

Numerische Simulation der Benzinselbstzündung

Vom Fachbereich Maschinenbau
an der Technischen Universität Darmstadt

zur

Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Thomas Breitenberger

aus Melsungen

Berichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. J. Janicka
Mitberichterstatter:	Prof. Dr.-Ing. C. Hasse
Tag der Einreichung:	22. August 2013
Tag der mündlichen Prüfung:	29. Oktober 2013

Darmstadt 2013

D17

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie;
detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

Breitenberger, Thomas:

Numerische Simulation der Benzinselbstzündung
ISBN 978-3-86376-065-6

Alle Rechte vorbehalten

1. Auflage 2013

© Optimus Verlag, Göttingen

URL: www.optimus-verlag.de

Printed in Germany

Papier ist FSC zertifiziert (holzfrei, chlorfrei und säurefrei,
sowie alterungsbeständig nach ANSI 3948 und ISO 9706)

Das Werk, einschließlich aller seiner Teile, ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes in Deutschland ist ohne Zustimmung des Verlages unzulässig und strafbar. Dies gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Danksagung

Die vorliegende Dissertation ist im Rahmen meiner fünfjährigen Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fachgebiet für Energie- und Kraftwerkstechnik der Technischen Universität Darmstadt entstanden.

Mein Dank gilt daher im Besonderen dem Leiter des Fachgebiets, Herrn Prof. Dr.-Ing. Johannes Janicka, für die Ermöglichung der Promotion und für sein Vertrauen in meine Person. Er hat durch sein Interesse und seine Begeisterungsfähigkeit das Vorhaben maßgeblich vorangetrieben und mir zu jeder Zeit die notwendige Freiheit und Unterstützung bei der Durchführung gewährt.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Christian Hasse, dem Leiter des Lehrstuhls für Numerische Thermofluidodynamik der Technischen Universität Bergakademie Freiberg, danke ich für die Übernahme des Koreferats und dem damit verbundenen Interesse an meiner Arbeit.

Bei allen Kollegen und Mitarbeitern des Fachgebiets bedanke ich mich für die kreative Arbeitsatmosphäre sowie die gute Zusammenarbeit und das kollegiale Verhältnis. Durch kritische Diskussionen sind die erzielten Ergebnisse erst möglich geworden. Namentlich möchte ich meinen Kollegen Dr.-Ing. Jens Kühne, Dr.-Ing. Michael Baumann und Dipl.-Ing. Andreas Ludwig sowie Dr.-Ing. Kai Aschmoneit für die Loyalität, fruchtbare Zusammenarbeit und Hilfsbereitschaft danken. Neben zahlreichen interessanten wissenschaftlichen und privaten Diskussionen trugen sie maßgeblich zum Gelingen der Arbeit bei.

Besonderer Dank gebührt meinen Eltern, die meine Neugier geweckt haben und mir stets die Freiheit gaben, Wege einzuschlagen, die ich für erstrebenswert hielt. Sie haben mich während meiner Schul- und Studienzeit nicht nur finanziell unterstützt.

Meiner Partnerin Maren Leudesdorff danke ich aus tiefstem Herzen für die fortwährende Unterstützung und den starken Rückhalt. Dadurch ist es mir möglich, mich auch herausfordernden Aufgaben zu stellen.

Thomas Breitenberger

Darmstadt, den 22. August 2013

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Stand der Forschung	3
1.3	Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	5
2	Motorische Grundlagen	7
2.1	Funktionsweise und Kenngrößen	7
2.2	Motorische Zündung und Verbrennung	11
3	Theoretische Grundlagen und Modellierung	15
3.1	Strömungsmechanische Gleichungen	15
3.2	Numerische Gitter	19
3.3	Turbulenz	20
3.4	Simulationstechniken turbulenter Strömung	23
3.4.1	Direkte Numerische Simulation	24
3.4.2	Reynolds-Averaged Navier-Stokes	24
3.4.3	Grobstruktursimulation	25
3.5	Mehrphasenströmungen	30
3.5.1	Direkte Methode	30
3.5.2	Modellierende Verfahren	30
3.6	Modellierung der dispersen Phase	31
3.6.1	Tropfenverteilungsfunktion	31
3.6.2	Kollisionsmodell	32
3.6.3	Zerfallsmodell	33
3.6.4	Verdampfungsmodell	34
3.6.5	Kopplung der Trägerphase und dispersen Phase	34
3.7	Verbrennung	35
3.7.1	Reaktionskinetik	35
3.7.2	Gliederung von Flammen	37
3.8	Modellierung turbulenter Verbrennung	39
3.8.1	Mischungsbruchansatz	40
3.8.2	Flamelet-Modell	42
3.8.3	Flamelet Generated Manifolds	44
3.9	Zündung	49
3.9.1	Zündverhalten von Kohlenwasserstoffgemischen	50
3.9.2	Modellierung der Selbstzündung	51

4	Numerisches Verfahren	53
4.1	Lagrange'scher Rechenschritt	54
4.1.1	Diskretisierung	55
4.1.2	Lösung des gekoppelten Gleichungssystems	57
4.2	Konvektiver Rechenschritt	60
4.2.1	Diskretisierung	60
4.3	Zeitschrittsteuerung und Konvergenz	62
4.4	Randbedingungen	63
4.5	Rechenzeit	64
5	Verifikation	67
5.1	Verdampfung eines Tropfens	67
5.2	Der eindimensionale Dichtesprung	70
5.3	Die eindimensionale Flamme	73
5.4	Der homogene Reaktor	76
6	Anwendungen	79
6.1	Volvo-Brenner	79
6.1.1	Aufbau	79
6.1.2	Ergebnisse	81
6.2	Sandia FlameD	84
6.2.1	Aufbau	84
6.2.2	Ergebnisse	86
6.3	Transparentmotor	91
6.3.1	Aufbau	91
6.3.2	Ergebnisse	95
6.4	Vollmotor	113
6.4.1	Aufbau	113
6.4.2	Ergebnisse	117
7	Zusammenfassung und Ausblick	125
	Literaturverzeichnis	127

Nomenklatur

Große lateinische Buchstaben

Einheit

Große lateinische Buchstaben		Einheit
$A_{(f/b),j}$	Präexponentialfaktor der Reaktion j	$k_{(f/b),j}$
A	Fläche	m^2
C_s	Smagorinsky-Konstante	–
D	Diffusionskoeffizient	$m^2 s^{-1}$
D_m	Diffusionskoeffizient der Spezies m	$m^2 s^{-1}$
D_K	Bohrungsdurchmesser des Kolbens	m
E_a	Aktivierungsenergie	$kg m^2 s^{-2} mol^{-1}$
$E(k)$	Spektrum der turbulenten kinetischen Energie	$m^2 s^{-2}$
F_i	Kraft	$kg m s^{-2}$
I	Spezifische innere Energie	$J kg^{-1}$
$J_j^{Y_m}$	Massenbruch-Flussvektor der Spezies m	$kg m^{-2} s^{-1}$
L	Charakteristische Länge	m
L_{ij}	Integrales Längenmaß	m
M	Masse	kg
N	In eine Mittelung eingehende Menge	–
N_k	Anzahl der Unterzeitschritte für den konvektiven Rechenschritt	–
N_S	Anzahl der Spezies	–
N_R	Anzahl der Reaktionen	–
P_t	Thermische Leistung	$kg m^2 s^{-3}$
$\dot{Q}_{zu,ab}$	Zu- bzw. abgeführter Wärmestrom	$kg m^2 s^{-3}$
R	Universelle Gaskonstante	$kg m^2 s^{-2} mol^{-1} K^{-1}$
R_{ij}	Korrelationsfunktion	–
S_{ij}	Deformationsgeschwindigkeitstensor	s^{-1}
T	Temperatur	K
T^d	Temperatur eines Tropfens	K
T_{ij}	Integrales Zeitmaß	s
U	Charakteristische Geschwindigkeit	$m s^{-1}$
V	Volumen	m^3
$ V $	Geschwindigkeitsmagnitude	$m s^{-1}$
V_c	Kompressionsvolumen	m^3
V_h	Hubvolumen	m^3
W	Arbeit	$kg m^2 s^{-3}$
W	Molmasse	$kg mol^{-1}$
X_m	Molenbruch der Komponente m	–
Y_m	Massenbruch der Komponente m	–
\mathcal{Y}	Fortschrittsvariable	Υ
\mathcal{Y}^*	Normierte Fortschrittsvariable	–

\mathcal{Y}_{eq}	Gleichgewichtswert der Fortschrittsvariable	Υ
Z_γ	Elementmassenbruch des Elements γ	—
Z	Mischungsvariable	—

Kleine lateinische Buchstaben		Einheit
a_i^d	Beschleunigung eines Tropfens	m s^{-2}
$a_s(T_d)$	Oberflächenspannung	kg s^{-2}
b	Stoßparameter	m
c_m	Mittlere Kolbengeschwindigkeit	m s^{-1}
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$
c_v	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen	$\text{J kg}^{-1}\text{K}^{-1}$
f	Mischungsbruch	—
f	Tropfenverteilungsfunktion	—
$k_{f,j}, k_{b,j}$	Geschw.-Koeff. der Vor- und Rückwärtsreaktionen	$(\text{kmol m}^{-3})^{1-\sum_m \nu_{m,j}}\text{s}^{-1}$
l_{st}	Luftbedarf bei Stöchiometrie	—
l_f	Flammendicke	m
o_{st}	Sauerstoffbedarf bei Stöchiometrie	—
p	Druck	$10^5 \text{ kg m}^{-1} \text{ s}^{-2}$
p_i	Impuls	kg m s^{-1}
r	Radius eines Tropfens	m
$r_{f,j}, r_{b,j}$	Reaktionsrate der Vorwärts- und Rückwärtsreaktionen	$\text{kmol m}^{-3}\text{s}^{-1}$
s	Kolbenweg	m
s	Flammenkoordinate	—
s_l	Laminare Flammengeschwindigkeit	m s^{-1}
t	Zeit	s
u_i	Geschwindigkeit	m s^{-1}
u_i^d	Geschwindigkeit eines Tropfens	m s^{-1}
w_m	Wichtungsfaktor der Fortschrittsvariable	\mathcal{Y}
x_i	Ortskoordinate	m
y	Verzerrung von der Sphärizität eines Tropfens	m
\dot{y}	Zeitliche Änderung des Radius eines Tropfens	m s^{-1}

Große griechische Buchstaben		Einheit
Δ	Filterweite	m
Φ	Äquivalenzverhältnis	—
Φ^D	Wichtungsfaktor	—
Φ^P	Wichtungsfaktor	—
Υ	Beliebige Einheit	Υ

Kleine griechische Buchstaben		Einheit
η	Wirkungsgrad	—
ϵ	Kompressionsverhältnis	—

ε	Turbulente Dissipationsrate	$\text{m}^2 \text{s}^{-3}$
γ	Verhältnis zweier Radien	—
η_{th}	Thermischer Wirkungsgrad	—
κ	Wellenzahl	m^{-1}
λ	Luftzahl	—
λ	Wärmeleitfähigkeit	$\text{kg m K}^{-1} \text{s}^{-3}$
μ	Dynamische Viskosität	$\text{kg m}^{-1} \text{s}^{-1}$
ν	Kinematische Viskosität	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
$\nu'_{m,R}$	Stöchiometrische Koeffizienten	—
$\nu''_{m,R}$	Stöchiometrische Koeffizienten	—
ν_t	Turbulente Viskosität	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
ϕ	Beliebiger Skalar	Υ
ρ	Dichte	kg m^{-3}
ρ_m	Dichte der Spezies m	kg m^{-3}
ρ^d	Dichte eines Tropfens	kg m^{-3}
τ	Beliebiges Zeitmaß	s
τ_{ij}	Feinstruktur-Spannungstensor	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
χ	Skalare Dissipationsrate	s^{-1}
$\dot{\omega}$	Beliebiger Quellterm	Υ
$\dot{\omega}_m$	Quellterm der Komponente m	$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$

Tiefgestellte Indizes

eff	Effektiv
f	Anzahl der Flächen eines Kontrollvolumens
ind	Indiziert
m	Komponente
$mech$	Mechanisch
th	Thermisch
1	Stoßpartner eins
2	Stoßpartner zwei

Hochgestellte Indizes

A	Berechnungsphase A betreffend
B	Berechnungsphase B betreffend
C	Berechnungsphase C betreffend
d	Tropfen betreffend
k	Konvektiver Zeitschritt k
n	Zeitschritt n

Operatoren und Symbole

$\bar{\Phi}$	Zeitgemittelte Größe
$\overline{\Phi'^2}$	Varianz von zeitlich gemittelter Größe

$\overline{\Phi'^2}^{\frac{1}{2}}$	Standardabweichung von zeitlich gemittelter Größe
$\widetilde{\Phi'^2}$	Favre-Feinstruktur-Varianz
$\widetilde{\Phi}$	Favre-gefilterte Größe
$\langle \Phi \rangle$	Phasengemittelte Größe
$\langle \Phi'^2 \rangle$	Varianz von phasengemittelter Größe
$\langle \Phi'^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$	Standardabweichung von phasengemittelter Größe
Φ'	Fluktuierender Anteil einer mittleren oder gefilterten Größe
Φ''	Fluktuierender Anteil einer Favre-gefilterten Größe

Dimensionslose Kennzahlen

CFL	Courant-Friedrich-Levy
Da	Damköhler-Zahl
Da_t	Turbulente Damköhler-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Re_t	Turbulente Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl
St	Strouhal-Zahl
We	Weber-Zahl

Abkürzungen

AGR	Abgasrückführung
CAI	Controlled Auto Ignition
CFD	Computational Fluid Dynamics
CIHC	Compression Ignited Homogeneous Charge
DES	Detached Eddy Simulation
DFG	Deutsche Forschungsgemeinschaft
DI	Direct Injection
DISI	Direct Injection Spark Ignition
FVV	Forschungsvereinigung für Verbrennungskraftmaschinen
FSD	Flame Surface Density
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
ILDMM	Intrinsic Low Dimensional Manifold
IC	In Cylinder
LES	Large Eddy Simulation
LDA	Laser-Doppler-Anemometrie
LWOT	Oberer Totpunkt des Ladungswechsels
MPI	Message Passing Interface
PCCI	Premixed Charge Compression Ignition
PDC	Partial Donor Cell
PDF	Probability Density Function
PIV	Particle Image Velocimetry

QSOU	Quasi Second Order Upwind
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
SGS	Sub Grid Scale
SI	Spark Ignition
SIMPLE	Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations
SST	Shear Stress Transport
TAB	Taylor Analogy Break-Up
UDS	Upwind Differencing Scheme
VoF	Volume of Fluid
ZOT	Oberer Totpunkt der Zündung

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Motivation

Die Geschichte der Menschheit und die Entfaltung und Weiterentwicklung der Kulturen wird seit jeher durch Verbrennungsprozesse gezeichnet. Dabei wurde die durch die Verbrennung freigesetzte Energie zunächst als reine Wärmequelle genutzt. Beginnend mit dem Anfang der Industrialisierung wurde diese Wärmeenergie in andere Energieformen, überwiegend jedoch in mechanische Energie, umgewandelt. Dadurch wurde der bis heute anhaltende technologische Fortschritt eingeleitet, bei dem die Umwandlung von Primärenergieträgern durch Verbrennung unabdingbar sowohl für die Versorgung der Industrie und der Haushalte mit Wärme und elektrischer Energie als auch für die heutige Mobilität geworden ist. Der durch Verbrennung bereitgestellte Anteil des Primärenergiebedarfs liegt bei einer Größenordnung von ca. 80 %. Dem gegenüber wird durch die Verwendung erneuerbarer Energien lediglich ein Anteil von 10 % abgedeckt, wie zum Beispiel durch die bei der Abfallentsorgung gewonnenen Primärenergie [54].

Mittelfristig stehen weder umsetzbare noch wirtschaftliche Alternativen zur Verbrennung zur Verfügung, um den Treibhauseffekt zu verlangsamen, der durch die bei der Verbrennung von fossilem Kohlenstoff freigesetzten Schadstoffe, wie zum Beispiel Kohlendioxid, verursacht wird.

Durch den steigenden Primärenergiebedarf [55] hat sich die Reduktion der Freisetzung von Kohlendioxid (CO_2) in den vergangenen Jahren auf allen bedeutsamen Technologiefeldern zu einer Themenstellung dramatisch wachsender gesellschaftlicher und wirtschaftlicher Relevanz entwickelt. Dabei betragen die durch den Verkehr bedingten CO_2 -Emissionen innerhalb Deutschlands ca. 20 % der gesamten CO_2 -Emissionen [123] und sind somit eine bedeutsame Quelle. Bei einer näheren Analyse der verfügbaren Technologieoptionen steht ebenfalls außer Frage, dass der Verbrennungsmotor für die nächsten Dekaden die dominante Antriebsquelle für den mobilen Einsatz bleiben wird. In gleichem Maße unstrittig ist auch, dass Motoren im Hinblick auf höhere Wirkungsgrade und damit niedrigere Kohlendioxid- und Schadstoffemissionen, wie von Stickoxid (NO_x), Kohlenmonoxid (CO) und unverbrannte Kohlenwasserstoffe, weiterzuentwickeln sind. Durch einen höheren Wirkungsgrad der Motoren sinkt der Verbrauch von Brennstoff, womit gleichzeitig die Reduktion der Schadstoffemission verbunden ist. Verschiedene Untersuchungen [137, 15] zeigen den vorhergesagten Energieverbrauch im Transportsektor zwischen den Jahren 2030 und 2050. Gegenüber dem klassischen Verbrennungsmotor für Benzin oder Diesel spielen elektrische oder alternative Antriebe eine untergeordnete Rolle. Eine Begründung hierfür liegt in der geringeren Energiedichte der meisten Alternativen gegenüber flüssigen Brenn-

stoffen wie Benzin- oder Diesel-Kraftstoffen.

Hinzu kommen der Drang nach einer deutlichen Verkürzung der Entwicklungszeiten sowie die steigenden Qualitätsanforderungen, welche gerade in der Automobilindustrie eine Folge der durch die Globalisierung ausgelösten Steigerung des Wettbewerbsdrucks sind. Um diesen globalen Wettbewerb auch weiterhin bestimmen zu können, ist die Entwicklung verbesserter und zuverlässiger Auslegungsverfahren eine notwendige Schlussfolgerung. Eine im Hinblick auf die Reduzierung von Schadstoffemissionen vielversprechende Technologie stellt der Benzinmotor mit Direkteinspritzung dar, der in unterschiedlichen Varianten untersucht wird. Das Spektrum dieser Varianten reicht von „downsizing“ über wand- oder strahlgeführte Konzepte der Fremdzündung, die technisch bereits realisiert sind, bis hin zu modernen Selbstzündungskonzepten, die Gegenstand der Forschung sind. Der Ansatz des „downsizing“ verfolgt die Reduzierung des Treibstoffverbrauchs und verringert damit die Bildung von Schadstoffen, indem Bauteile verkleinert, die Leistungsfähigkeit jedoch erhalten wird. Dies ist zum Beispiel durch eine Verringerung des Hubraums und eine Aufladung des Verbrennungsmotors in Verbindung mit der Direkteinspritzung erreichbar. Durch dieses Vorgehen sind bereits Brennstoffeinsparungen von bis zu 20 % erreicht worden [93].

Der Ansatz der Selbstzündung wurde in der Vergangenheit aus unterschiedlichen Technologieansätzen entwickelt und wird deshalb auch unterschiedlich bezeichnet. Es haben sich die Begriffe CAI („Controlled Auto Ignition“), CIHC („Compression Ignited Homogeneous Charge“), PCCI („Premixed Charge Compression Ignition“) oder HCCI („Homogeneous Charge Compression Ignition“) etabliert. Die zügige Realisierung beziehungsweise Weiterentwicklung dieser attraktiven Konzepte auf dem Gebiet der Selbstzündung ist jedoch begrenzt durch unvollständige Kenntnisse wesentlicher technisch-wissenschaftlicher Mechanismen. Dabei spielt unter anderem die Vorhersage turbulenter Strömungen, die Zerstäubung, Verdampfung und Verbrennung von Sprays in turbulenten Umgebungen und die Grundlage der komplexen Kinetik technischer Brennstoffe zur Beschreibung der Selbstzündung eine große Rolle. Alle diese Fragestellungen weisen die zentrale Gemeinsamkeit auf, dass sie aufgrund ihres Komplexitätsgrades nur durch den verstärkten Einsatz numerischer Simulationsmethoden lösbar sind. Die bisherigen Vorhersagemethoden, die auf „Reynolds-Averaged Navier-Stokes“ (RANS) Modellen basieren, sind nur zum Teil in der Lage, diese Mechanismen zu beschreiben. Die Grobstruktursimulation, im Englischen als „Large Eddy Simulation“ (LES) bezeichnet, stellt zeitlich aufgelöste, dreidimensionale Informationen des Strömungs- und Mischungsfeldes bereit, die zur Optimierung des Strömungsverhaltens und damit einhergehend von Verbrennungsprozessen in Motoren genutzt werden können. Diese Aspekte sollen den Schwerpunkt dieser Arbeit bilden.

Eine weitere Randbedingung beeinflusst die Motivation dieser Arbeit. Große Fortschritte in der Entwicklung der Computerhardware ermöglichen die Berechnung immer komplexerer Systeme in vertretbarer Rechenzeit. Dieser Trend wird sich auch in den nächsten Jahren vor allem durch die intensive Nutzung von leistungsfähigen Parallelrechnern fortsetzen, sodass in naher Zukunft das Potential zur Berechnung innermotorischer Vorgänge, aufgrund zur Verfügung stehender Hardware, signifikant zunehmen wird.

1.2 Stand der Forschung

In den vergangenen Jahren ist ein deutlicher Fortschritt bei der Grobstruktursimulation von Verbrennungsprozessen gemacht worden. In der Industrie haben sich für die Entwicklung von Verbrennungsmotoren die bereits erwähnten RANS-Modelle etabliert, wobei hier zukunftsweisende Arbeiten zum Beispiel in den Veröffentlichungen von [35, 34, 25, 7] und [101] im Bereich von Strömungen in Verbrennungsmotoren, sogenannten „in-cylinder“ (IC)-Strömungen und Wärmeübertragung, durchgeführt wurden. Der Großteil der Untersuchungen auf dem Gebiet basieren auf der Verwendung des k - ε -Modells, eines Zweigleichungsturbulenzmodells (siehe Abschnitt 3.4).

Während zahlreiche experimentelle und konventionelle numerische Untersuchungen sich darauf beschränken, Informationen über das gemittelte Strömungs- und Mischungsfeld in einem Verbrennungsmotor zu erhalten, kann die Grobstruktursimulation detaillierte Informationen über Schwankungsphänomene liefern, um stark transiente Prozesse, die im Inneren eines Verbrennungsraums ablaufen, besser verstehen und beschreiben zu können. Reynolds sagte diese Eigenschaft bereits zu Beginn der Anwendung der numerischen Strömungssimulation, der „Computational Fluid Dynamics“ (CFD), voraus [102]: Eine Methode zur Turbulenz-Modellierung basierend auf einer räumlichen Filterung besitzt ein größeres Potential, Schwankungsphänomene zu erfassen, als Methoden basierend auf zeitlichen Mittelwerten.

Er erweiterte diese Aussage später auch auf Verbrennungsmotoren [103]. Darauf folgende Arbeiten [18, 46] und [94] bestätigen diese Annahme, indem sie die Ergebnisse beider Methoden einander gegenüberstellen und zeigen, dass die Grobstruktursimulation einen besseren Einblick und ein tieferes Verständnis der dreidimensionalen, instationären Strömung, welche charakteristisch für das Strömungsfeld eines Verbrennungsmotors ist, geben kann.

In diesem Zusammenhang wurden, aufbauend auf der Untersuchung einer achsensymmetrischen Motorkonfiguration [79], Ergebnisse einer Grobstruktursimulation [47] weniger aufeinanderfolgender Zyklen anhand von Momenten der Geschwindigkeit erster und zweiter Ordnung verglichen [46]. Untersucht wurden zusätzlich verschiedene Ansätze für die Feinstrukturmodellierung.

Allerdings sind Grobstruktursimulationen für Verbrennungsmotoren im Gegensatz zu Untersuchungen für Gasturbinen erst in relativ wenigen Arbeiten dokumentiert. Eine Übersicht über Veröffentlichungen zu Grobstruktursimulationen in Motoren ist in [18] und [118] gegeben.

In einer Arbeit wurde ein Modell mit zwei Mischungsbrüchen angewandt, um zwei Einspritzungen von Brennstoff in einen Dieselmotor zu realisieren [43]. Dabei wurde jeder Einspritzung ein Mischungsbruch zugeordnet. Bei der Durchmischung beider Mischungsbruchfelder wird ein zweidimensionales Flamelet initialisiert, wodurch Wärme- und Stofftransport reaktiver Strukturen im Mischungsbruchraum stattfinden können.

Die Erschließung des Potentials der Grobstruktursimulation zur Vorhersage von mit flüssigen Brennstoffen genährten Flammen im Hinblick auf den Einspritzvorgang in einen mit Direkteinspritzung (DI) betriebenen Verbrennungsmotor steht weitestgehend am Anfang. Der aktuelle Wissensstand zur Grobstruktursimulation von turbulenten Mehrphasenströmungen ist zum Beispiel in [39] und [77] dargestellt.

Eine der Alternativen, den zukünftigen Emissionsstandards für Kraftfahrzeugmotoren zu

entsprechen, ist der Betrieb eines Verbrennungsmotors im HCCI-Verbrennungsmodus [81]. Dazu wurden innovative, experimentelle Forschungsarbeiten an einem im HCCI-Modus betriebenen Viertaktmotor durchgeführt [81]. Der Fokus der Arbeit lag unter anderem auf der Untersuchung der chemischen Kinetik des Anfangsstadiums der Verbrennung.

Aufgrund der Möglichkeiten zur deutlichen Reduktion von NO_x - und Partikelemissionen bei geringen CO_2 -Emissionen durch Realisierung hoher thermischer Leistungen unter Teillastbedingungen sind HCCI-Konzepte zukünftig von hohem Interesse [20, 84].

In [47] wird die Generierung von Rechengittern untersucht und die Analyse von Turbulenzeffekten in Hubkolbenmotoren durchgeführt.

In [80] dagegen steht die Untersuchung der Entwicklung einer Methode für instationäre, reagierende Strömungen auf bewegten Gittern im Mittelpunkt der Arbeit. In einer zuvor bereits erwähnten Arbeit [18] wird der Stand des Wissens zur Grobstruktursimulation in Motoren zusammengefasst, jedoch ohne besondere Berücksichtigung der Verbrennung. In [138] wird der Einfluss des Kolbens auf Verlöschungseffekte in Verbrennungsmotoren untersucht, wohingegen sich [113] mit der Entwicklung von Feinstrukturmodellen im Hinblick auf Mischungssimulationen bei der motorischen Verbrennung befasst. Dabei werden Eingleichungsmodelle zum Teil in Verbindung mit dynamischen Prozeduren verwendet.

Mit der „Detached Eddy Simulation“ (DES), einem Ansatz, der die RANS-Methode mit der LES koppelt, sind Untersuchungen bezüglich zyklischer Schwankungen an einer realen Motorgeometrie für 13 aufeinanderfolgende Zyklen ohne Zündung oder Verbrennung durchgeführt worden [45]. Aufgrund dieser Analyse wurden starke Einflüsse der zyklischen Schwankungen auf die Verbrennung in Aussicht gestellt, die auf verschiedene Effekte wie zum Beispiel Ladungsbewegung und Gemischbildung zurückzuführen sind.

In einer weiteren Arbeit ist eine Untersuchung der zyklischen Schwankungen in einem geometrisch vereinfachten Verbrennungsmotor mittels eines „Shear Stress Transport“ (SST)-DES-Modells durchgeführt worden [44]. Dabei wurde die bessere Eignung des SST-DES-Modells gegenüber URANS-Ansätzen festgestellt zyklische Schwankungen im Besonderen während der Kompression vorherzusagen. Den Einfluss der zyklischen Schwankungen auf die Gemischbildung in einer realen Motorgeometrie wurde von [33] im geschleppten Betrieb untersucht. Für selbige Konfiguration wurde in [22] die Korrelation der zyklischen Schwankungen zwischen dem Geschwindigkeitsfeld und dem Verhalten des Sprays infolge von Brennstoffeinspritzung für 30 konsekutive Motorzyklen analysiert.

Einer der wenigen geeigneten Datensätze zum Vergleich experimenteller Untersuchungen mit den Ergebnissen der Grobstruktursimulationen wird von [27] bereitgestellt. Anhand der experimentellen Untersuchungen an einem optisch zugänglichen Einzylinder-Motor [72, 71] werden Validierungen von LES-Rechnungen mittels Vergleichen mit experimentellen Daten durchgeführt. Basierend auf detaillierten Untersuchungen der Strömungsphänomene im Ansaug- und Auslasstrakt wird eine Methode zur Verbesserung der Güte einer Grobstruktursimulation mit akustischem Schwerpunkt beschrieben. Weiterhin werden zyklische Schwankungen der Geschwindigkeit für 25 aufeinanderfolgende Zyklen des Motors im geschleppten Betriebspunkt mithilfe des Experiments und der Simulation analysiert. Diese Motorkonfiguration wurde ebenfalls im gefeuerten Betrieb untersucht [26, 36]. Dabei wurde in [26] ein stabiler Betriebspunkt, der durch geringe zyklische Schwankungen charakterisiert ist, betrachtet und gezeigt, dass die großen Skalen der aerodynamischen Schwankungen der vermeintliche Hauptgrund für zyklische Variationen sind. Diese Beob-

achtung wurde in [36] bestätigt, wobei in dieser Arbeit zusätzlich ein instabiler Betriebspunkt untersucht wurde. In beiden Analysen wurde die Turbulenz-Chemie-Interaktion mithilfe der „Thickened Flame Large Eddy Simulation“ (TFLES) abgebildet. Dabei wurde eine gute Vorhersage der experimentellen Ergebnisse anhand des zeitlichen und räumlichen Verhaltens der Flamme mithilfe der Grobstruktursimulation gezeigt.

In [104] wird die Realisierbarkeit der Grobstruktursimulation mehrerer Motorzyklen unter der Verwendung eines „Flame Surface Density“ (FSD)-Modells aufgezeigt. Dabei wird zuerst die Übereinstimmung der Flammenfaltung der reproduzierten Flammen mit den experimentellen Untersuchungen einer Propan-Luft-Flamme demonstriert und dieses Modell auf eine Simulation in einem fremdgezündeten (SI)-Motor angewendet. Der Druckverlauf im Zylinder der Simulation zeigt eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

Neuere Arbeiten, wie zum Beispiel [119, 129] und [33], beschäftigen sich vor allem mit der Analyse des Vorhersagepotentials der Anwendung der Grobstruktursimulation für Verbrennungsmotoren. Der Schwerpunkt liegt dabei auf den Strategien zur korrekten Erfassung der zyklischen Schwankungen. Verschiedene Veröffentlichungen zeigen die Eignung des in dieser Arbeit verwendeten Strömungslösers Kiva¹ der speziell für die Simulation von Strömungen in IC-Motoren ausgelegt ist, um transiente, dreidimensionale Strömungen mit der Grobstruktursimulation zu erfassen [33, 82].

1.3 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist die Weiterentwicklung der Grobstruktursimulation für moderne Brennverfahren, basierend auf der Selbstzündung von Kraftstoff-Luft-Gemischen, sowie deren Validierung. Dazu ist es notwendig, einen auf einem detaillierten Chemiemechanismus basierenden und bereits bestehenden reduzierten Chemiemechanismus, der in der Lage ist, Selbstzündung abzubilden, in ein geeignetes Feinstrukturmodell zu integrieren. Diese Integration wird mithilfe von experimentellen Daten, wie zum Beispiel Geschwindigkeitsfeldern oder Zündortverteilungen, validiert.

Die Arbeit ist in sieben Kapitel gegliedert, wobei die Motivation und der Stand der Forschung das erste Kapitel darstellen.

Das zweite Kapitel soll einen Ein- beziehungsweise Überblick über motorische Grundlagen geben und verschiedene Begriffe und Blickwinkel definieren, die für diese Arbeit wichtig sind. Die theoretischen Grundlagen, welche die Basis dieser Arbeit bilden, sowie die notwendigen Modelle, wie Turbulenz- oder Chemiemodelle, werden im anschließenden dritten Kapitel vorgestellt. Zusätzlich wird eine Strategie, die einer Reduktion des numerischen Aufwands dienen soll, dargelegt. Diese basiert sowohl auf der Verringerung der aufzulösenden Skalen als auch auf der Verringerung der für die chemischen Reaktionen zu berücksichtigenden Erhaltungsgrößen.

In Kapitel vier wird das dieser Arbeit zugrunde liegende numerische Gesamtverfahren vorgestellt und auf die Umsetzung der in Kapitel drei vorgestellten theoretischen Grundlagen in dem Strömungslöser genauer eingegangen.

Die Verifikation und Validierung des entwickelten Strömungslösers werden in Kapitel fünf

¹Kiva: Eine Kiva ist ein in der Regel runder und teilweise unterirdischer Zeremonien- und Versammlungsraum der Pueblo-Kulturen. Das Wort selbst stammt aus der Sprache der Hopi.

unter der Anwendung verschiedener einfacher Testfälle durchgeführt.

Die Vorhersagequalität des in dieser Arbeit entwickelten Simulationswerkzeuges wird in Kapitel sechs anhand der Anwendung auf komplexe Konfigurationen und des Vergleichs mit experimentellen Daten aufgezeigt und bewertet.

Den Abschluss bildet Kapitel sieben, welches eine Zusammenfassung der in dieser Arbeit erzielten Ergebnisse und einen Ausblick auf mögliche zukünftige Arbeiten beinhaltet.