeit aufgezeigt zu einem raschen Übergang in eine vom turbulenten Flammenfortschritt dominierte Verbrennung kommt. Für diese Art der Verbrennung ist die detaillierte Reaktionschemie nur schwer einsetzbar, da keine ausreichende Auflösung der Flammenfront sichergestellt werden kann. Bereits vorgestellte Ansätze zur lokalen Netzverfeinerung in der Nähe der Flammenfront, wie in [23–26] eingesetzt, entzerren diese Problematik zwar etwas, lösen die Flammenfront aber dennoch nicht zu Gänze auf. Die Wahl eines Flammenfortschrittsmodells zur Beschreibung der Gasverbrennung scheint aufgrund der Ähnlichkeit zur Ottoverbrennung naheliegend. Hierbei müssen jedoch meist aufgrund vereinfachter Zündmodelle Abstriche bei der Beschreibung des Zündvorgangs gemacht werden. Eine anzustrebende Lösung wäre hier ein hybrider Ansatz, welcher den komplexen Zündvorgang der DF-Verbrennung mittels detaillierter Chemie beschreibt und außerhalb der Spraykeulen auf ein implementiertes Flammenfortschrittsmodell zurückgreift, um die turbulente Gasverbrennung abzubilden.
Ausgehend von den in dieser Arbeit durchgeführten Multizyklenrechnungen ist es anzustreben irreguläre Verbrennungsphänomene detailliert zu analysieren, um deren Ursachen besser zu verstehen. Da irreguläre Verbrennungsphänomene den Betriebsbereich des Motors begrenzen, würde ein tieferes Verständnis dazu beitragen den Betriebsbereich zu erweitern. Hierfür ist es erforderlich einen geeigneten Ansatz zur Modellierung des Klopfens zu integrieren. Dieser kann auf Basis eines vereinfachten Klopfmodells, welches wie das in dieser Arbeit vorgestellte DIGE Modell auf einem Arrheniusansatz basiert, oder detaillierter Chemie ausgeführt werden. Abseits des untersuchten Diesel-Gas-Brennverfahrens können die hier gewonnen Erkenntnisse für die Modellierung des Gas-Diesel-Brennverfahrens eingesetzt werden, welches auf einer Hochdruckeinblasung des Brenngases in den Brennraum basiert. Dieses Brennverfahren bietet aufgrund höherer Wirkungsgrade durch Vermeidung der Klopfproblematik eine interessante Alternative zu dem hier untersuchten Verfahren. Erste CFD-basierte Untersuchungen dieses Verfahrens wurden in [96, 97] dargelegt. Die Erkenntnisse zur Modellierung der Einspritzung und des Zündvorgangs, die in dieser Arbeit abgeleitet wurden, können auch für dieses Verfahren einen Mehrwert darstellen.

## Literaturverzeichnis

- [1] Shell Deutschland Oil GmbH. Liquified natural gas new energy for ships. 2019.
- [2] van Basshuysen, Richard. Erdgas und erneuerbares Methan f
  ür den Fahrzeugantrieb. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2015.
- [3] International Maritime Organization. RESOLUTION MEPC.176(58) Revised MAR-POL Annex VI, 10 October 2008.
- [4] International Maritime Organization. RESOLUTION MEPC.202(62) Designation of the United States Caribbean Sea Emission Control Area and exemption of certain ships operating in the North American Emission Control Area and the United States Caribbean Sea Emission Control Area under regulations 13 and 14 and Appendix VII of MARPOL Annex VI, 15 July 2011.
- [5] International Maritime Organization. RESOLUTION MEPC.190(60) North American Emission Control Area, 26 March 2010.
- [6] International Maritime Organization. RESOLUTION MEPC.286(71) Designation of the Baltic Sea and the North Sea Emission Control Areas for NOx Tier III control, 7 July 2017.
- Schlemmer-Kelling, Udo. Agenda 2030 mega trends in the large-bore marine engine business. Heavy-Duty-, On- und Off-Highway-Motoren, Augsburg, Deutschland, 28 - 29 November 2017.
- [8] European Union. DIRECTIVE 2014/94/EU OF THE EUROPEAN PARLIAMENT AND OF THE COUNCIL of 22 October 2014 on the deployment of alternative fuels infrastructure: 2014/94/EU, 22.10.2014.
- [9] International Maritime Organization. Studies on the feasibility and use of LNG as a fuel for shipping. London, 2016.
- [10] Senghass, Clemens; Willmann, Michael und Koch, Hans-Joachim. Simplified L'Orange fuel injection system for Dual Fuel applications. CIMAC CONGRESS 16, Helsinki, Finland, 6-10 June 2016.
- [11] Kiesling, Constantin; Redtenbacher, Christoph; Kirsten, Martin; Wimmer, Andreas; Imhof, Dino; Berger, Ingmar und Garcia-Oliver, Jose Maria. Detailed Assessment of an Advanced Wide Range Diesel Injector for Dual Fuel Operation of Large Engines. CIMAC CONGRESS 16, Helsinki, Finland, 6-10 June 2016.

- [12] Karim, Ghazi A. Dual-fuel diesel engines. CRC Press, Boca Raton and London and New York, 2015.
- [13] Baufeld, Torsten; Mohr, Heinrich und Phillipp, Harald. Zukunftsperspektiven und technische Herausforderungen bei Diesel-/Gas-Großmotoren. 8. Dessauer Gasmotoren-Konferenz, Dessau-Roßlau, Germany, 21-23 March 2013.
- [14] Vermorel, O.; Richard, S.; Colin, O.; Angelberger, C.; Benkenida, A. und Veynante, D. Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES. Combustion and Flame, 156(8):1525–1541, 2009.
- [15] Ameen, Muhsin M.; Yang, Xiaofeng; Kuo, Tang-Wei und Som, Sibendu. Parallel methodology to capture cyclic variability in motored engines. International Journal of Engine Research, 18(4):366–377, 2017.
- [16] Goryntsev, D.; Sadiki, A.; Klein, M. und Janicka, J. Large eddy simulation based analysis of the effects of cycle-to-cycle variations on air-fuel mixing in realistic DISI IC-engines. Proceedings of the Combustion Institute, 32(2):2759–2766, 2009.
- [17] Königsson, Fredrik. On combustion in the CNG-diesel dual fuel engine. Doctoral thesis, KTH Royal Institute of Technology, 2014.
- [18] Malin, Maximilian; Kiesling, Constantin; Redtenbacher, Christoph und Wimmer, Andreas. Einfluss der Diesel-Piloteinspritzung auf die Verbrennung in Diesel-Gas Dual Fuel Motoren. 10. Tagung Diesel- und Benzindirekteinspritzung, Berlin, Deutschland, 24-25 November 2016.
- [19] Li, Yue; Song, Enzhe und Yang, Liping. Research on the Influence of Diesel Injection Law to Combustion Process of Micro Ignition Dual Fuel Engine. CIMAC CONGRESS 16, Helsinki, Finland, 6-10 June 2016.
- [20] Ritzke, Jöran; Andree, Sascha; Theile, Martin; Henke, Björn; Schleef, Karsten; Nocke, Jürgen und Hassel, Egon. Simulation of a Dual-Fuel Large Marine Engines using combined 0/1-D and 3-D Approaches. CIMAC CONGRESS 16, Helsinki, Finland, 6-10 June 2016.
- [21] Fink, Christian; Henke, Björn; Schleef, Karsten; Andree, Sascha; Ritzke, Jöran; Harndorf, Horst und Hassel, Egon. Experimentelle und numerische Untersuchung des Dual-Fuel Verbrennungsprozesses in mittelschnelllaufenden Motoren. 4. Rostocker Großmotorentagung, Rostock, Deutschland, 15 - 16 September 2016.
- [22] Ratzke, Ansgar. Modellierung der Flammenausbreitung und des Flammenlöschens im Gasmotor. Dissertation, Leibniz Universität Hannover, 2013.

- [23] Hockett, Andrew; Hampson, Greg und Marchese, Anthony J. Development and Validation of a Reduced Chemical Kinetic Mechanism for Computational Fluid Dynamics Simulations of Natural Gas/Diesel Dual-Fuel Engines. Energy & Fuels, 30(3):2414–2427, 2016.
- [24] Li, Yu; Li, Hailin; Guo, Hongsheng; Li, Yongzhi und Yao, Mingfa. A numerical investigation on methane combustion and emissions from a natural gas-diesel dual fuel engine using CFD model. Applied Energy, 205:153–162, 2017.
- [25] Wang, Huaiyu; Gan, Huibing und Theotokatos, Gerasimos. Parametric investigation of pre-injection on the combustion, knocking and emissions behaviour of a large marine four-stroke dual-fuel engine. Fuel, 281:118744, 2020.
- [26] Wijeyakulasuriya, Sameera; Jupudi, Ravichandra S.; Givler, Shawn; Primus, Roy J.; Klingbeil, Adam E.; Raju, Mandhapati und Raman, Ashwin. *Multidimensional Modeling* and Validation of Dual-Fuel Combustion in a Large Bore Medium Speed Diesel Engine. Proceedings of the ASME 2015 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference, Houston, USA, 8 - 11 November 2015.
- [27] Eder, Lucas; Ban, Marko; Pirker, Gerhard; Vujanovic, Milan; Priesching, Peter und Wimmer, Andreas. Development and Validation of 3D-CFD Injection and Combustion Models for Dual Fuel Combustion in Diesel Ignited Large Gas Engines. Energies, 11(3):643, 2018.
- [28] Decan, Gilles; Lucchini, Tommaso; D'Errico, Gianluca und Verhelst, Sebastian. A novel technique for detailed and time-efficient combustion modeling of fumigated dual-fuel internal combustion engines. Applied Thermal Engineering, 174:115224, 2020.
- [29] Fontanesi, Stefano; Paltrinieri, Stefano; Tiberi, Alessandro und D'Adamo, Alessandro. LES Multi-cycle Analysis of a High Performance GDI Engine. SAE Technical Paper, 2013-01-1080.
- [30] Merker, Günter P. und Teichmann, Rüdiger. Grundlagen Verbrennungsmotoren. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2018.
- [31] Redtenbacher, Christoph; Kiesling, Constantin; Wimmer, Andreas; Sprenger, Florian; Fasching, Paul und Eichlseder, Helmut. Dual Fuel Brennverfahren - Ein zukunftsweisendes Konzept vom Pkw- bis zum Großmotorenbereich? 37. Internationales Wiener Motorensymposium, Wien, Österreich, 28 - 29 April 2016.
- [32] Krishnan, Sundar Rajan; Srinivasan, Kalyan Kumar und Raihan, Mostafa Shameem. The effect of injection parameters and boost pressure on diesel-propane dual fuel low temperature combustion in a single-cylinder research engine. Fuel, 184:490–502, 2016.

- [33] Dronniou, Nicolas; Kashdan, Julian; Lecointe, Bertrand; Sauve, Kyle und Soleri, Dominique. Optical Investigation of Dual-fuel CNG/Diesel Combustion Strategies to Reduce CO2 Emissions. SAE International Journal of Engines, 7(2):873–887, 2014.
- [34] Azimov, U.; Tomita, E.; Kawahara, N. und Harada, Y. Premixed mixture ignition in the end-gas region (PREMIER) combustion in a natural gas dual-fuel engine: operating range and exhaust emissions. International Journal of Engine Research, 12(5):484–497, 2011.
- [35] Anderson, Garrett. Characterization of abnormal dual-fuel combustion. Heavy-Duty-, On- und Off-Highway-Motoren, Augsburg, Deutschland, 28 - 29 November 2017.
- [36] Tänzler, Andre Gerhard. Experimentelle Untersuchung eines Dual-Fuel-Brennverfahrens für schwere Nutzfahrzeugmotoren. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2017.
- [37] van Alstine, Daniel G.; Montgomery, David T.; Callahan, Timothy J. und Florea, Radu C. Ability of the Methane Number Index of a Fuel to Predict Rapid Combustion in Heavy Duty Dual Fuel Engines for North American Locomotives. Proceedings of the ASME 2015 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference, Houston, USA, 8 -11 November 2015.
- [38] Tetsuya TAGAI; Masahiro ISHIDA; Hironobu UEKI und Takashi WATANABE. Effects of Equivalence Ratio and Temperature of CNG Premixture on Knock Limit in a Dual Fueled Diesel Engine. SAE Technical Paper, 2003-01-1934.
- [39] Unfug, Fridolin. Investigation on Dual Fuel Engine Gas Combustion using Tomographic In-Cylinder Measurement Technique and Simultaneous High Speed OH-Chemiluminescence Visualization. SAE Technical Paper, 2016-01-2308.
- [40] Zaccardi, Jean-Marc und Serrano, David. A Comparative Low Speed Pre-Ignition (LSPI) Study in Downsized SI Gasoline and CI Diesel-Methane Dual Fuel Engines. SAE International Journal of Engines, 7(4):1931–1944, 2014.
- [41] Heywood, John B. Internal combustion engine fundamentals. McGraw-Hill series in mechanical engineering. McGraw-Hill, New York, 1988.
- [42] Joos, Franz. Technische Verbrennung. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [43] Weaver, Christopher S. und Turner, Sean H. Dual Fuel Natural Gas/Diesel Engines: Technology, Performance, and Emissions. SAE Technical Paper, 940548.

- [44] R. G. Papagiannakis; D. T. Hountalas und P. N. Kotsiopoulos. Experimental and Theoretical Analysis of the Combustion and Pollutants Formation Mechanisms in Dual Fuel DI Diesel Engines. SAE Technical Paper, 2005-01-1726.
- [45] Tschöke, Helmut; Mollenhauer, Klaus und Maier, Rudolf. Handbuch Dieselmotoren. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2018.
- [46] Ferziger, Joel H. und Peric, Milovan. Numerische Strömungsmechanik. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2008.
- [47] Laurien, Eckart und Oertel jr., Herbert. Numerische Strömungsmechanik: Grundgleichungen und Modelle - Lösungsmethoden - Qualität und Genauigkeit. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden, 2013.
- [48] Hanjalić, K.; Popovac, M. und Hadžiabdić, M. A robust near-wall elliptic-relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD. International Journal of Heat and Fluid Flow, 25(6):1047–1051, 2004.
- [49] Fröhlich, Jochen. Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen. Teubner Verlag, Wiesbaden, 2006.
- [50] Pope, S. B. *Turbulent flows.* Cambridge University Press, Cambridge and New York, 2000.
- [51] Kobayashi, H.; Ham, F. und Wu, X. Application of a local SGS model based on coherent structures to complex geometries. International Journal of Heat and Fluid Flow, 29(3):640– 653, 2008.
- [52] Krüger, Christian. Validierung eines 1D-Spraymodells zur Simulation der Gemischbildung in direkteinspritzenden Dieselmotoren. Dissertation, RWTH Aachen, 2001.
- [53] Stiesch, Gunnar. *Modeling Engine Spray and Combustion Processes*. Springer, Berlin and Heidelberg, 2003.
- [54] AVL List GmbH. Spray Module AVL FIREVersion 2018.1; Graz, Austria, 2018, 2018.
- [55] van Basshuysen, Richard und Schäfer, Fred. Handbuch Verbrennungsmotor: Grundlagen, Komponenten, Systeme, Perspektiven. Springer Vieweg, Wiesbaden, 2015.
- [56] Lefebvre, Arthur H. und McDonell, Vincent G. Atomization and sprays. CRC Press, Boca Raton and London and New York, 2017.

- [57] Ghiji, M.; Goldsworthy, L.; Brandner, P. A.; Garaniya, V. und Hield, P. Analysis of diesel spray dynamics using a compressible Eulerian/VOF/LES model and microscopic shadowgraphy. Fuel, 188:352–366, 2017.
- [58] Pilch, M. und Erdman, C. A. 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.
- [59] Liu, Alex B.; Mather, Daniel und Reitz, Rolf D. Modeling the Effects of Drop Drag and Breakup on Fuel Sprays. SAE Technical Paper, 930072.
- [60] Dukowicz, J. K. Quasi-steady droplet phase change in the presence of convection. Informal report, Los Alamos Scientific Laboratory, USA, 1979.
- [61] Gosman, A. D. und loannides, E. Aspects of Computer Simulation of Liquid-Fueled Combustors. Journal of Energy, 7(6):482–490, 1983.
- [62] Kuo, Kenneth K. Principles of combustion. Wiley, Hoboken, NJ, 2. ed. edition, 2005.
- [63] Peters, Norbert. *Turbulent combustion*. Cambridge monographs on mechanics. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [64] Warnatz, Jürgen; Dibble, Robert W. und Maas, Ulrich. Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2006.
- [65] PETERS, N. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. Journal of Fluid Mechanics, 384:107–132, 1999.
- [66] Iacovano, Clara; d'Adamo, Alessandro und Cantore, Giuseppe. Analysis and Simulation of Non-Flamelet Turbulent Combustion in a Research Optical Engine. Energy Procedia, 148:463–470, 2018.
- [67] Kammermann, Thomas; Koch, Jann; Wright, Yuri M.; Soltic, Patrik und Boulouchos, Konstantinos. Generation of Turbulence in a RCEM towards Engine Relevant Conditions for Premixed Combustion Based on CFD and PIV Investigations. SAE International Journal of Engines, 10(4):2176–2190, 2017.
- [68] Lauer, Thomas. Einfluss der Ladungsbewegung auf Gemischbildung und Entzündung bei Otto-Motoren mit homogenen Brennverfahren. Dissertation, TU Wien, 2007.
- [69] Linse, D.; Hasse, C. und Durst, B. An experimental and numerical investigation of turbulent flame propagation and flame structure in a turbo-charged direct injection gasoline engine. Combustion Theory and Modelling, 13(1):167–188, 2009.

- [70] Schuh, Sebastian; Frühhaber, Jens; Lauer, Thomas und Winter, Franz. A Novel Dual Fuel Reaction Mechanism for Ignition in Natural Gas-Diesel Combustion. Energies, 12(22):4396, 2019.
- [71] AVL List GmbH. General Gas Phase Reactions Module AVL FIRE; Version 2018.1; Graz, Austria, 2018, 2018.
- [72] Lauer, Thomas und Frühhaber, Jens. Towards a Predictive Simulation of Turbulent Combustion?—An Assessment for Large Internal Combustion Engines. Energies, 14(1):43, 2021.
- [73] Colin, O.; Benkenida, A. und Angelberger, C. 3d Modeling of Mixing, Ignition and Combustion Phenomena in Highly Stratified Gasoline Engines. Oil & Gas Science and Technology, 58(1):47–62, 2003.
- [74] AVL List GmbH. Combustion Module AVL FIRE; Version 2018.1; Graz, Austria, 2018, 2018.
- [75] AVL List GmbH. Emission Module AVL FIRE; Version 2018.1; Graz, Austria, 2018, 2018.
- [76] Frühhaber, Jens; Peter, Andreas; Schuh, Sebastian; Lauer, Thomas; Wensing, Michael; Winter, Franz; Priesching, Peter und Pachler, Klaus. Modeling the Pilot Injection and the Ignition Process of a Dual Fuel Injector with Experimental Data from a Combustion Chamber Using Detailed Reaction Kinetics. SAE Technical Paper, 2018-01-1724.
- [77] Peter, Andreas; Riess, Sebastian; Wensing, Michael; Fruehhaber, Jens und Lauer, Thomas. Investigation of Mixture Formation and Flammability of Natural Gas and Diesel under Dual Fuel Operating Conditions in the Limits of Flame-quenching and Knocking. volume 2017.9 of The Ninth International Conference on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA), Okayama, Japan, 25 - 28 Juli 2017.
- [78] Riess, Sebastian; Weiss, Lukas; Peter, Andreas; Rezaei, Javad und Wensing, Michael. Air entrainment and mixture distribution in Diesel sprays investigated by optical measurement techniques. International Journal of Engine Research, 19(1):120–133, 2018.
- [79] Desantes, J. M.; Payri, R.; Salvador, F. J. und Gil, A. Development and validation of a theoretical model for diesel spray penetration. Fuel, 85(7):910–917, 2006.
- [80] Naber, Jeffrey und Siebers, Dennis L. Effects of Gas Density and Vaporization on Penetration and Dispersion of Diesel Sprays. SAE Technical Paper, 960034.

- [81] Sazhin, S. S.; Feng, G. und Heikal, M. R. A model for fuel spray penetration. Fuel, 80(15):2171–2180, 2001.
- [82] R. Minetti; M. Carlier; M. Ribaucour; E. Therssen und L. Sochet. A rapid compression machine investigation of oxidation and auto-ignition of n-Heptane: Measurements and modeling. Combustion and Flame, 102(3):298–309, 1995.
- [83] Gauthier, B. M.; Davidson, D. F. und Hanson, R. K. Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures. Combustion and Flame, 139(4):300–311, 2004.
- [84] Novella, R.; García, A.; Pastor, J. M. und Domenech, V. The role of detailed chemical kinetics on CFD diesel spray ignition and combustion modelling. Mathematical and Computer Modelling, 54(7):1706–1719, 2011.
- [85] Schlatter, Stephanie; Schneider, Bruno; Wright, Yuri und Boulouchos, Konstantinos. 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.
- [86] Ortner, Patrick. Untersuchung des Zünd- und Brennverhaltens von Dieselkraftstoff unter Erdgas-Luft-Atmosphäre in einer Rapid Compression Machine. Projektarbeit, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik FAU Erlangen-Nürnberg, 2017.
- [87] Srna, Aleš; Bolla, Michele; Wright, Yuri M.; Herrmann, Kai; Bombach, Rolf; Pandurangi, Sushant S.; Boulouchos, Konstantinos und Bruneaux, Gilles. *Effect of methane on pilot-fuel auto-ignition in dual-fuel engines*. Proceedings of the Combustion Institute, 37(4):4741–4749, 2019.
- [88] Rutland, C. J. Large-eddy simulations for internal combustion engines a review. International Journal of Engine Research, 12(5):421–451, 2011.
- [89] van Pham, Chien; Choi, Jae-Hyuk; Rho, Beom-Seok; Kim, Jun-Soo; Park, Kyunam; Park, Sang-Kyun; van Le, Vang und Lee, Won-Ju. A Numerical Study on the Combustion Process and Emission Characteristics of a Natural Gas-Diesel Dual-Fuel Marine Engine at Full Load. Energies, 14(5):1342, 2021.
- [90] Enaux, Benoit; Granet, Victor; Vermorel, Olivier; Lacour, Corine; Thobois, Ludovic; Dugué, Vincent und Poinsot, Thierry. Large Eddy Simulation of a Motored Single-Cylinder Piston Engine: Numerical Strategies and Validation. Flow, Turbulence and Combustion, 86(2):153–177, 2011.

- [91] Brußies, Eva. Simulation der Zylinderinnenströmung eines Zweiventil-Dieselmotors mit einem skalenauflösenden Turbulenzmodell. Dissertation, TU Darmstadt, 2014.
- [92] Catania, A. E. und Mittica, A. Extraction Techniques and Analysis of Turbulence Quantities From In-Cylinder Velocity Data. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 111(3):466–478, 1989.
- [93] Liu, Z. und Karim, G. A. Simulation of combustion processes in gas-fuelled diesel engines. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy, 211(2):159–169, 1997.
- [94] Ahmad, Zeeshan; Kaario, Ossi; Qiang, Cheng; Vuorinen, Ville und Larmi, Martti. A parametric investigation of diesel/methane dual-fuel combustion progression/stages in a heavy-duty optical engine. Applied Energy, 251:113191, 2019.
- [95] Andree, Sascha; Goryntsev, Dmitry; Theile, Martin; Henke, Björn; Schleef, Karsten; Nocke, Jürgen; Tap, Ferry; Buchholz, Bert und Hassel, Egon. Numerical Simulation of a Large Bore Dual Fuel Marine Engine Using Tabulated Detailed Reaction Mechanisms. Proceedings of the ASME 2019 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference, Chicago, USA, 20 - 23 October 2019.
- [96] Frankl, Stephanie; Gleis, Stephan und Wachtmeister, Georg. Interpretation of Ignition and Combustion in a Full-Optical High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) Engine using 3D-CFD Methods. CIMAC CONGRESS 19, Vancouver, Canada, 10-14 June 2019.
- [97] Jud, Michael. Numerische Simulation der Zündung und Verbrennung von mit Diesel pilotierten Erdgasstrahlen. Dissertation, Verlag Dr. Hut, München, 2020.