

Simulation homogener Diesel-Brennverfahren

Von der Fakultät für Maschinenbau
der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur
genehmigte Dissertation
von

Dipl.-Ing. Clemens Bauer
geboren am 20.10.1973 in Karlsruhe

2008

1. Referent: Prof. Dr.-Ing. habil. G. P. Merker
2. Referent: Prof. Dr.-Ing. J. Seume

Tag der Promotion: 20. Juni 2008

Kurzfassung

Zur Abbildung der Zündung und Verbrennung von homogenen Diesel-Brennverfahren wurden zwei Modellierungsansätze entwickelt. In beiden Ansätzen wird die Wärmefreisetzung während der Cool-Flame-Verbrennung als der ersten Phase des homogenen Verbrennungsprozesses berücksichtigt. Der erste Ansatz wird in dieser Arbeit als Multi-SR-Ansatz bezeichnet und beruht auf der Kopplung eines Systems von stochastischen Reaktoren mit einem 3d-CFD-Code. Die stochastischen Reaktoren werden in Lagrange'scher Betrachtungsweise durch Partikel modelliert, die sich konvektiv mit der Strömung mitbewegen. In Abhängigkeit ihrer örtlichen Lage repräsentieren sie dabei den sie umgebenden Bereich im Brennraum. Dabei werden Informationen hinsichtlich Konvektion, Verdampfung, Wandwärmeübergang sowie die turbulente Zeitskala als Grundlage für den turbulenten Mischungsprozess aus dem 3d-CFD-Code an die stochastischen Reaktoren übergeben. Mit diesem Modellierungskonzept wird implizit die Zündung und Verbrennung beschrieben. Beim zweiten Ansatz handelt es sich um einen Progressvariablenansatz mit der Reaktionszeit als Progressvariable zur turbulenten Beschreibung der Zündung bei homogenen Diesel-Brennverfahren. Dem Modell ist eine online-generierte Library hinterlegt, in der mit Hilfe von homogenen Reaktorrechnungen laminare Energiefreisetzungsraten in Abhängigkeit der Reaktionszeit berechnet werden. Auf Basis dieser Library wird die während der Zündphase turbulent freigesetzte Wärme berechnet und kombiniert mit einer vereinfachten Speziesumsetzung in den 3d-CFD-Code eingekoppelt. Nach Erreichen eines geeigneten Kriteriums erfolgt die Umschaltung vom Zünd- auf ein konventionelles Diesel-Verbrennungsmodell, mit dem die Hauptverbrennung abgebildet wird.

Sowohl der Multi-SR-Ansatz als auch der Progressvariablenansatz wurden in den dreidimensionalen CFD-Code KIVA [87] implementiert und anhand von 1-Zylinder-Versuchsergebnissen validiert. Dabei ergab sich für den Multi-SR-Ansatz in Bezug auf Beginn der Cool-Flame-Verbrennung und Hauptverbrennung, Spitzendruckniveau und Ausbrandverhalten in den meisten Fällen eine gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen. Die Wärmefreisetzung während der Cool-Flame-Phase wurde jedoch leicht unterschätzt. Etwas größere Diskrepanzen zu den Messergebnissen wies dagegen der Progressvariablenansatz auf. In allen Validierungsfällen wurde die Wärmefreisetzung während der Cool-Flame-Verbrennung stark unterschätzt und der Beginn der Hauptverbrennung erfolgte gegenüber der Messung immer leicht verzögert. Des Weiteren zeigte das Modell Schwächen bei der Abbildung der Hauptverbrennung und des Ausbrandverhaltens im Falle von homogen-heterogenen Betriebspunkten.

Schlagworte:

Homogene Verbrennung, Cool-Flame, CFD

Abstract

For the modeling of ignition and combustion of homogeneous Diesel combustion processes two modeling approaches were developed. In both approaches the heat release during the cool flame phase as the first phase of the homogeneous combustion process is considered. The first approach is called Multi-SR-approach within this work and is based on the coupling of a system of stochastic reactors with a 3d-CFD-code. The stochastic reactors are modeled in a lagrangian way by particles which are moved convectively with the flow field. Depending on the local position they represent their surrounding area in the combustion chamber. Information concerning convection, evaporation, wall heat transfer as well as the turbulent timescale needed for the turbulent mixing process are transferred from the 3d-CFD-Code to the stochastic reactors. With this modeling approach ignition and combustion are implicitly considered. The second approach is a progress variable one with the reaction time as progress variable used for the turbulent description of the ignition phase of homogeneous Diesel combustion processes. The model is based on an online-generated library. Within this library the laminar heat release rates are calculated depending on the reaction time. Based on the library the turbulent released energy during the ignition phase is calculated. In the end the turbulent released energy is coupled to the 3d-CFD-Code based on a simple chemical reaction. After reaching a predefined criterion the ignition model is switched to a conventional Diesel combustion model. With this model the main combustion part is simulated then.

The Multi-SR-approach as well as the progress variable approach were implemented in the three-dimensional CFD-Code KIVA [87] and validated with single cylinder data. In most cases the Multi-SR-approach showed a good agreement respect to start of the cool flame and main combustion, maximum pressure and post flame behaviour. The heat release rate during the cool flame phase however was slightly underestimated. Somewhat larger discrepancies occurred using the progress variable approach. In all cases the start of the cool flame phase was hit well but the heat release during the cool flame phase has been highly underestimated. Also the start of the main combustion was predicted a bit too late in all cases. Furthermore the model showed deficiencies during the main combustion and the post flame phase in case of homogeneous heterogeneous engine operating points.

Keywords:

homogeneous combustion, cool flame, CFD

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand zu großen Teilen während meiner Tätigkeit im Forschungsbereich Verbrennungsmotorische Antriebe der DaimlerChrysler AG in Stuttgart-Untertürkheim.

Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. G. P. Merker danke ich für das Ermöglichen dieser Arbeit und die Übernahme des Hauptreferats. Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. J. Seume möchte ich mich für die Übernahme des Korreferats bedanken.

Meinem Betreuer, Herrn Dr.-Ing. C. Krüger, gilt mein besonderer Dank für die zahlreichen Anregungen und für die fruchtbaren Diskussionen.

Abschließend danke ich meinen Kolleginnen und Kollegen - unter Hervorhebung von Herrn Dr.-Ing. R. Steiner und Dipl.-Ing. P. Wenzel - für die hervorragende Zusammenarbeit und Unterstützung.

Karlsruhe, im April 2008

Für meine Frau Birgit
und meine Eltern

Inhaltsverzeichnis

Formelzeichen	10
1 Einleitung	15
1.1 Hintergrund	15
1.2 Motivation und Aufbau der Arbeit	17
2 Grundlagen homogener Brennverfahren	18
2.1 Motivation und Grundcharakterisierung homogener Brennverfahren	18
2.2 Abgrenzung der Verfahren: Otto, Diesel, homogene Verbr.	19
2.3 Stand der Technik beim HCCI-Verfahren	24
2.4 Einflussparameter bei homogenen Brennverfahren	27
2.4.1 Temperatur	27
2.4.2 Abgasrückführung (AGR)	27
2.4.3 Verdichtungsverhältnis ϵ	28
2.4.4 Drall	28
2.4.5 Drehzahl	29
2.4.6 Kraftstoff	29
2.4.7 Einspritzdruck	30
2.4.8 Einspritzdüsengeometrie	30
2.4.9 Einspritzstrategien	32
2.4.10 Brennraumgeometrie	33
2.5 Vor- und Nachteile homogener Brennverfahren	33
3 Kinetik bei homogenen Brennverfahren	36
3.1 Grundtypen chemischer Reaktionen	36
3.2 Molekularstruktur von Kohlenwasserstoffen	37
3.3 Niedertemperatur-Kinetik	37
3.4 Mitteltemperatur-Kinetik	39
3.5 Hochtemperatur-Kinetik	40
3.6 Cool-Flames und negativer Temperaturkoeffizient (NTC)	41
3.7 Zündverhalten von Kohlenwasserstoffen	43
3.8 Einfluss motorisch relevanter Temperaturen, Gemischzusammensetzungen, Drücke und AGR-Raten auf den Zündprozess	44
3.9 Einfluss der Turbulenz auf die Verbrennung	45
3.10 Schadstoffverhalten der motorischen homogenen Verbrennung	45
3.11 Numerische Simulation kinetischer Prozesse	47

3.12	Grundgleichungen der 0d-Kinetik-Simulation	48
3.13	Ersatzkraftstoffe für die Simulation von Diesel- und Otto...	49
3.14	Validierungsmöglichkeiten von kinetischen Mechanismen	50
4	Reaktorbasierte Simulation homogener Brennverf.	52
4.1	0d-Modelle	53
4.1.1	Einzonen-Modell - Homogener Reaktor (HR)	53
4.1.2	Mehrzonen-Modell	54
4.1.3	Stochastischer Reaktor (SR)	55
4.2	3d-Modell: Transported-PDF-Ansatz	56
4.2.1	Turbulente Mischungsmodelle	60
4.3	Bewertung der 0d- und 3d-Modelle	63
4.3.1	Detaillierungsgrad und Rechenaufwand	63
4.3.2	Anwendbarkeit auf motorische Brennverfahren	64
4.4	Erweiterung des SR-Ansatzes: Multi-SR-Ansatz	66
4.4.1	Kopplung Multi-SR-Code/3d-CFD-Code	67
4.4.2	A: SR-Start-Initialisierung	69
4.4.3	B: Partikelbewegung	70
4.4.4	C: Bestimmung der Nachbarzellen der SR	70
4.4.5	D: Verdampfung	71
4.4.6	E: Kompression, Kinetik und Druckausgleich des SR-Systems	74
4.4.7	F: Mischungsprozess	77
4.4.8	G: Diffusion bzw. Stoffaustausch	77
4.4.9	H: Wandwärmeübergang	79
4.4.10	I: Energie-Einkopplung in den CFD-Code mit vereinfachter Spezies- Umsetzung	79
4.4.11	Konzeptvergleich: Multi-SR / SR	80
4.4.12	Konzeptvergleich: Multi-SR / Transported-PDF	81
4.4.13	Stärken und Schwächen des Modells	83
4.4.14	Modelltechnische Verbesserungsmöglichkeiten	83
5	3d-CFD-Simulation homogener Diesel-Brennverf.	85
5.1	Grundgleichungen der 3d-Simulation	85
5.2	Modellierung der Einspritzung und Gemischbildung	89
5.2.1	Discrete-Droplet-Modell (DDM)	90
5.2.2	Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray (ICAS)-Modell	91
5.2.3	Strahladaptive Vernetzung	91
5.3	Diskussion bekannter Simulationsmodelle	92
5.3.1	Zündmodellierung	93
5.3.2	Verbrennungsmodellierung	100
5.3.3	Kombinierte Zünd- und Verbrennungsmodellierung	105
5.4	Progressvariablenansatz	112
5.4.1	Identifikation der Reaktionszeit als Progressvariable	113
5.4.2	Umsetzung des Gesamtkonzepts unter Berücksichtigung der Chemie- Turbulenz-Interaktion	114
5.4.3	Numerische Umsetzung der Kinetik-Berechnung im Modell	122

5.4.4	Stärken und Schwächen des Modells	123
5.4.5	Modelltechnische Verbesserungsmöglichkeiten	123
6	Validierung der Modelle	124
6.1	Validierungsfälle	124
6.2	Kinetischer Mechanismus	126
6.3	Multi-SR-Ansatz	126
6.3.1	0D-Validierung	126
6.3.2	3d-Validierung des Referenzfalls A0	127
6.3.3	3d-Validierung von B1-B3, C1-C3	136
6.3.4	Bewertung des Multi-SR-Ansatzes bez. der Anwendung auf motorische Brennverfahren	140
6.4	Progressvariablenansatz	141
6.4.1	0D-Validierung	141
6.4.2	3d-Validierung des Referenzfalls A0	141
6.4.3	Validierung des Kriteriums für die Umschaltung vom Zünd- auf das Verbrennungsmodell	145
6.4.4	3d-Validierung von B1-B3, C1-C3	145
6.4.5	Bewertung des Progressvariablenansatzes bez. der Anwendung auf mo- torische Brennverfahren	148
7	Schlussfolgerung und Ausblick	149
7.1	Schlussfolgerung	149
7.2	Ausblick	151
A	Mischungsbruch-Konzept und "Presumed PDF"-Ansatz	153
B	Qualitative Fehlerabschätzung für die turbulente Einkopplung des Kraftstoff- dampfs im Multi-SR-Modell	156
C	Herleitung der Transportgleichung der Reaktionszeit t_{reac}	158
D	Passive Berechnung der lokalen inerten Temperatur T_{inert} und des lokalen inerten Druckes p_{inert} bei einer CFD-Rechnung mit Verbrennung	160

Formelzeichen

Lateinische Buchstaben

A	Fläche oder Stoßfaktor in Arrhenius-Gleichung
A_1, A_2	Modellkonstanten der Sutherland-Formel
c	Konzentration
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
$c_{\epsilon_1}, c_{\epsilon_2}, c_{\epsilon_3}$	Modellkonstanten im k - ϵ -Modell
c_μ	Modellkonstante zur Berechnung der Wirbelviskosität
c_χ	Modellkonstante zur Berechnung der skalaren Dissipationsrate
C_Φ	Modellkonstante
C_0	Modellkonstante
D	Diffusionskoeffizient
E_a	Aktivierungsenergie in Arrhenius-Gleichung
f	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
\dot{f}_{bre}	Quellterm für Tropfenzerfall
\dot{f}_{col}	Quellterm für Tropfenkollision
F	Verteilungsfunktion, Widerstandskraft
\dot{F}^s	Verdampfungsquellterm in Impulserhaltungsgleichung
g_j	Erdbeschleunigung
h	Spezifische Enthalpie
i_{th}	Spezifische thermische innere Energie
J	Wärmestromdichte
J_i^α	Diffusions- und Wärmestromdichte des Skalars α in Richtung i
k	Turbulente kinetische Energie, Geschwindigkeitskoeffizient chem. Reaktion
m	Masse
m_p	Partikelmasse
M	Molare Masse oder Masse
N_p	Partikelanzahl
N_{hr}	Anzahl der HR innerhalb eines SR
$N_{neighbour}$	Anzahl der Nachbarzellen
p	Druck
P	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
Pr	Prandtl-Zahl
Q	Quellterme
r	Radius

R	Spezifische Gaskonstante, zeitliche Änderung Tropfenradius
Re	Reynolds-Zahl
S_α	chemischer Quellterm
Sc	Schmidt-Zahl
t	Zeit
T	Temperatur
\dot{T}_{tr}	Zeitliche Änderung Tropfentemperatur
u	Spezifische innere Energie oder Geschwindigkeit
V	Volumen
\dot{W}^s	Verdampfungsquellterm in Erhaltungsgleichungen für k und ϵ
x	Ortskoordinate
y	Massenbruch
Y	Progressvariable
Z	Mischungsbruch
Z_j	Elementmassenbruch

Griechische Buchstaben

α	Wärmeübergangskoeffizient
γ	Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten c_p und c_v
Γ	Allgemeine Transportkonstante
λ	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient oder Luftverhältnis
μ	Dynamische Viskosität
ν	Kinematische Viskosität oder Stöchiometriekoeffizient
ϵ	Turbulente Dissipationsrate oder Verdichtungsverhältnis
ρ	Dichte
$\dot{\rho}^c$	Chemiequellterm in Massenerhaltungsgleichung
$\dot{\rho}^s$	Verdampfungsquellterm in Massenerhaltungsgleichung
σ	Spannungstensor
τ	Charakteristische Zeitskala
τ_{chem}	Charakteristische chemische Zeitskala
τ_{turb}	Charakteristische turbulente Zeitskala
ϕ	Beliebige Skalare Größe
Φ	Beliebige Skalare Größe
χ	Skalare Dissipationsrate
ψ	Fluideigenschaft
$\dot{\omega}$	Reaktionsrate oder Frequenz

Sonstige Zeichen

\mathcal{M}	Massendichtefunktion
\mathcal{R}	Universelle Gaskonstante
∂	Partielle Ableitung
∇	Nabla-Operator
$()_0$	Ausgangszustand
$()_{air}$	Luft
$()_{cell}$	Zelle
$()_{cfd}$	CFD-Zelle
$()_{comp}$	Kompression
$()_{cyl}$	Zylinder
$()_{egr}$	Restgas
$()_{eq}$	Gleichgewichtszustand
$()_{evap}$	Verdampfung
$()_{fuel}$	Kraftstoff
$()_{hr}$	Homogener Reaktor
$()_{ind}$	Indikatorspezies
$()_{init}$	Initialisierung
$()_{inj}$	Einspritzung
$()_{inert}$	Inerte Bedingungen
$()_{kin}$	Kinetik
$()_{lam}$	Laminare Bedingungen
$()_{mid}$	Mittelwert
$()_{mix}$	Mischung
$()_n$	Zeitebene n
$()_{n+1}$	Zeitebene n+1
$()_{reac}$	Reaktion
$()_{rel}$	Freigesetzte Energie
$()_{sr}$	Stochastischer Reaktor
$()_{turb}$	Turbulenz
$()_{tr}$	Tropfen
$()_{vap}$	Kraftstoffdampf
$()_{wall}$	Brennraumwand
$()'$	Turbulente Schwankungsgröße
$()''$	Favre-Mittelung der Fluktuationen (Varianz)
$(\dot{\ })$	Zeitliche Ableitung
$(\bar{\ })$	Ensemble-Mittelung oder mittlere Eigenschaft
$(\tilde{\ })$	Favre-Mittelung
$(\langle \ \rangle)$	Erwartungswert

Abkürzungen

0d	Nulldimensional
1d	Eindimensional
3d	Dreidimensional
AGR	Abgasrückführung
CFD	Computational Fluid Dynamics (engl.)
DDM	Discrete-Droplet-Model (engl.)
DNS	Direkte numerische Simulation
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition (engl.)
HD	Hydraulischer Durchfluss
HE	Haupteinspritzung
HR	Homogener Reaktor
ICAS	Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray (engl.)
IDEA	Integrated-Diesel-European-Action (engl.)
KW	Kurbelwinkel
LES	Large-Eddy-Simulation (engl.)
MDF	Mass-Density-Function (engl.)
nOT	Nach oberen Totpunkt
NTC	Negative Temperature Coefficient (engl.)
OT	Oberer Totpunkt
PDF	Probability-Density-Function (engl.)
RANS	Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (engl.)
SB	Spritzbeginn
SR	Stochastischer Reaktor
T-PDF	Transported-Probability-Density-Function (engl.)
UT	Unterer Totpunkt
vOT	Vor oberen Totpunkt
VE	Voreinspritzung

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Hintergrund

Die immense wirtschaftliche Bedeutung des Gütertransports wie auch die hohe gesellschaftliche Bedeutung der Mobilität ist unbestritten. Bei Schiffen, Lkw und Pkw stellen dabei Verbrennungsmotoren das mit weitem Abstand gängigste Antriebskonzept dar. Der Hauptgrund für diese Entwicklung liegt in der hohen Leistungsdichte von Verbrennungsmotoren und dem leicht handhabbaren flüssigen Kraftstoff mit seinem hohen spezifischen Energieinhalt.

Die beiden grundlegenden Antriebskonzepte bilden der Ottomotor und der Dieselmotor. Letzterer erfreute sich schon immer in Schiffen und schweren Lkw, insbesondere wegen seiner höheren Wirtschaftlichkeit, großer Beliebtheit, während im Segment der Pkw bisher die Verkaufszahlen der Ottomotoren über denen der Dieselmotoren lagen. Allerdings zeichnet sich in den letzten Jahren auch hier deutlich ein Trend zum Dieselmotor ab.

Bei der Weiterentwicklung von Verbrennungsmotoren stehen zwei Aspekte im Vordergrund: zum einen der Kraftstoffverbrauch, zum anderen die Schadstoffemissionen. Treibende Kraft für die Verbrauchsverringerung von Verbrennungsmotoren sind dabei die Reduzierung des CO₂-Ausstoßes zur Minderung des Treibhauseffekts wie auch die endlichen fossilen Brennstoffe. Dabei ist insbesondere interessant, dass in den letzten Jahren erstmals keine nennenswerten Korrekturen der weltweiten Erdölreserven mehr nach oben erfolgt sind. Nach heutigen Schätzungen [1] wird deshalb davon ausgegangen, dass Reserven, die mit geringem technischen Aufwand abbaubar sind, noch etwa 50 Jahre reichen werden.

Die negativen Einflüsse durch die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen auf Mensch und Natur haben insbesondere in den vergangenen zehn Jahren zu einer drastischen Verschärfung der Schadstoffgrenzwerte seitens der Politik geführt. In Abbildung 1.1 ist beispielhaft die Entwicklung der Schadstoffgrenzwerte der Europäischen Union für Ruß und NO_x für Diesel-Pkw dargestellt.

In den vergangenen Jahren haben diverse Technologien einen sehr großen Beitrag zur Verbrauchs- bzw. zur Schadstoffminimierung geleistet. Beim Ottomotor sind dabei der 3-Wege-Katalysator, Abgasturboaufladung und die Direkteinspritzung zu nennen. Ein großer Technologiesprung ist beim Dieselmotor durch die Entwicklung weg vom Vorkammerkonzept hin zur Direkteinspritzung vollzogen worden. Hinzu kommen die Abgasrückführung und die Vierventil-Technik. Die Common-Rail-Einspritzung mit der Möglichkeit getakteter Einspritzungen für schadstoffoptimierte Einspritzstrategien und der Darstellbarkeit hoher Einspritzdrücke zur Verbesserung der Gemischaufbereitung leisten ebenfalls einen immensen

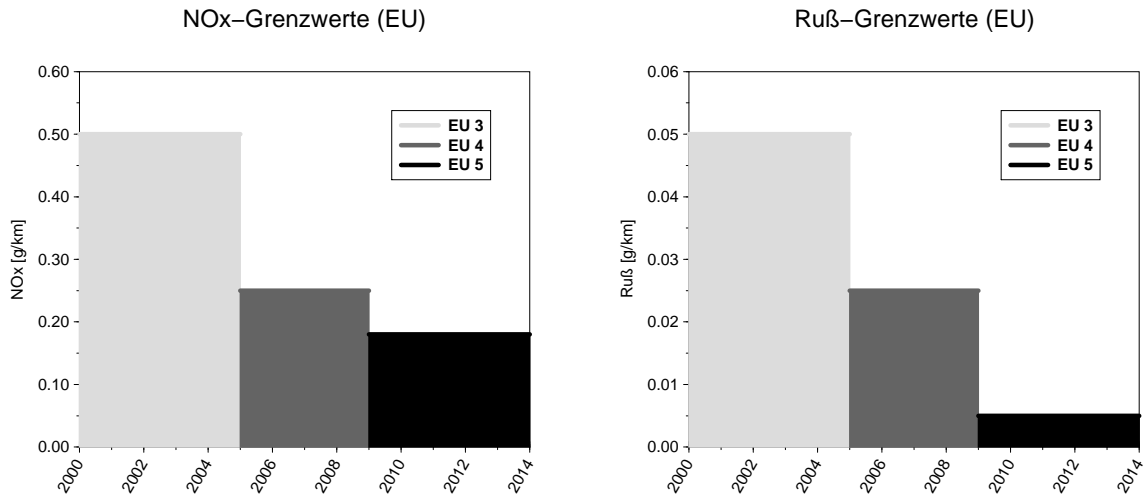


Abbildung 1.1: Entwicklung der Schadstoffgrenzwerte (NO_x und Ruß) für Diesel Pkw in der Europäischen Union [133]

technologischen Beitrag. Da der Dieselmotor im gesamten Betriebsbereich bei Luftüberschuss betrieben wird, kann die bewährte 3-Wege-Katalysator-Technologie des Ottomotors nicht übertragen werden, weshalb der Dieselmotor insgesamt mit höheren Schadstoffemissionen, insbesondere bei NO_x und Ruß, zu kämpfen hat. Zur Verringerung des Rußausstoßes kann jedoch die aktuelle Technologie des Dieselpartikelfilters gute Erfolge verbuchen. Gemessen an den extrem niedrigen zukünftigen Abgasgrenzwerten (siehe Abbildung 1.1) stoßen jedoch auch diese Technologien an ihre Grenzen. Ein zukünftiges Lösungsszenario sieht wie folgt aus: Der Fokus liegt auf der innermotorischen Vermeidung der Schadstoffe, so dass der Aufwand der Abgasnachbehandlung auf ein Minimum reduziert werden kann. Für die innermotorische Schadstoffvermeidung ist in den letzten Jahren sehr viel Forschungs- und Entwicklungsarbeit im Bereich der homogenen Brennverfahren geleistet worden. Bei diesem Konzept wird der Kraftstoff möglichst homogen im Brennraum als mageres Gemisch verteilt. Die folgende Kompressionszündung gewährleistet eine verteilte Verbrennung im gesamten Brennraum ohne Ausbildung einer Flammenfront. Dadurch werden lokale Spitzentemperaturen vermieden und somit die NO_x -Bildung stark reduziert. Die fehlenden fetten Gemischzonen unterbinden weitestgehend die Rußbildung. Auf diese Weise kann der insbesondere von der dieselmotorischen Verbrennung her bekannte NO_x -Ruß-Tradeoff umgangen werden.

Die Entwicklung von homogenen Brennverfahren wird durch die stark angestiegene Parametermatrix erschwert. Hierzu gehören u.a. das Verdichtungsverhältnis, neue Brennraumgeometrien gepaart mit entsprechend angepassten Einspritzdüsengeometrien und Einspritzstrategien.

In der Automobilindustrie stellt sich die Frage nach einer effektiven Entwicklungsunterstützung eines solchen Brennverfahrens vor allem hinsichtlich der immer kürzeren Entwicklungszeiten. Schon bei aktuellen Serien-Brennverfahren hat die Simulation gezeigt, dass sie deren Entwicklung zum einen als Analyse-Tool und zum anderen zur Vorauslegung von Konfigurationen maßgeblich unterstützen kann. Für die Simulation der innermotorischen Prozesskette - Ladungswechsel, Gemischbildung, Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung - kommt dabei wegen der starken lokalen Abhängigkeit der Phänomene nur die 3d-Simulation in Betracht. In den vergangenen Jahren wurden hierfür etliche Modelle entwickelt, die insbesondere den Einfluss der Turbulenz auf Zündung und Verbrennung berücksichtigen. Aufgrund der Komplexität der gesamten Prozesskette ist jedoch die uneingeschränkte Vorhersagefähigkeit

für alle Betriebszustände noch nicht möglich. Nach Kalibrierung der Modelle an geeigneten Betriebspunkten (insbesondere hinsichtlich Druck- und Heizverlauf) sind jedoch im näheren Parameter- und Geometrieumfeld Vorausberechnungen möglich. Auch die Visualisierung der innermotorischen Prozesse auf Basis von 3d-Simulationsergebnissen liefert einen wertvollen Beitrag zum Verständnis.

1.2 Motivation und Aufbau der Arbeit

Im Rahmen dieser Arbeit werden vorhandene Zünd- und Verbrennungsmodelle mit dem Ziel weiterentwickelt, auch homogene Diesel-Brennverfahren beschreiben zu können. Im Vordergrund stehen dabei Brennverfahren mit früher Homogenisierung. Der Fokus der Modellierung liegt auf der Abbildung der komplexen Zündphase. Diese zeichnet sich gegenüber konventionellen Brennverfahren wegen des in der Regel erheblich früheren Spritzbeginns und der fehlenden Fremdzündung durch lange Zündverzugszeiten aus. Bei Dieseldieselkraftstoff tritt als zusätzliche Schwierigkeit das Phänomen der mehrstufigen Zündung (Cool-Flame) auf. Insbesondere der Zündprozess von homogenen Brennverfahren mit seinem großen Zündverzug ist kinetisch dominiert und verlangt bei der Modellierung entsprechende kinetische Mechanismen. Hinzu kommt die Kinetik-Turbulenz-Interaktion, die bei der Modellbildung berücksichtigt werden muss.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich wie folgt: In Kapitel 2 werden aus motorischer Sicht die Grundlagen homogener Brennverfahren beschrieben. Einen Überblick über die kinetischen Abläufe bei Verbrennungsprozessen mit spezieller Betrachtung der für homogene Brennverfahren wichtigen Tieftemperaturkinetik gibt Kapitel 3. Das Kapitel schließt mit der Erläuterung des Schadstoffverhaltens und einer Einführung in die numerische Simulation 0-dimensionaler Verbrennungskinetik. Verbrennungsmodelle mit geschlossenem Reaktionsquellterm werden in Kapitel 4 behandelt. Zu diesen reaktorbasierten Modellierungskonzepten gehören insbesondere der homogene Reaktor, das Mehrzonen-Modell und der stochastische Reaktor. Als umfassendster Ansatz mit geschlossenem Reaktionsquellterm wird der Transported-PDF-Ansatz erläutert. Nach einer Diskussion dieser Modellierungskonzepte bez. der Simulation konventioneller und homogener Brennverfahren wird ein neuer Modellierungsansatz für homogene Diesel-Brennverfahren abgeleitet, der auf der Kopplung mehrerer stochastischer Reaktoren mit einem 3d-CFD-Code basiert. Kapitel 5 gibt einen kurzen Überblick über die Grundgleichungen der 3d-CFD-Strömungsberechnung sowie über die Bilanzierung der Spezies. Es schließt sich die Modellierung der Einspritzung an. Anschließend werden gängige Modelle für Zündung und Verbrennung hinsichtlich ihrer Tauglichkeit für homogene Diesel-Brennverfahren diskutiert. Es folgt die Beschreibung eines neuen Konzepts für die Zündmodellierung von homogenen Diesel-Brennverfahren unter Berücksichtigung von Wärmefreisetzung und Kinetik-Turbulenz-Interaktion mit anschließender Einkopplung in das 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodell [72]. Die Validierung der beiden im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Modelle erfolgt in Kapitel 6. Die Arbeit schließt mit der Zusammenfassung und dem Ausblick in Kapitel 7.

Kapitel 2

Grundlagen homogener Brennverfahren

2.1 Motivation und Grundcharakterisierung homogener Brennverfahren

Die etablierten motorischen Brennverfahren im Otto- wie auch im Dieselmotor sind in den vergangenen Jahren durch eine verschärfte Abgasgesetzgebung für Kraftfahrzeuge zunehmend in Bedrängnis geraten. Abhilfe konnte bisher durch eine Optimierung der bestehenden Brennverfahren und durch eine entsprechende Ergänzung mit Abgasnachbehandlungssystemen geschaffen werden. Insbesondere beim Dieselmotor sind diese jedoch mitunter sehr teuer, müssen wie im Fall des Partikelfilters in regelmäßigen Abständen regeneriert werden und haben eine von der Alterung abhängige Effizienz. Folglich besteht ein sehr großes Interesse bezüglich einer innermotorischen Minimierung der Schadstoffe zur Reduzierung der Kosten der Abgasnachbehandlung. Auf ottomotorischer Seite sind die Abgasnachbehandlungssysteme zwar ausgereift und nicht so kostspielig wie beim Dieselmotor. Dafür steht der gegenüber einem Dieselmotor höhere Verbrauch, hervorgerufen durch die Drosselklappe wie auch durch das geringere Verdichtungsverhältnis, in der Kritik. Somit wären eine Entdrosselung und auch eine Anhebung des Verdichtungsverhältnisses wünschenswert.

Beim Diesel- wie beim Ottomotor besitzen homogene Brennverfahren das Potenzial, die zuvor erwähnten spezifischen Nachteile zumindest im Teillastbereich zu eliminieren. Homogene Brennverfahren sind dabei durch zwei wesentliche Merkmale charakterisiert: zum einen wird eine ausgeprägte Vorhomogenisierung des Luft-Kraftstoff-Gemischs noch vor der Zündung angestrebt, zum anderen wird der Verbrennungsprozess durch eine Selbstzündung eingeleitet. Die Vorhomogenisierung des mageren Gemischs sorgt dabei für eine Vermeidung bzw. für eine starke Reduzierung der Rußbildung. Die gleichmäßig über den Brennraum verteilte magere Verbrennung wiederum spielt sich in einem Temperaturniveau ab, in welchem keine nennenswerte NO_x -Bildung auftritt. Somit wird bei einer homogenen Dieselverbrennung die Schadstoffproblematik hinsichtlich dieser beiden Schadstoffe nahezu eliminiert. Bei einer homogenen und selbstzündenden Verbrennung im Ottomotor liegen die Vorteile in der Entdrosselung, da der Motor mager betrieben wird. Zusätzlich ergibt sich wegen der schnellen Wärmefreisetzung ein besserer Verbrennungsschwerpunkt und folglich auch ein günstigerer Verbrauch.

2.2 Abgrenzung der Verfahren: Otto, Diesel, homogene Verbrennung

Zu den mit Abstand verbreitetsten Motortypen für Kraftfahrzeuge gehören der Ottomotor und der Dieselmotor. Durch eine Kombination der Vorteile beider motorischer Brennverfahren lässt sich das sogenannte homogene Brennverfahren ableiten. Diese drei Brennverfahren sollen im Folgenden hinsichtlich der prinzipiellen Funktionsweise, der Verbrennung, der Schadstoffbildung und der Abgasnachbehandlung miteinander verglichen werden.

Der **Ottomotor** ist charakterisiert durch die Verwendung von Benzin als Kraftstoff gepaart mit einer Fremdzündung des Luft-Kraftstoff-Gemischs. Benzin besitzt gute Verdampfungseigenschaften und eine ausgeprägte Zündunwilligkeit und damit eine hohe Klopfestigkeit. Der Kraftstoff wird entweder indirekt ins Saugrohr oder direkt in den Zylinder eingespritzt. Die Zündung des Gemischs erfolgt beim Ottomotor durch eine Zündkerze. Ausgehend von der Zündkerze breitet sich eine Flammenfront aus, die sukzessive die kraftstoffhaltigen Bereiche des Brennraums erfasst. Diese Flammenfront weist wegen der turbulenten und damit wirbelbehafteten Strömung im Brennraum eine starke Faltung auf, welche die Brenngeschwindigkeit erhöht. Durch die gute Verteilung des Kraftstoffs im Brennraum treten praktisch keine fetten Gemischzonen auf, weshalb dieses Brennverfahren für seine geringe Rußbildung bekannt ist. Dagegen werden in der Flammenfront sehr hohe Temperaturen erzielt, welche die Bildung von thermischen NO_x begünstigen. Das Verdichtungsverhältnis des Ottomotors liegt unterhalb von 12. Der limitierende Faktor ist dabei das Motorklopfen. Dieser Effekt wird während der Flammenfrontausbreitung durch spontane Selbstzündungen in noch unverbrannten Brennraumbereichen ausgelöst und muss unter allen Umständen vermieden werden, da die entstehenden großen Druckschwankungen unweigerlich zur Zerstörung des Motors führen würden.

Bei der Saugrohreinspritzung beschränkt sich die Brennverfahrensstrategie auf den sogenannten homogenen Betrieb, da das Luft-Kraftstoff-Gemisch durch die lange Vermischungszeit kombiniert mit der Ladungsbewegung einen sehr guten Homogenisierungsgrad aufweist. Großer Nachteil dieser Betriebsstrategie ist der für eine optimale Abgasnachbehandlung (Umsetzung von CO -, HC - und NO_x in harmlose Abgasbestandteile) mit einem $\lambda=1$ -Betrieb. Man spricht in diesem Zusammenhang von einer Quantitätsregelung, da mit Hilfe einer Drosselklappe für die eingespritzte Kraftstoffmenge die entsprechende Luftmenge bereitgestellt wird, um einen $\lambda=1$ -Betrieb zu ermöglichen. Dies wiederum führt zu einer Vergrößerung der Ladungswechselarbeit und damit auch zu einer Erhöhung des Verbrauchs.

Die Einführung der Direkteinspritzung beim Ottomotor hat das Spektrum der Betriebsstrategien erheblich erweitert. Bei entsprechend früher Einspritzung ist natürlich weiterhin auch ein homogener Betrieb möglich. Es erschließt sich jedoch eine weitere Betriebsstrategie, deren Grundprinzip eine Ladungsschichtung darstellt, bei der nur ein Teil des Brennraums mit einem zünd- bzw. verbrennungsfähigen Luft-Kraftstoff-Gemisch beaufschlagt wird. Somit kann der Motor entdrosselt und damit verbrauchsgünstig betrieben werden. Bei dieser Betriebsstrategie liegt im Brennraum global ein mageres Gemisch vor, weshalb man auch vom Mager-Betrieb spricht. Die Ladungsschichtung selbst kann auf drei verschiedene Weisen generiert werden: strahlgeführt, wandgeführt oder luftgeführt. Bei allen drei Varianten muss dafür Sorge getragen werden, dass zum Zündzeitpunkt zündfähiges Gemisch im Bereich der Zündkerze vorliegt. Beim strahlgeführten Verfahren ist deshalb der Injektor dicht bei der Zündkerze platziert, damit der zündfähige Randbereich des Strahls die Zündkerze erfassen kann. Durch eine in der

Regel komplexe Formgebung der Kolbenoberfläche wird das wandgeführte Verfahren umgesetzt. Die Kolbenkontur hat das Ziel, die Gemischwolke zum Injektor umzulenken. Ähnlich funktioniert das luftgeführte Verfahren, bei dem die Gemischwolke durch eine entsprechend generierte Ladungsbewegung zur Zündkerze transportiert wird. Bei der realen Umsetzung in einem Ottomotor liegt in der Regel eine Kombination aus den beschriebenen Varianten vor, um die angestrebte Ladungsschichtung zu erzeugen. Als Folge des globalen Luftüberschusses kann jedoch beim Mager-Betrieb der 3-Wege-Katalysator nicht appliziert werden, da schon kleine Abweichungen des engen λ -Fensters zu NO_x -Durchbrüchen führen. Zur Reduktion von NO_x muss deshalb zusätzlich ein NO_x -Speicher-Katalysator in die Abgasstrecke eingebaut werden. Während des Mager-Betriebs wird dort das im Abgas enthaltene NO_x weitestgehend eingelagert. Die Katalysator-Regeneration erfolgt in regelmäßigen, kurzen, fetten Betriebsphasen, in denen das NO_x durch die dann hohen HC- und CO-Konzentrationen zu N_2 reduziert und damit die erneute Speicherfähigkeit des NO_x -Speicher-Katalysators wieder hergestellt wird. Allerdings sind diese Regenerationsphasen zwangsläufig auch mit Verbrauchsnachteilen verbunden.

Eine gängige Maßnahme zur Senkung des Verbrauchs von Ottomotoren ist das sogenannte Downsizing kombiniert mit einer Turbo-Aufladung. Basis des Downsizing-Konzepts ist die gezielte Verringerung des Brennraumvolumens durch Entfall von ganzen Zylindern oder durch Verkleinerung der Bohrung oder des Hubs. Durch die Verringerung der Kontaktfläche zwischen den Kolben und der Zylinderwand wird die Reibung und somit auch der Verbrauch reduziert. Bei geeigneter Abstimmung des Motors ergibt sich ein weiterer Verbrauchsvorteil wegen der Verschiebung der Betriebspunkte hin zu insgesamt höherlastigen und somit auch meist verbrauchsgünstigeren Kennfeldbereichen. Die Ursache für diesen Verbrauchsvorteil liegen in der gesteigerten Entdrosselung des Motors. Um durch diese Lastverschiebung keine Emissionsnachteile insbesondere bez. NO_x zu erhalten, wird in der Regel das Downsizing mit der Turbo-Aufladung kombiniert. Die Turbo-Aufladung erfolgt dabei verbrauchsneutral. Durch die erhöhte Ladungsmenge können im Teillastbereich auch erhöhte AGR-Raten gefahren werden, um die NO_x -Emissionen zu verringern.

Wesentlicher Vorteil des **Dieselmotors** gegenüber dem Ottomotor ist der gesteigerte Wirkungsgrad, der sich aus dem erhöhten Verdichtungsverhältnis und der nicht vorhandenen Drosselklappe ergibt (Qualitätsregelung). Als Kraftstoff dient Dieselkraftstoff, welcher sich zum im Ottomotor verwendeten Benzin genau umgekehrt verhält: er verdampft nur schwer, ist aber sehr zündwillig. Bei den modernen Dieselmotoren erfolgt die Einbringung des Kraftstoffs in den Brennraum ausschließlich durch Direkteinspritzung. Der Zeitpunkt für die Einspritzung liegt in der Regel kurz vor Erreichen des oberen Totpunkts. Nach einem kurzen Zündverzug kommt es wegen der durch das hohe Verdichtungsverhältnis ebenfalls hohen Kompressionstemperaturen zur Selbstzündung des Gemischs. Die innerhalb der Zündverzugszeit verdampfte Kraftstoffmenge verbrennt dann sehr schnell in Form einer sogenannten vorgemischten Verbrennung. Der damit verbundene, sehr schnelle und ausgeprägte Wärmeeintrag in den Brennraum ruft einen entsprechenden Druckanstieg hervor. Da in der Regel die Einspritzung über den Zündbeginn hinaus erfolgt, laufen in dieser Phase der Verdampfungs- und Verbrennungsprozess zeitgleich ab. Dieser Teil der Verbrennung wird als Diffusionsverbrennung bezeichnet. Dabei vermischt sich der verdampfte Kraftstoff mit der umgebenden Luft. Die Verbrennungszone befindet sich im Bereich der stöchiometrischen Mischung.

Das Schadstoffverhalten des Dieselmotors ist neben den erhöhten NO_x -Emissionen durch sein hohes Rußaufkommen geprägt, welches aus der unvermeidbaren Verbrennung innerhalb fetter

Gemischzonen (und dem damit verbundenen Luftmangel) resultiert. Die zunehmend schärferen Grenzwerte hinsichtlich des Rußausstoßes machen einen Partikelfilter erforderlich, der von vielen Herstellern (z.B. Daimler AG) bereits serienmäßig angeboten wird. Hier haben sich regenerative Filter durchgesetzt. Der Rußabbrand im Filter erfolgt durch eine Temperaturerhöhung des Abgases, welche durch eine angelagerte Nacheinspritzung in der Expansionsphase realisiert wird. Eine andere Möglichkeit zur Einleitung des Rußabbrands ist eine applikative Erhöhung von HC- und CO-Emissionen während der Verbrennung. Diese Abgaskomponenten werden dann in einem Oxidationskatalysator, welcher dem Rußfilter vorgeschaltet ist, zu H_2O und CO_2 umgesetzt. Die bei dieser exothermen Reaktion zusätzlich freiwerdende Wärme gewährleistet wiederum den Rußabbrand im Rußfilter. Die erhöhte Bildung von NO_x ist auf die hohen Brennraumtemperaturen bei gleichzeitigem Luftüberschuss (Qualitätsregelung) zurückzuführen. Die bislang wirkungsvollsten innermotorischen Maßnahmen zur Senkung der NO_x -Emissionen sind die Abgasrückführung und die Spätverschiebung der Schwerpunktslage der Verbrennung mit dem Effekt geringerer Spitzentemperaturen. Letztere Maßnahme geht allerdings zu Lasten des Verbrauchs. Zur Einhaltung der ebenfalls immer strengeren NO_x -Grenzwerte beim Dieselmotor (insbesondere in einigen amerikanischen Bundesstaaten) sind auch hier zusätzliche Abgasnachbehandlungsmaßnahmen erforderlich. Prinzipiell ist die NO_x -Problematik dabei vergleichbar mit derjenigen des Ottomotors im Mager-Betrieb, weshalb auch hier ein NO_x -Speicher-Katalysator zur Reduzierung der NO_x -Emissionen verwendet werden kann. Allerdings widerspricht die Erzeugung eines fetten Abgases für die Regeneration des Katalysators der Diesel-Philosophie. Als Alternative hat sich als verbrauchsneutrale und sehr effektive Technologie zur NO_x -Reduzierung der SCR-Katalysator (selektive katalytische Reaktion) etabliert. Insbesondere schwere Fahrzeuge (Nutzfahrzeuge, etc.) profitieren von SCR-Katalysatoren, da die erhöhten Abgastemperaturen den hohen NO_x -Umsatzraten dieses Katalysatortyps bei hohen Temperaturen (Umsatz $> 90\%$ auch in gealtertem Zustand) entgegenkommen. Der technische Aufwand ist jedoch sehr hoch, da Harnstoff als Reduktionsmittel in einem Zusatztank mitgeführt und im Abgasstrang mit einem separaten Pumpe-Düse-System eingespritzt werden muss. Zudem muss eine geeignete Infrastruktur zur Bereitstellung des Harnstoffs geschaffen werden. Dennoch befindet sich diese Technologie auch bei Pkw bereits in Serie und wird von der Daimler AG unter dem Namen *BlueTec* insbesondere zur Erfüllung der zum Teil strengen US-amerikanischen Abgasnormen eingesetzt. Die weitere Abgasnachbehandlung beim Dieselmotor konzentriert sich auf die Reduzierung der CO- und HC-Emissionen durch Verwendung von Oxidationskatalysatoren.

Auch beim Dieselmotor kann der Verbrauch durch Downsizing reduziert werden. Allerdings ist das Einsparpotenzial im Vergleich zum Ottomotor geringer, da der Dieselmotor bereits entdrosselt betrieben wird. Folglich resultiert beim Dieselmotor die Verbrauchssenkung durch Downsizing primär aus der verringerten Reibung.

Der Versuch, die Vorteile des Ottomotors mit denen des Dieselmotors zu kombinieren, hat in den vergangenen Jahren zu einer Reihe von im Prinzip sehr ähnlichen Brennverfahren geführt, die unter dem Schlagwort **homogene Brennverfahren** bekannt geworden sind. Zwei Grundprinzipien haben diese Verfahren alle gemein. Zum einen wird der Kraftstoff vor dem Zünd- bzw. Verbrennungsbeginn in ausreichendem Maße vorhomogenisiert (Analogie zum Ottomotor). Dazu wird der Kraftstoff entweder sehr früh (zu Beginn des Kompressionshubs, zum Teil sogar in den Ladungswechselhub verbunden mit einer Zwischenkompression) oder sehr spät (nach dem oberen Totpunkt) in den Brennraum eingebracht. Zum anderen wird das Gemisch durch eine Selbstzündung gezündet (Analogie zum Dieselmotor). Generelles Ziel der homoge-

nen Brennverfahren ist eine innermotorische Vermeidung von Ruß und NO_x bei gleichzeitiger Reduzierung des Verbrauchs. Durch die relativ gleichmäßige Verteilung des Luft-Kraftstoff-Gemischs im Brennraum erfolgt die Zündung an vielen Orten gleichzeitig. Dieses Zündverhalten wird auch als Raumzündung bezeichnet. Die sich anschließende Verbrennung hat den Charakter einer Vormischverbrennung, wobei sich keine Flammenfronten ausbreiten, wie sie vom Ottomotor her bekannt sind. Durch den hohen Vormischungsgrad kommt es zu einer sehr schnellen Wärmefreisetzung, die einen entsprechenden Druckanstieg und damit auch ein hohes Geräusch und eine starke mechanische Belastung nach sich zieht. Damit ist dieses Verfahren nur im Teillastbereich anwendbar, um die plötzlich freigesetzte Wärme auf ein moderates Maß zu reduzieren. Durch die gleichmäßig im Brennraum verteilte Verbrennung werden lokale Temperaturspitzen, wie sie in den Flammenfronten der ottomotorischen Verbrennung oder bei der Diffusionsverbrennung in Dieselmotoren auftreten, vermieden. Dieser Effekt wiederum führt zu einer stark verminderten Bildung von thermischem NO . Die geringe Rußbildung als zweiter entscheidender Schadstoffvorteil des Verfahrens resultiert aus der ausgeprägten Vorhomogenisierung des Luft-Kraftstoff-Gemischs bei gleichzeitig global mageren Bedingungen. Folglich wird durch den Entfall fetter Gemischzonen im Brennraum die Rußbildung unterbunden.

Eine entscheidende Maßnahme zur weiteren Minimierung der NO_x -Emissionen ist der Einsatz zum Teil hoher AGR-Raten. Als zusätzlicher positiver Effekt leitet sich durch hohe Restgasanteile im Brennraum eine Reduzierung des Verbrennungsgeräuschs ab, welches aus der Verlangsamung der Verbrennung und damit der Vermeidung von hohen Druckgradienten resultiert. Sowohl die notwendigerweise erhöhten AGR-Raten zur Applikation eines homogenen Brennverfahrens, wie auch die bereits erwähnte Limitierung der Kraftstoffmenge zur Vermeidung zu hoher Wärmefreisetzungsraten, schließen eine Volllast-Applikation aus. Ein homogenes Brennverfahren ist deshalb bei Erreichung eines gewissen Lastniveaus auf die Umschaltung auf ein anderes Brennverfahren angewiesen. Dieser zwangsläufig instationäre Vorgang stellt eine weitere Herausforderung an die Applikation homogener Brennverfahren dar.

Eine Annäherung an homogene Brennverfahren kann sowohl aus ottomotorischer als auch aus dieselmotorischer Sicht erfolgen. Im Folgenden sei deshalb zwischen Otto-HCCI-Brennverfahren und Diesel-HCCI-Brennverfahren unterschieden.

Bei **Otto-HCCI-Brennverfahren** erfordert die Zündunwilligkeit des Ottokraftstoffs eine entsprechende Erhöhung der Temperatur im Brennraum. Eine Steigerung des Temperaturniveaus wird durch den Verbleib eines hohen Anteils von heißem inneren Restgas im Zylinder erzielt. Dazu werden die Ventilöffnungs- und -schließzeiten entsprechend angepasst. Eine leichte Anhebung des Verdichtungsverhältnisses kann ebenfalls zur Erhöhung der Kompressionstemperatur genutzt werden. Wie oben bereits erwähnt, gibt es sogar Verfahren, die eine Einspritzung in den Ladungswechselhub kombiniert mit einer Zwischenkompression (verkürzter Ladungswechseltakt) vorsehen [9, 10]. Durch die dabei freigesetzte Wärme wird das Temperaturniveau für die folgende Kompression angehoben. Wegen der ohnehin effektiven Abgasnachbehandlung bei stöchiometrisch betriebenen Ottomotoren liegt der Fokus beim Otto-HCCI-Brennverfahren eindeutig in der Senkung des Verbrauchs. Physikalische Grundlage hierfür ist der entdrosselte Betrieb. Zusätzlich ergibt sich aus der schnellen Wärmefreisetzung in der Nähe des oberen Totpunkts eine verbesserte Schwerpunktlage der Verbrennung.

Hinsichtlich des Kraftstoffs liegt beim **Diesel-HCCI-Brennverfahren** im Vergleich zum Otto-HCCI-Brennverfahren eine konträre Problematik vor. Da Dieselkraftstoff sehr zündwillig ist, aber mehr Zeit für die Verdampfung und damit auch für die Homogenisierung benötigt, muss zur Erhöhung der Zündverzugszeit das äußere heiße Restgas gekühlt werden. Aus diesem

Grund verwenden die dieselbasierten homogenen Brennverfahren in der Regel eine gekühlte Abgasrückführung, da nur auf diese Weise eine Absenkung der Restgastemperatur durch einen entsprechenden AGR-Kühler umgesetzt werden kann. Positiv wirkt sich dabei auch die erhöhte Wärmekapazität des Restgases aus. Ein probates Mittel zur Verlängerung der Zündverzugszeit stellt auch die Absenkung des Verdichtungsverhältnisses dar, was eine Verringerung der Brennraumtemperatur während der Kompression zur Folge hat. Gleichzeitig wirkt sich die verringerte Kompressionsendtemperatur positiv auf die NO_x -Bildung aus. Die Absenkung des Verdichtungsverhältnisses ist jedoch durch die notwendige Kaltstartfähigkeit begrenzt. Beim Diesel-HCCI-Brennverfahren ist das Verbrauchspotenzial wegen des ohnehin entdrosselten Betriebs und der kontraproduktiven Absenkung des Verdichtungsverhältnisses weniger eindeutig wie beim Otto-HCCI-Brennverfahren. Der Hauptvorteil der homogenen Verbrennung liegt hier primär in der innermotorischen Reduzierung der Ruß- und NO_x -Emissionen. Die vier beschriebenen Verbrennungskonzepte lassen sich auch gut anhand der Druck- und Heizverläufe charakterisieren. Diese sind in Abbildung 2.1 einander gegenübergestellt.

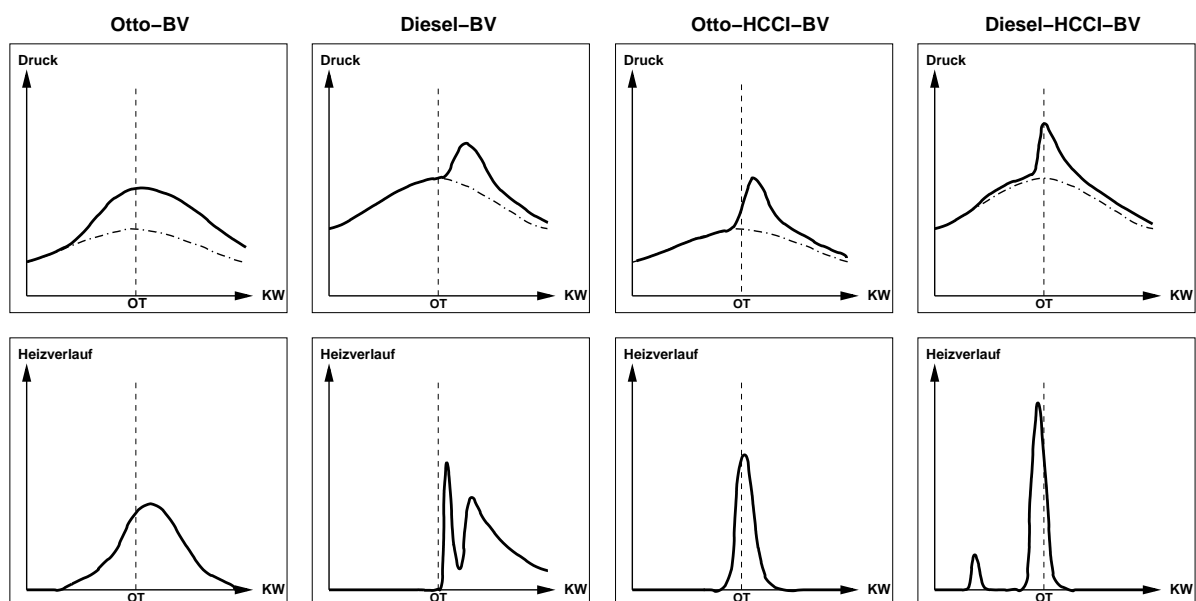


Abbildung 2.1: Skizzierte Druck- und Heizverläufe von Otto-, Diesel-, Otto-HCCI- und Diesel-HCCI-Brennverfahren bei Teillast. Die strichpunktierte Linie kennzeichnet jeweils die Schleppkurve.

Das Otto-Brennverfahren (linke Bildspalte) ist durch eine eher weiche Verbrennung gekennzeichnet, die sich aus dem sukzessiven Ausbreiten der Flammenfront ausgehend von der Zündkerze ergibt. Entsprechend moderat verläuft auch der Druckanstieg. Die Dieselverbrennung (zweite Bildspalte von links) weist dagegen einen steileren Druckanstieg auf, hervorgerufen durch die schnelle Umsetzung von Kraftstoff während der Vormischverbrennungsphase, die sich üblicherweise durch einen ersten Anstieg im Heizverlauf äußert. Daran schließt sich die Diffusionsverbrennung mit langsam abfallendem Heizverlauf an. Im Vergleich zum Otto-Brennverfahren zeichnet sich das Otto-HCCI-Brennverfahren (zweite Bildspalte von rechts) durch eine schnelle Wärmefreisetzung im Bereich des oberen Totpunkts aus. Eine typische Diesel-HCCI-Verbrennung ist in Bild 2.1 rechts dargestellt. Hervorstechend im Heizverlauf ist die abgesetzte Cool-Flame-Verbrennung. Nach einer gewissen zeitlichen Verzögerung schließt

sich die Hauptverbrennung mit hohem Vormischanteil und folglich schneller Energiefreisetzung an. Damit einher geht ein entsprechend steiler Druckanstieg. Abgesehen von der Cool-Flame-Wärmefreisetzung ähnelt der Druck- bzw. Heizverlauf erwartungsgemäß dem des Otto-HCCI-Brennverfahrens.

2.3 Stand der Technik beim HCCI-Verfahren

Im Zusammenhang mit homogenen Brennverfahren sind sehr grundlegende Arbeiten von Thring [11] und Najt et al. [12] in den 80er Jahren vorgelegt worden. Thring prägt in diesem Zusammenhang zum ersten Mal die Bezeichnung „Homogeneous Charge Compression Ignition“ (HCCI), die sich auch als allgemeine Abgrenzung des Verfahrens in Bezug auf otto- und dieselmotorische Brennverfahren durchgesetzt hat. Im Laufe der letzten Jahre sind eine Vielzahl von Brennverfahren entwickelt worden, die sich die Umsetzung einer homogenen oder zumindest teilhomogenen Verbrennung zum Ziel gesetzt haben. Die wichtigsten dieser Verfahren werden nun kurz vorgestellt. Allen Verfahren ist gemeinsam, dass sie sehr geringe NO_x - und Ruß-Emissionen aufweisen und sich in der Regel auf eine Applikation im Teillastbereich beschränken.

Im Jahre 1979 wurden erste Versuche an einem Brennverfahren zur Selbstzündung bei 2-Takt-Motoren durchgeführt. Es wurde mit dem Ziel entwickelt, die instabile Verbrennung von 2-Takt-Motoren bei niedrigen und mittleren Lasten zu beseitigen und ist unter dem Namen **ATAC-Verfahren (Active Thermo-Atmosphere Combustion)** [13, 16] bekannt geworden. Es konnte nachgewiesen werden, dass freie Radikale für den räumlich verteilten Zündvorgang verantwortlich waren. Ein aus diesem Verfahren abgeleitetes Brennverfahren namens **Activated Radical Combustion (AR Combustion)** [14] wurde von Honda entwickelt und im ersten kompressionsgezündeten Serien-2-Takt-Motorrad vorgestellt [15].

Ein weiteres homogenes Brennverfahren ist unter der Bezeichnung **Controlled Auto Ignition (CAI)** [17, 18, 19] bekannt. Grundidee ist es, auf Basis von Ottokraftstoff ein Selbstzündungskonzept für den unteren Lastbereich zu realisieren. Es wurde zunächst analog zum ATAC-Verfahren an 2-Takt-Motoren praktiziert und dann auf 4-Takt-Motoren übertragen. Die Kontrolle der Zündung erfolgt sowohl über die Temperatur als auch über die Mischung von Frisch- und Restgas. Hauptsteuerungselemente sind deshalb die Öffnungs- und Schließzeiten der Ventile. Da so auf eine Anhebung des Verdichtungsverhältnisses verzichtet werden kann, ist bei höheren Lasten eine Umstellung auf konventionellen Ottobetrieb problemlos möglich. Ein dem CAI-Verfahren sehr ähnliches Brennverfahren ist das **Raumzündverfahren (RZV)** [9, 10]. Hier wurde sogar die Einspritzung in den Ladungswechselhub verbunden mit einer Zwischenkompression dargestellt, um das Temperaturniveau für den Zündprozess durch kinetische Vorreaktionen anzuheben.

Eine Sonderrolle bei den homogenen Brennverfahren nimmt das **HCDC-Verfahren (Homogeneous Charge Compression Diesel Combustion)** [20, 21, 22] ein. Es wurde mit zwei unterschiedlichen Kraftstoffsorten betrieben. Der Einspritzung von Dieselmotoren nahe dem oberen Totpunkt kam im Wesentlichen die Funktion eines Zündstrahls für das im Zylinder bereits befindliche Gemisch zu. Dieser vorgemischte Kraftstoffanteil wurde über Saugrohreinjection eingebracht, wobei gegen Selbstzündung unempfindliche Kraftstoffe wie iso-Oktan oder MTBE (Methyltertiärbuthylether) verwendet wurden. Der Anteil der voreingespritzten Kraftstoffmenge betrug bis zu 98%. Das Verfahren konnte in allen Lastbereichen appliziert werden.

Ein weiteres homogenes Brennverfahren wurde bei Hino Motors unter dem Namen **Homogeneous charge intelligent Multiple Injection Combustion System** (HiMICS) [23] entwickelt. Es basiert im Wesentlichen auf der Strategie früher getakteter Einspritzungen, in denen bis zur Hälfte der Diesel-Kraftstoffmenge zu einem frühen Zeitpunkt in den Kompressionshub eingespritzt wird. Der zweite Teil erfolgt dann in einer gewöhnlichen Haupteinspritzung nach dem oberen Totpunkt. Favorisiert wird auch eine Nacheinspritzung zur Reduzierung der Rußwerte. Allerdings konnte das Verfahren durch selbst für homogene Brennverfahren hohe HC-Emissionen von 3000 bis 8000 ppm nicht überzeugen.

Bereits 1998 wurde von Nissan das **MK**-Verfahren (Modulated Kinetics) [24, 25] in einem Serienmotor umgesetzt. Die Umsetzung einer Vormischverbrennung bei tiefen Temperaturen stellt den Kern des Verfahrens dar. Im Unterschied zu den meisten anderen homogenen Brennverfahren wird der für die gewünschte Gemischhomogenisierung benötigte Zündverzug durch eine späte Einspritzung zu Beginn der Expansionsphase realisiert. Durch die dann schon wieder sinkenden Brennraumtemperaturen, kombiniert mit sehr hohen AGR-Raten, wird der Zündverzug so weit verlängert, dass noch vor Zündbeginn die Einspritzung abgeschlossen ist. Zur Verkürzung der Einspritzzeit wird das Common-Rail-System mit einem hohen Druck von bis zu 1600 bar betrieben. Zur Beschleunigung der Gemischaufbereitung benötigt das Verfahren hohe Drallzahlen. Trotzdem ist nur ein begrenzter Grad der Homogenisierung erreichbar, weshalb dieses Verfahren nur als teilhomogenes Brennverfahren bezeichnet werden kann.

Ein homogen/heterogenes Brennverfahrenskonzept, welches sich der Vermeidung von NO_x und Ruß bei hohen Lasten widmet, ist das **MULDIC**-Verfahren (MULtiple stage Diesel Combustion) [26]. Auf Basis von Dieseldieselkraftstoff wird eine 2-stufige Einspritz- bzw. Verbrennungsstrategie angewendet. Die erste Einspritzung erfolgt weit in der ersten Hälfte des Kompressionshubs und endet in einer vorgemischten Verbrennung in der Nähe des oberen Totpunkts. Um eine gute Homogenisierung zu gewährleisten, wird diese erste Einspritzung mit zwei seitlich im Zylinderkopf angeordneten Düsen umgesetzt, deren Strahlen sich im Zentrum des Zylinders treffen. Damit wird eine Benetzung der Zylinderwand erschwert, was zu einer Vermeidung von Kohlenwasserstoffen im Restgas beiträgt. Eine zentral angeordnete, dritte Einspritzdüse wird für die zweite Einspritzung verwendet, die nach dem oberen Totpunkt beginnt und damit auch die zweite Verbrennungsphase einleitet. Sie führt aufgrund des durch die Vorverbrennung angehobenen Temperaturniveaus zu einer schnellen Zündung des Gemischs, wodurch es zu einer kurzzeitigen Rußbildung kommt. Die hohen Temperaturen im Brennraum tragen jedoch dazu bei, dass dieser zu großen Teilen im Laufe der Expansionsphase wieder oxidiert wird. Insgesamt kann mit dem Verfahren eine NO_x -Reduzierung von etwa 50% gegenüber einer konventionellen Dieseldieselverbrennung erzielt werden, bei allerdings leichten Nachteilen in Bezug auf den Verbrauch. Ein dem MULDIC-Verfahren sehr ähnliches homogen/heterogenes Dieseldiesel-Brennverfahren wird in [38] vorgestellt.

Vom IFP wird das sogenannte **NADI**-Konzept (Narrow Angle Direct Injection) [27, 28] auf Basis von Dieseldieselkraftstoff vorgeschlagen. Als Basismotor wird ein konventioneller Dieseldieselmotor mit abgesenktem Verdichtungsverhältnis ($\epsilon = 16.0$) verwendet. Die Besonderheit des Verfahrens liegt im sehr schlanken Spritzwinkel, der maximal 100° beträgt. Auf diese Weise kann ein sehr früher Spritzbeginn umgesetzt werden. Dabei ist das Risiko einer Benetzung der Zylinderwände stark reduziert. Ein Problem wird jedoch bei der Kaltstartfähigkeit im Zusammenhang mit dem schlanken Spritzwinkel eingeräumt. Dazu ist die Anhebung des effektiven Verdichtungsverhältnisses durch frühes Schließen der Einlassventile notwendig.

Ein auf Benzin-Kanaleinspritzung basierendes homogenes Brennverfahrenskonzept wird durch

das **PCCI**-Verfahren (Premixed Charge Compression Ignition) [29] dargestellt. Ein für einen benzinbetriebenen Motor hohes Verdichtungsverhältnis von $\epsilon=17.4$ sorgt für einen Wirkungsgrad, der mit einem Dieselmotor vergleichbar ist.

Das homogene **PCI**-Verfahren (Premixed Compression-Ignited Combustion) [30] wurde mit der Absicht entwickelt, das Eindringverhalten des Einspritzstrahls bei einer frühen Diesel-Common-Rail-Einspritzung in den Kompressionshub zu begrenzen, um den Wandauftrag auf die Zylinderwand zu vermeiden. Dazu wurde eine spezielle Einspritzdüse verwendet, bei der jeweils zwei Einspritzlöcher übereinander angeordnet sind. Deren Bohrungen waren so ausgerichtet, dass die Strahlen kurz nach dem Austritt aufeinandertrafen. Die Dispersion der beiden Strahlen wurde durch den Aufprall erheblich gesteigert und das Eindringverhalten verringert. Der Spritzbeginn wurde zwischen 40° vOT und 100° vOT variiert. Da das Verfahren allerdings mit einem von 18.5 auf 12.0 abgesenkten Verdichtungsverhältnis betrieben wurde, ergab sich im Vergleich zu einem klassischen Dieselmotoren ein schlechterer Verbrauch.

Das **PREDIC**-Verfahren (PREmixed lean Diesel Combustion) zeichnet sich durch eine gewisse Historie hinsichtlich der Art und Anzahl der verwendeten Injektoren aus. Mit dem Ziel, eine gute Homogenisierung bei früher Einspritzung des Dieselkraftstoffs (Spritzbeginnvariationen bis 80° vOT) zu gewährleisten, wurden zunächst zwei seitlich im Brennraumdach angeordnete Injektoren verwendet [31], deren Einspritzstrahlen zur Verbesserung der Gemischaufbereitung zentral im Brennraum aufeinandertreffen. Da trotzdem eine große Durchdringung der Strahlen auftritt, kommt es wegen des frühen Einspritzzeitpunkts dennoch zu nicht akzeptablem Wandauftrag. Zur Reduzierung des Wandauftrags wird von Akagawa et al [32] eine Kombination aus den seitlichen Injektoren (frühe Einspritzung) mit einer weiteren Einspritzung durch einen zentral angeordneten, konventionellen Injektor im Bereich des oberen Totpunkts vorgeschlagen. Die Einspritzstrategie des zentralen Injektors ist an das **MULDIC**-Verfahren (siehe oben) angelehnt, um auch höhere Lasten darstellen zu können. Eine dritte Variante bez. der verwendeten Injektoren ist eine dem **UNIBUS**-Verfahren ähnliche, zentral angeordnete Düse mit Prallkörper [32]. Alle Varianten haben eine gegenüber einem konventionellen Dieselmotoren nahezu halbierte Leistungsfreisetzung gemeinsam. Auch der Versuch, durch Aufladung bei der Variante mit der Düse mit Prallkörper die abgegebene Leistung an das konventionelle Dieselmotoren anzugleichen [33], brachte nicht den gewünschten Erfolg.

Hauptmerkmal des **UNIBUS**-Verfahrens (UNIform BUIky combustion System) [34, 35, 36] ist eine speziell entwickelte Piezo-Düse für die Direkteinspritzung von Dieselkraftstoff mit stark verminderter Eindringtiefe und erhöhter Dispersion des Einspritzstrahls. Diese Eigenschaften werden durch einen Hohlkegelstrahl erzielt, der durch den Aufprall von Dieselkraftstoff auf einen geeignet geformten Prallkörper am Düsenaustritt gebildet wird. Ein Einspritzdruck, der kleiner als 500 bar ist, trägt ebenfalls zu einer Verminderung der Eindringtiefe bei. Ziel dieses Einspritzsystems ist die Vermeidung von Wandauftrag, sowie eine gegenüber herkömmlichen Lochdüsen verbesserte bzw. schnellere Gemischaufbereitung, die sich beim **UNIBUS**-Verfahren in Form einer relativ homogenen Gemischwolke ohne Wandkontakt äußert. Das Verfahren ist in dieser Form jedoch nur im unteren Lastbereich applizierbar.

2.4 Einflussparameter bei homogenen Brennverfahren

2.4.1 Temperatur

Da die Temperatur die dominierende Einflussgröße bei der Zündung von Luft-Kraftstoff-Gemischen darstellt, kommt ihrer Steuerung eine entscheidende Rolle zu. Wie bereits in Abschnitt 2.2 erwähnt, muss bei dieselmotorbasierten homogenen Brennverfahren in der Regel die Kompressionsendtemperatur reduziert werden, um ein vorzeitiges Zünden des sehr zündwilligen Kraftstoffs zu vermeiden. Durch die so herbeigeführte Absenkung der Brennraumtemperaturen wird gleichzeitig auch die Bildung von NO_x verringert. Zu den gängigsten Maßnahmen gehört die Absenkung des Verdichtungsverhältnisses (siehe auch Abschnitt 2.4.3) oder die Kühlung der Ansaugluft bzw. die Kühlung des rückgeführten Abgases (AGR). Eine innere AGR ist nicht empfehlenswert, da die Brennraumtemperatur durch das heiße Restgas erhöht würde. Damit ergäbe sich ein kontraproduktiver Effekt hinsichtlich der angestrebten NO_x -Reduzierung.

Im Unterschied dazu muss bei ottobasierten homogenen Brennverfahren die Verdichtungsendtemperatur gesteigert werden, weshalb hier das Verdichtungsverhältnis in der Regel angehoben (siehe auch Abschnitt 2.4.3) und eine innere AGR angestrebt wird.

2.4.2 Abgasrückführung (AGR)

Bei homogenen Brennverfahren wie auch bei konventionellen Otto- und Diesel-Brennverfahren wird die Abgasrückführung primär für eine Reduktion der NO_x -Emissionen eingesetzt. Das rückgeführte Abgas wirkt dabei als Inertgas, welches nicht an der Verbrennung teilnimmt. Die daraus resultierende Absenkung der Verbrennungstemperatur führt direkt auch zu einer Absenkung der NO_x -Emissionen. Ziel ist es dabei, die maximale Temperatur im Brennraum möglichst unterhalb der Bildungstemperatur von NO_x (ca. 1800° Kelvin) zu halten. Neben dem Inertgaseffekt wirkt sich die gegenüber Frischluft erhöhte Wärmekapazität zusätzlich auf eine Senkung des Temperaturniveaus im Brennraum aus. Nicht zuletzt hemmt auch die abgesenkte O_2 -Konzentration des Restgasanteils die NO_x -Bildung. Neben den NO_x -Emissionen werden auch die HC-Emissionen verringert, da durch die Abgasrückführung ein Teil des Restgases und somit auch unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC) wiederholt an der Verbrennung teilnehmen. Bei Otto- und Diesel-HCCI-Verfahren wird die Abgasrückführung verfahrensbedingt unterschiedlich umgesetzt. Ursache dafür sind die konträren Eigenschaften von Otto- und Diesel-Kraftstoff. Ziel ist es dabei, im Brennraum ein geeignetes Temperaturniveau einzustellen, um zum gewünschten Zeitpunkt die Zündung des Kraftstoffs einzuleiten (siehe auch Abschnitt 2.4.1). Wegen der Zündunwilligkeit des Ottokraftstoffs kann mit dem geringen Verdichtungsverhältnis von Otto-Motoren und folglich mit den geringen Kompressionsendtemperaturen normalerweise keine Selbstzündung herbeigeführt werden. Deshalb wird das Temperaturniveau während der Verdichtungsphase durch eine innere Abgasrückführung erhöht. Dazu wird ein Teil des heißen Restgases in das Saugrohr ausgeschoben und anschließend wieder zusammen mit der Frischluft angesaugt. Die ausgeprägte Zündwilligkeit des Diesel-Kraftstoffs hingegen erfordert wegen der tendenziell frühen Einspritzung des Kraftstoffs bei Diesel-HCCI-Brennverfahren eine Verzögerung des Zündbeginns. Mit einer äußeren Abgasrückführung mit zum Teil zusätzlicher Kühlung wird deshalb die Temperatur des Restgases abgesenkt.

Vorteilhaft erweist sich der Einsatz von Restgas bei homogenen Brennverfahren auch in Bezug auf die Geräuschreduzierung. Da durch einen erhöhten Restgasanteil die Verbrennung verlang-

samt wird, werden auch die hohen geräuschrelevanten Druckgradienten, welche sich aus der schnellen Wärmefreisetzung von homogenen Brennverfahren ergeben, abgeschwächt.

Als Nachteil der Abgasrückführung erweist sich die erhöhte Rußbildung insbesondere bei sehr hohen AGR-Raten wie auch eine Verschlechterung des Verbrauchs, da sich durch die verlangsamte Verbrennung der Verbrennungsschwerpunkt verschlechtert. Ein weiteres Problem ist die AGR-Verträglichkeit. Eine hohe AGR-Verträglichkeit liegt vor, wenn hohe AGR-Raten appliziert werden können bei gleichzeitig geringen Ruß-Emissionen. Eine Schlüsselfunktion für den Einsatz von homogenen Brennverfahren kommt der Regelung und zylindergeraden Zumessung der zum Teil hohen Abgasrückföhraten zu.

2.4.3 Verdichtungsverhältnis ϵ

Die Veränderung des Verdichtungsverhältnisses [37] dient primär der Erzeugung des Temperaturniveaus, welches den Zündigenschaften des verwendeten Kraftstoffs entgegenkommt. Durch die gewünschte Absenkung der Kompressionsendtemperaturen ergibt sich beim Diesel-HCCI-Brennverfahren zusätzlich eine Reduktion der NO_x -Bildung. Allerdings ist man bei der Veränderung des Verdichtungsverhältnisses ϵ auch Zwängen ausgesetzt, die nur einen moderaten Einsatz dieser Einflussmöglichkeit zulassen: bei dieselbasierten homogenen Brennverfahren muss die Kaltstartfähigkeit (ϵ nicht zu niedrig) gewährleistet sein, wohingegen man bei otto-basierten Verfahren die Klopfgrenze (ϵ nicht zu hoch) des Motors berücksichtigen muss. Für beide Verfahren wäre grundsätzlich eine geometrische Variabilität des Verdichtungsverhältnisses wünschenswert, um auch konventionelle Betriebsstrategien für mittlere und hohe Lasten bestmöglich einsetzen zu können. Zur Zeit scheidert diese Möglichkeit allerdings noch an mechanischen Lösungsvarianten, die einfach, robust und zuverlässig sein sollten.

Bei dieselbasierten HCCI-Brennverfahren gibt es als weitere Möglichkeit der Absenkung der Verdichtungsendtemperaturen bzw. des -enddrucks auch die Reduktion der Füllung durch früheres Schließen der Einlassventile (Miller-Verfahren). Generell spricht man bei solchen Eingriffen in die Verdichtungsthermodynamik dann nicht mehr von einem geometrischen, sondern von einem thermodynamisch wirksamen Verdichtungsverhältnis.

2.4.4 Drall

Grundsätzlich bietet eine Drallströmung die Möglichkeit, den Kraftstoff besser im Brennraum zu verteilen. Dieser Effekt ist insbesondere bei den homogenen Brennverfahren wünschenswert, um fette Zonen und damit die Rußbildung zu vermeiden. Allerdings kann durch eine zu starke Ausmagerung des Luft-Kraftstoff-Gemischs eine unvollständige Verbrennung mit entsprechenden HC- und CO- Emissionen auftreten. Im Extremfall ist das Gemisch so stark ausgemagert, dass keine Zündung mehr möglich ist.

Die Ausbildung und der Nutzen einer Drallströmung für ein Brennverfahren ist jedoch auch stark von der Interaktion zwischen der Muldengeometrie und dem Einspritzwinkel abhängig, weshalb eine allgemeingöltige Aussage hinsichtlich des Dralleinflusses nicht möglich ist.

2.4.5 Drehzahl

Die Drehzahl eines Motors ist abhängig von der gewünschten Leistung und der verwendeten Getriebe- bzw. Achsübersetzung. Da die Zündkinetik von homogenen Brennverfahren durch die zum Teil großen Zündverzögerungen stark zeitlich geprägt ist, muss demzufolge bei unterschiedlichen Drehzahlen z.B. der Spritzbeginn angepasst werden, damit der Verbrennungsschwerpunkt an der gewünschten Stelle auftritt.

2.4.6 Kraftstoff

Die weltweit verbreiteten und gängigen Kraftstoffe für Kraftfahrzeuge - Benzin- und Dieselkraftstoff - sind von ihren Eigenschaften her leider nicht uneingeschränkt für den HCCI-Betrieb geeignet. Die hohen Oktan-Zahlen von Benzin zur Vermeidung von Motorklopfen, also ungewollter Selbstzündung, wirken sich im HCCI-Betrieb kontraproduktiv aus. Bei Dieselkraftstoff wiederum wird wegen der hohen Zündwilligkeit des Kraftstoffs, die durch die hohen Cetan-Zahlen zum Ausdruck kommt, bei frühen Einspritzungen ein gezieltes Verzögern der Zündung erschwert. Abhilfe könnte in beiden Fällen mit entsprechenden Additiven geschaffen werden. So könnte bei Benzin die Zündwilligkeit erhöht und bei Dieselkraftstoff herabgesetzt werden. Da aber immer auch der konventionelle Betrieb im höheren Lastbereich gewährleistet sein muss, stellt der Einsatz von Additiven immer einen Kompromiss dar.

Eine weitere Lösungsmöglichkeit ergibt sich aus der Verwendung von alternativen Kraftstoffen. In den vergangenen Jahren sind eine Vielzahl solcher Kraftstoffe hinsichtlich ihrer Tauglichkeit für den HCCI-Einsatz untersucht worden. Beispielhaft seien hier Methanol, Ethanol und DME (Dimethylether) erwähnt. Eine gute Übersicht über die Ergebnisse der einzelnen Kraftstoffe wird in [4] gegeben. Auch die wegen der Verfügbarkeit naheliegende Variante geeigneter Mischungen von Benzin- und Dieselkraftstoff ist untersucht worden [37]. Hier liegt die technologische Herausforderung in der Injektortechnologie, da z.B. bei Einsatz eines herkömmlichen Dieselinjektors durch die Zumischung von Benzin zu Dieselkraftstoff die benötigte Schmierfähigkeit im Injektor vermindert wird. Sehr vielversprechend sind auch synthetische Kraftstoffe wie GTL (gas to liquid) und BTL (biomass to liquid). BTL-Kraftstoff z.B. wird aus Biomasse hergestellt und ist frei von Schwefel und Aromaten [124], was eine rußarme Verbrennung fördert. Durch eine entsprechende Steuerung des Herstellungsprozesses kann auch eine Reduzierung der NO_x -Emissionen erreicht werden [124]. In einer Kooperation zwischen der Daimler AG, Volkswagen und der Firma Choren [125] wird derzeit eine erste Pilotanlage (15.000 Tonnen/Jahr) für die großindustrielle Herstellung des BTL-Kraftstoffs getestet. Eine weitere Kooperation zwischen Shell und Choren hat die großindustrielle Produktion (200.000 Tonnen/Jahr) zum Ziel [124]. Denkbar ist auch die onboard-Reformation eines Kraftstoffs für den HCCI-Betrieb aus dem für den konventionellen Betrieb zur Verfügung stehenden Basiskraftstoff. Allerdings befinden sich Systeme dieser Art derzeit noch im Forschungs- bzw. Entwicklungsstadium und der wahrscheinliche technische und finanzielle Aufwand solcher Systeme wird über den breiten Einsatz solcher Systeme entscheiden.

Eine theoretisch sehr erfolgversprechende Variante ist der separate Einsatz von zwei Einspritzsystemen, basierend auf den herkömmlichen Kraftstoffen Benzin und Dieselkraftstoff. Die guten Verdampfungseigenschaften von Benzin gepaart mit der Zündunwilligkeit würde diesen Kraftstoff für die Homogenisierungsphase prädestinieren. Die separate Einspritzung des Dieselkraftstoffs hätte dann die primäre Aufgabe der Steuerung des Zündbeginns. Nachteil dieses

Konzepts ist der hohe finanzielle Aufwand, da zwei komplette, voneinander unabhängige Einspritzsysteme (Kraftstofftanks, Kraftstoffpumpen, Rails, 2 Injektoren je Zylinder, etc.) nötig wären.

Als Fazit kann gezogen werden, dass sowohl die Automobil- als auch die Mineralölindustrie an der Entwicklung und Herstellung neuer synthetischer Kraftstoffe arbeiten. Der immense kapazitive und logistische Aufwand in Form einer flächendeckenden Bereitstellung solcher Kraftstoffe an Tankstellen lässt den großflächigen Einsatz solcher Kraftstoffe innerhalb der nächsten Jahre allerdings als fragwürdig erscheinen.

An dieser Stelle soll nicht unerwähnt bleiben, dass im Jahre 2003 mit einer entsprechenden EU-Richtlinie [126] die Rahmenbedingungen für die Zumischung von Biokraftstoffen in herkömmliche Otto- und Diesekraftstoffe geschaffen wurden. Bis zum Jahr 2010 müssen demnach Biokraftstoffe einen Gesamtanteil von 5,75 % in den Otto- und Diesekraftstoffen aufweisen. In Deutschland haben derzeit die Normen DIN EN 590 für Diesekraftstoff [127] und DIN EN 228 für Ottokraftstoff [128] Gültigkeit. Dabei ist für Diesekraftstoff eine Beimischung von maximal 5 % Fettsäuremethylester (FAME) zulässig. Bei Ottokraftstoff liegt die zulässige Obergrenze bei 5 % für eine Beimischung von reinem Ethanol und bei 15 % nach chemischer Umwandlung als Ether (ETBE). Die derzeitige Beimischungsgrößenordnung von etwa 5 % gilt als technisch unkritisch. Bei einer - von der EU bereits vorgesehenen - weiteren Erhöhung dieses Anteils werden sich jedoch die Kraftstoffeigenschaften spürbar ändern, was wiederum Auswirkungen sowohl auf die Brennverfahrensentwicklung als auch auf die Motortechnik zur Folge haben wird.

2.4.7 Einspritzdruck

Einspritzung mit erhöhtem Einspritzdruck bei sonst unveränderter Einspritzstrategie führt zu einer verbesserten Gemischaufbereitung. Die Ursache dafür liegt im erhöhten Strahlimpuls (verbessertes Strahleindringverhalten), der die Gemischbildung durch strahlinduzierte Turbulenz und großskalige Wirbelstrukturen fördert. Hinzu kommt die schnellere Verdampfung der Tropfen, die mit höherem Einspritzdruck einen kleineren Durchmesser aufweisen. Ein weiterer Effekt ist die ausgeprägtere Interaktion insbesondere mit der Muldenwand. Bei sehr frühen Einspritzungen besteht jedoch die Gefahr eines Kontakts von flüssigem Kraftstoff mit der Zylinderwand, was Ölverdünnung (siehe Abschnitt 2.4.9) und erhöhte HC-Emissionen durch unvollständige Verbrennung zur Folge haben kann.

2.4.8 Einspritzdüsengeometrie

Die Einspritzdüse eines direkteinspritzenden Dieselmotors ist im Wesentlichen durch die Anzahl der Spritzlöcher, Lochdurchmesser und Spritzwinkel charakterisiert. Die beiden erstgenannten Parameter sind dabei die bestimmenden Faktoren für den hydraulischen Durchfluss der Düse. Einspritzdüsen sind zusätzlich durch weitere Parameter wie z.B. den Düsentyp (Sitzloch, Sackloch oder Mini-Sackloch), die HE-Verrundung (Radius an der Zuströmkante an der Innenseite eines Düsenlochs) oder den die Konizität beschreibenden K-Faktor charakterisiert. All diese Parameter haben jedoch im Vergleich zu den zuvor erwähnten Hauptparametern einer Düse einen eher geringeren Einfluss auf das Strahlbild und den damit verbundenen Prozess der Gemischaufbereitung. Einen größeren Effekt hinsichtlich des Strahlaufbruchs ergibt sich aus dem

Kavitationsverhalten einer Einspritzdüse. Die gezielte Einsetzung dieses Effekts zur Optimierung der Gemischaufbereitung hinsichtlich homogener Brennverfahren ist theoretisch denkbar. Für konventionelle Dieselmotoren haben sich einreihige Einspritzdüsen mit ca. 6-10 Spritzlöchern etabliert. Der Spritzwinkel wird in der Regel so gewählt, dass bei der für Dieselmotoren typischen ω -Mulde in OT-Stellung des Kolbens in Richtung der Muldenkante eingespritzt wird (Spritzwinkel ca. 130° bis 160°).

Für Diesel-HCCI-Brennverfahren hingegen muss bezüglich der Einspritzgeometrie der Düse ein Kompromiss gefunden werden, der in der Lage ist, sowohl den Homogen-Betrieb im unteren Lastbereich, als auch den konventionellen Betrieb im mittleren und hohen Lastbereich darzustellen. Dabei muss unter allen Umständen die Vollastfähigkeit der Düse gewährleistet sein. Für Diesel-HCCI-Brennverfahren mit sehr früher Einspritzung ist grundsätzlich ein steilerer Spritzwinkel von Vorteil. Damit wird die freie Weglänge des Einspritzstrahls erhöht und gleichzeitig auch der Kontakt mit der Brennraumwand reduziert. Die Kraftstofftropfen erhalten somit mehr Zeit für die Verdampfung in den ohnehin ungünstigeren thermodynamischen Bedingungen des Brennraums bei frühen Einspritzzeitpunkten ($T \downarrow$, $\rho \downarrow$). Dadurch wird bei der steileren Einspritzung das Brennraumvolumen besser vom Einspritzstrahl erfasst. Typische Spritzwinkel für Diesel-HCCI-Brennverfahren liegen folglich in einem Spritzwinkelbereich von 90° bis 130° . Bei Verwendung einer konventionellen Muldengeometrie (ω -Mulde) als Basis für ein Diesel-HCCI-Brennverfahren bleiben geometriebedingt auch die entsprechenden Strahlwinkel von 150° bis 160° erhalten.

Wünschenswert für Diesel-HCCI-Brennverfahren wären Düsen mit mehreren, unabhängig voneinander ansteuerbaren Lochreihen. Für den Diesel-HCCI-Betrieb selbst würde man nur die eher steilen Spritzwinkel bevorzugen, im Teillastbereich (konventioneller Betrieb) eher flachere Spritzwinkel. Zur Darstellung der Vollast könnten alle Lochreihen geöffnet werden. Im Moment ist der Einsatz solcher Düsen wegen der schwierigen technischen Umsetzung jedoch noch nicht möglich. Die Verwendung von zwei unterschiedlichen Düsen je Zylinder für Diesel-HCCI-Betrieb und konventionellen Betrieb scheitert wiederum an den zu hohen Kosten und am fehlenden Bauraum.

Als Kompromiss könnten sich in näherer Zukunft Düsen mit mehreren, gleichzeitig angesteuerten Lochreihen etablieren. Vorstellbar sind verschiedene Lochdurchmesser und Lochanzahl der Lochreihen, gemeinsame Auftreffpunkte von Einspritzstrahlen aus den verschiedenen Lochreihen, unterschiedliche Spritzwinkel der Lochreihen etc. Bereits aus dieser noch unvollständigen Liste von möglichen Varianten wird deutlich, dass die Entwicklung von Brennverfahren auf Basis solcher Düsen einen erheblichen Mehraufwand bedeuten würde. Insbesondere die Interaktion der Einspritzstrahlen der beiden Lochreihen vor bzw. nach Erreichen der Muldenwand müsste dabei sauber abgestimmt sein.

Hinsichtlich der besseren Gemischverteilung bzw. -homogenisierung ist grundsätzlich eine erhöhte Lochzahl mit kleineren Düsenlöchern (Annahme: gleicher hydraulischer Durchfluss des Injektors) von Vorteil. Mit der Verkleinerung des Lochdurchmessers wird jedoch der Impuls und damit auch die Eindringtiefe der einzelnen Einspritzstrahlen verringert und somit die Darstellung der Vollast erschwert. Zusätzlich steigt bei kleineren Düsenlöchern die Verkockungsneigung an. Auch an dieser Stelle muss bei der Wahl der Düsengeometrie ein tragfähiger Kompromiss gefunden werden.

2.4.9 Einspritzstrategien

Im Vergleich zur Einspritzstrategie von konventionellen Diesel-Brennverfahren mit einer Einspritzung kurz vor dem oberen Totpunkt (eventuell auch mit Voreinspritzung) lässt sich die Vielzahl von Einspritzstrategien der Diesel-HCCI-Brennverfahren in zwei Hauptkategorien einteilen: die frühe bzw. die späte Einspritzung. Beide Varianten haben das gemeinsame Ziel, den Kraftstoff im Bereich gemäßigter Brennraumtemperaturen einzuspritzen, damit sich ein ausreichender Zündverzug ergibt. Innerhalb dieses Zeitraums kann das Gemisch homogenisieren.

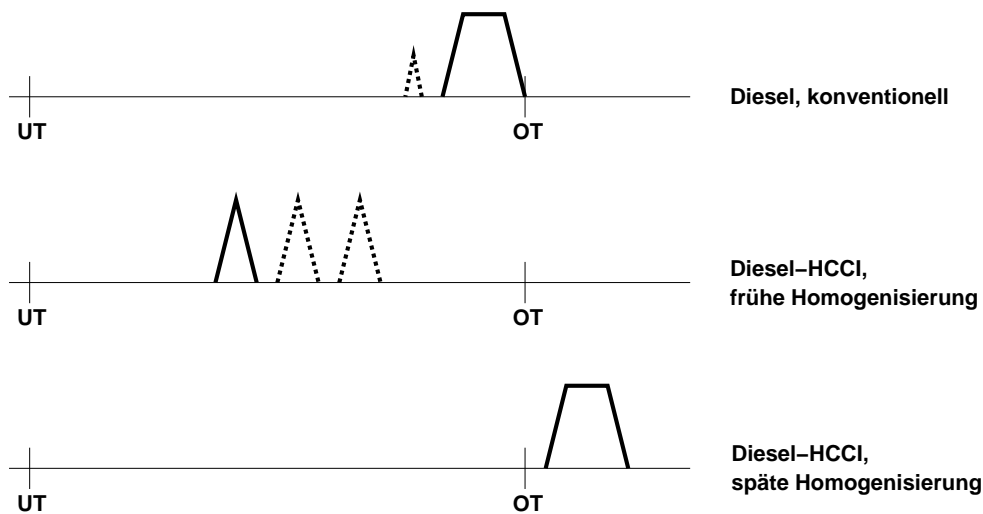


Abbildung 2.2: Vergleich konventionelle Diesel-Einspritzstrategie mit Diesel-HCCI-Einspritzstrategien.

In Abbildung 2.2 sind diese beiden Einspritzstrategien im Vergleich zur konventionellen Diesel-Einspritzstrategie dargestellt.

Für die auf früher Einspritzung basierenden Diesel-HCCI-Konzepte sind Spritzbeginne in einem weiten Spektrum von mehr als 100° vOT bis ca. 30° vOT bekannt (siehe Abschnitt 2.3). Häufig wird dazu eine getaktete Einspritzung eingesetzt, die zu einem verringerten Eindringverhalten der einzelnen Einspritzpulse im Vergleich zur Einspritzung der gleichen Menge mit einem Puls führt. Die Ursache dafür liegt in der Wirbelstruktur (Totwassergebiet), die sich hinter einem Einspritzpuls bildet und den Einspritzpuls selbst abbremst. Das Eindringverhalten einer getakteten Einspritzung ist somit gegenüber einer Einspritzung mit einem Puls zusätzlich strömungsmechanisch beeinflusst, während das Eindringverhalten einer einpulsigen Einspritzung (bei gleicher Gesamteinspritzmenge und gleichem Einspritzdruck) im Wesentlichen durch die Brennraumdicke bestimmt wird.

Bei der späten Homogenisierung dagegen wird in der Regel versucht, den Kraftstoff unter hohem Druck möglichst schnell mit einer Einspritzung in den Brennraum einzubringen. Da diese Einspritzung kurz nach dem oberen Totpunkt beginnt, wird normalerweise noch in die Mulde eingespritzt. Das Problem der Interaktion mit der Zylinderwand ist somit reduziert. Durch den hohen Strahlimpuls und der folglich sehr ausgeprägten Interaktion des Strahls mit der Muldenwand wird die Homogenisierung unterstützt.

Eine Mischform zwischen dem konventionellen Diesel-Brennverfahren und der rein homogenen Verbrennung stellt die homogen-heterogene Dieselerbrennung dar [38]. Hierbei wird nur ein

Teil des Kraftstoffs vorhomogenisiert. Nach der Zündung und Verbrennung erfolgt dann im Bereich des oberen Totpunkts die Einbringung der restlichen Kraftstoffmenge, die aufgrund der erhöhten Brennraumtemperaturen sofort brennt und deshalb einen hohen Diffusionsanteil besitzt. Die Aufteilung der eingespritzten Kraftstoffmenge bei der homogen-heterogenen Dieselerverbrennung hat in der Regel ihre Ursache in zu hohen Druckerhöhungen, die sich bei rein homogener Einbringung der gesamten Kraftstoffmenge ergeben würde.

Ein generelles Problem bei homogenen Dieselerbrennverfahren ist die Ölverdünnung. Ursache dafür sind Kraftstofftropfen, die wegen der frühen Einspritzung ($T \downarrow$, $\rho \downarrow$) die Zylinderwände vor dem vollständigen Verdampfen erreichen. Wenn die Kolbenringe bei der Kolbenaufwärtsbewegung diese Bereiche überstreichen, kann ein Teil des Kraftstofffilms in das Kurbelgehäuse und damit ins Motorenöl gelangen.

2.4.10 Brennraumgeometrie

Der Zylinderkopf bleibt bei Diesel-HCCI-Brennverfahren gegenüber konventionellen Dieselmotoren üblicherweise unverändert. Bei der Abstimmung der Muldengeometrie dagegen muss ein Kompromiss gefunden werden, der sowohl einen homogenen als auch einen konventionellen Betrieb des Motors erlaubt. Dabei ist der Einfluss von Diesel-HCCI-Brennverfahren mit früher Einspritzung auf die Muldengeometrie eher gering, da sich der Gemischbildungsprozess größtenteils oberhalb der Mulde abspielt und erst gegen Ende der Kompressionsphase vom Kraftstoff erfasst wird. Eine Ausnahme bilden dabei Verfahren mit sehr steilem Einspritzwinkel. Ein erheblich größerer Abstimmungsbedarf von Muldengeometrie und Brennverfahren besteht bei der spätliegenden Homogenisierung wie auch beim konventionellem Betrieb (Teillast und Vollast) des Motors. Da hier die Einspritzung im Bereich des oberen Totpunkts erfolgt, muss eine möglichst optimale Interaktion zwischen Einspritzstrahl und Mulde gewährleistet sein.

Generell hat der Einspritzwinkel eines Brennverfahrens den größten Einfluss auf die Muldengeometrie.

Bei flachem Spritzwinkel hat sich die ω -Mulde durchgesetzt. Der Einspritzstrahl ist im oberen Totpunkt auf den Muldenrand fokussiert. Der Muldenrand hat damit eine strahlteilende Funktion, wodurch der Kraftstoffdampf sowohl auf die Mulde als auch auf das Squish-Volumen aufgeteilt wird.

Bei steilen Einspritzungen werden normalerweise Mulden ohne Einzug verwendet, damit der hohe Anteil des in die Mulde eingespritzten Kraftstoffs nicht am Austritt aus der Mulde behindert wird und damit auch das Volumen oberhalb der Mulde erfassen kann.

2.5 Vor- und Nachteile homogener Brennverfahren

Wie bereits in den Abschnitten 2.1 und 2.2 ausgeführt, liegen die entscheidenden Vorteile der homogenen Brennverfahren eindeutig in der innermotorischen Reduzierung bzw. Vermeidung von Ruß und NO_x . Im Falle von Otto-HCCI-Brennverfahren kann zusätzlich der Verbrauch durch den drosselfreien HCCI-Betrieb gesenkt werden [9, 10]. Das Verbrauchspotenzial bei Diesel-HCCI-Brennverfahren ist wegen des ohnehin verbrauchsgünstigen Motorkonzepts nur gering.

Wie fast jeder Technologie haften allerdings auch diesem Brennverfahrenskonzept Nachteile an. Diese lassen sich im Wesentlichen folgenden Aspekten zuordnen: Kontrolle des Zündzeit-

punkts, HC- und CO-Bildung, Einschränkung des Applikationsbereichs (und damit notwendiger Weise der Übergang zu anderen Brennverfahren) und Geräuschbildung.

Die mitunter langen Zündverzugszeiten, die für die Homogenisierung des Luft-Kraftstoff-Gemischs notwendig sind, erschweren die *Kontrolle des Zündzeitpunkts*. Abhilfe schaffen an dieser Stelle Maßnahmen wie die Temperaturkonditionierung der Ansaugluft bzw. die AGR-Einleitung. Aber insbesondere die Gleichverteilung der AGR-Menge auf die einzelnen Zylinder bei gleicher Luftmenge gestaltet sich sehr schwierig und scheint zukünftig nur mit großem regelungstechnischem Aufwand möglich zu sein [121].

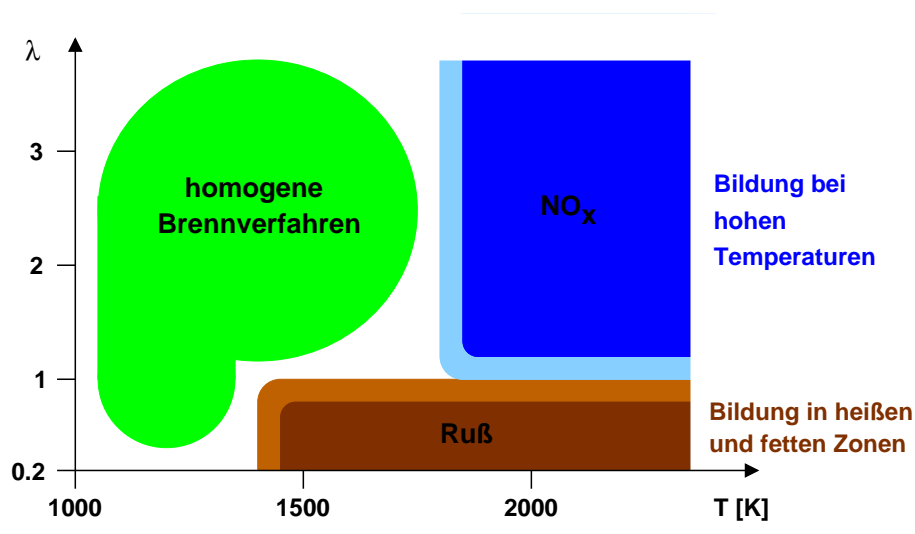


Abbildung 2.3: Applikationsbereich für homogene Brennverfahren

Die Notwendigkeit einer ausreichenden Homogenisierung des Gemischs führt jedoch auch zum Problem der erhöhten *HC- und CO-Bildung*. Dafür sind zwei unterschiedliche Bildungsmechanismen verantwortlich. Zum einen dringt der Kraftstoff insbesondere bei sehr frühen Direkteinspritzungen bis zur kalten Zylinderwand vor und wird dort wegen der zu geringen Temperatur nicht verbrannt. Zum anderen werden durch die lange Zündverzugszeit lokal einige Bereiche zu stark ausgemagert, weshalb auch dort keine bzw. eine nur unvollständige Verbrennung stattfindet. Eine weitere Einschränkung ergibt sich durch die schnelle Wärmefreisetzung des vorhomogenisierten Gemischs in Form einer im gesamten Brennraum verteilten Vormischverbrennung. Hier sind durch den maximalen Druckanstieg und durch den maximalen Verbrennungsdruck Grenzen gesetzt, die damit dieses Brennverfahren nur im unteren Lastbereich applizierbar machen. Hinzu kommt die Tendenz zur Rußbildung bei fetteren Gemischen wie auch die NO_x-Bildung bei Überschreitung einer Brennraumtemperatur von ca. 1800° Kelvin. Die damit verbundenen *Einschränkungen im Applikationsbereich* sind in Abbildung 2.3 skizziert.

Die Beschränktheit auf den unteren Lastbereich bei homogenen Brennverfahren macht somit zusätzlich die Anwendung von konventionellen Applikationsstrategien in höheren Lastbereichen erforderlich. Insbesondere der *Übergang auf andere Brennverfahren* zur Umsetzung des Hochlastmotorbetriebs stellt hohe Anforderungen an die Motorsteuerung bzw. -regelung und deren Abstimmung.

Nicht zuletzt besitzen homogene Brennverfahren durch die schnelle Wärmefreisetzung eine Neigung zur gegenüber konventionellen Brennverfahren erhöhten *Geräuschbildung*. Einzige wirkungsvolle innermotorische Maßnahme zur Reduzierung des Geräuschniveaus ist die Erhöhung der AGR-Menge, welche die Durchbrenngeschwindigkeit des Luft-Kraftstoffgemischs und damit den Druckanstieg senkt.

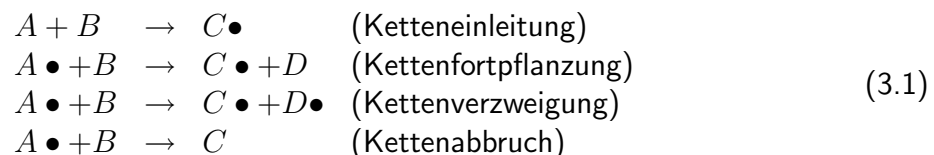
Kapitel 3

Kinetik bei homogenen Brennverfahren

Bei homogenen Brennverfahren kommt, wie in Kapitel 2 bereits angedeutet, aus chemischer Sicht insbesondere der Aspekt der Kinetik bei tiefen und mittleren Temperaturen zum Tragen. Im Bereich höherer Temperaturen gleichen sich die chemischen Prozesse denen der konventionellen Brennverfahren an. Die Kinetik konventioneller Brennverfahren stellt somit eine Untermenge im Vergleich zur Kinetik homogener Brennverfahren dar. Aus diesem Grund wird in den folgenden Abschnitten nach einem kurzen Einblick in die grundlegenden Typen von chemischen Reaktionen ein kompletter Überblick sowohl über die Tieftemperatur- als auch über Mittel- und Hochtemperaturkinetik gegeben. Nach weiteren Ausführungen zur Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung von homogenen Brennverfahren schließt das Kapitel mit der Betrachtung der 0-dimensionalen numerischen Simulation von kinetischen Verbrennungsprozessen.

3.1 Grundtypen chemischer Reaktionen

Aus chemischer Sicht ist die Einleitung der Zündung und der Ablauf eines Verbrennungsvorgangs eine in der Regel komplizierte Aneinanderreihung von Radikalkettenreaktionen. Als Radikal wird dabei ein Atom oder ein Molekül bezeichnet, welches mindestens ein ungepaartes Elektron besitzt. Radikale sind aufgrund ihrer Reaktionsfähigkeit meist sehr kurzlebig. Eine Auswahl möglicher Szenarien von Radikalkettenreaktionen ist im Folgenden schematisch anhand zweier Ausgangsstoffe (Edukte) A und B und der Endstoffe (Produkte) C und D dargestellt. Radikale sind, wie auch in den folgenden Abschnitten, jeweils mit \bullet gekennzeichnet.



Die ersten Radikale einer Radikalkettenreaktion werden durch Ketteneinleitungsreaktionen mit entsprechenden stabilen Molekülen gebildet. Bei den Kettenfortpflanzungsreaktionen werden in gleichem Maße Radikale gebildet wie vernichtet. Die Anzahl der Radikale ändert sich demzufolge nicht. Anders verhalten sich dagegen die Kettenverzweigungsreaktionen. Sie haben eine Erhöhung der Anzahl der Radikale zur Folge und tragen damit zur Beschleunigung des gesamten Prozesses bei. Eine Kettenabbruchreaktion sorgt schließlich dafür, dass ein

Radikal in ein stabiles Molekül überführt wird.

3.2 Molekularstruktur von Kohlenwasserstoffen

Die Grundbausteine von Kohlenwasserstoffen sind Kohlenstoff C und Wasserstoff H . Die möglichen Molekularstrukturen werden im Wesentlichen durch die Anzahl der freien Elektronen bestimmt. Bei Kohlenstoff sind dies vier und bei Wasserstoff ein freies Elektron. Jedes freie Elektron ist in der Lage, eine Elektronenpaarbindung mit einem freien Elektron eines anderen Atoms einzugehen. Folglich besitzt das Kohlenstoffatom durch die hohe Anzahl von vier freien Elektronen vielfältige Verbindungsmöglichkeiten zu anderen Atomen, woraus sich auch die folgenden Grundtypen von Molekularstrukturen ableiten:

- Alkane : Kohlenwasserstoffketten nur mit Einfachbindungen ($\cdots - C - C - \cdots$)
- Alkene : Kohlenwasserstoffketten mit Doppelbindung(en) ($\cdots C = C \cdots$)
- Alkine : Kohlenwasserstoffketten mit Dreifachbindung(en) ($\cdots - C \equiv C - \cdots$)
- Zyκλο-Alkane : ringförmige Kohlenwasserstoffketten nur mit Einfachbindungen
- Aromate : ringförmige Kohlenwasserstoffketten mit Doppelbindungen

In den folgenden Abschnitten werden die für die Umsetzung von Kohlenwasserstoffen bestimmenden kinetischen Prozesse unterteilt in Niedertemperatur-, Mitteltemperatur- und Hochtemperatur-Kinetik in Bezug auf Alkane, Alkene und Aromaten im Detail beschrieben [4].

3.3 Niedertemperatur-Kinetik

Im Niedertemperaturbereich ($T < 850$ K) haben Alkane, Alkene und Aromaten ein stark voneinander abweichendes Reaktionsverhalten, weshalb für alle Spezies das Oxidationsverhalten separat erläutert wird.

Alkan-Oxidation

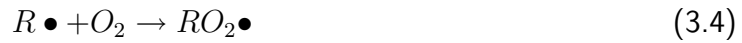
Der wesentliche Reaktionsschritt bei der Oxidation von Alkanen (RH) ist eine H-Atom-Abstraktion, die die Bildung eines Alkyl-Radikals ($R\bullet$) zur Folge hat.



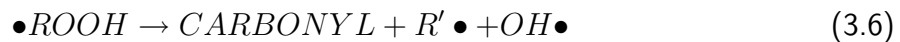
Der Verbrauch der Alkylradikale erfolgt dann in zwei unterschiedlichen Reaktionen: Zum einen wird unter Verwendung von O_2 ein Alken und Hydroperoxid $HO_2\bullet$ erzeugt. Die Doppelbindung des Alkens ist damit ein weiterer Angriffspunkt für die Folgereaktionen.



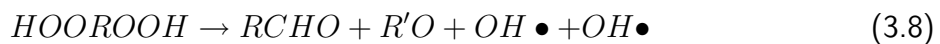
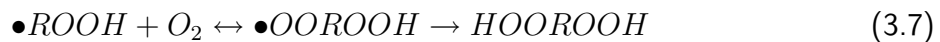
Eine weitere Reaktionsmöglichkeit ist die Bildung eines Alkylperoxid-Radikals ($RO_2\bullet$), welches dann zu Hydroperoxidalkyl ($\bullet ROOH$) weiterreagieren kann.



Das Alkylperoxid-Radikal wiederum kann auf zwei verschiedenen Reaktionspfaden umgesetzt werden. Zum einen unter Bildung einer Carbonylverbindung (C-Atom mit Doppelbindung zu O-Atom und zwei Einfachbindungen zu Kohlenwasserstoffresten R_1 und R_2 : $R_1 - CO - R_2$), eines Alken-Radikals $R'\bullet$ und eines $OH\bullet$ -Radikals.

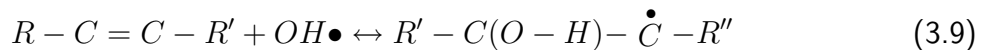


Zum anderen kann das Alkylperoxid-Radikal zunächst in einem Oxidationsschritt zu Hydroperoxidalkylperoxid ($\bullet OOROOH$) reagieren. Dieses wiederum reagiert in einer sich anschließenden Reaktion zu einem Aldehyd ($RCHO$) und zwei $OH\bullet$ -Radikalen.

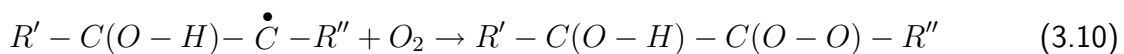


Alken-Oxidation

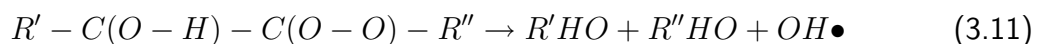
Die Oxidation von Alkanen enthält implizit auch die Alken-Oxidation, da Alkene durch die H-Atom-Abstraktion entstehen (siehe Gleichungen 3.2 und 3.3). In der folgenden Reaktionsgleichung wird ein beliebiges Alken durch $R' - C = C - R''$ repräsentiert, wobei R' und R'' zwei unterschiedliche Kohlenwasserstoffketten darstellen. Das mit \bullet gekennzeichnete Kohlenwasserstoffatom ist wegen des freien Elektrons sehr reaktiv.



In einem sich anschließenden Oxidationsschritt kann das so entstandene Radikal ein Sauerstoffmolekül an die freie Bindung anlagern.

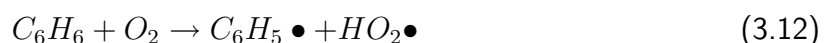


Mit Hilfe des Weddington-Mechanismus [4] kommt es zum einen zu einer Aufspaltung des $R' - C(O - H) - C(O - O) - R''$ -Moleküls und zur Abspaltung eines $OH\bullet$ -Radikals.



Aromaten-Oxidation

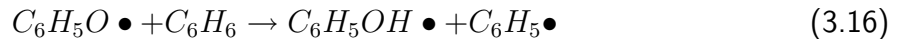
Die Aromaten sind sehr stabile Ringstrukturen und unterliegen deshalb im Vergleich zu Alkanen und Alkenen abweichenden Tieftemperatur-Mechanismen. Durch Oxidation kommt es zu Bildung eines $C_6H_5\bullet$ -Radikals bei gleichzeitiger Bildung eines $HO_2\bullet$ Radikals.



In einem weiteren Oxidationsschritt wird Sauerstoff an das $C_6H_5\bullet$ -Radikal angelagert.



Es folgen drei weitere Reaktionsschritte, die in der Bildung eines $C_6H_5OH\bullet$ -Radikals münden.



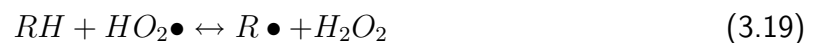
Nach einem analogen Durchlaufen der Reaktionsabfolge 3.12 bis 3.16 entsteht ein Radikal der Form $\bullet HOC_6H_6OH\bullet$. Die beiden $OH\bullet$ -Gruppen lagern sich somit an den Ring an. Bei Temperaturen unterhalb von 600 K ist zum Aufbruch der immer noch stabilen Ringstruktur deshalb eine weitere Oxidationsreaktion erforderlich. Dabei wird kurzzeitig Sauerstoff im Inneren der Ringstruktur in der Weise angelagert, dass der Ring durch die zwei Sauerstoffatome überbrückt wird. Als Folge der Überbrückung bricht der Ring auf.



Bei dieser Reaktion entsteht entweder $C_4H_4O_4$ oder $C_2H_2O_4$ und eine entsprechende Menge Acetylen bzw. Ethin (C_2H_2).

3.4 Mitteltemperatur-Kinetik

Dem Niedertemperaturbereich schließt sich der mittlere Temperaturbereich an. Nach Westbrook [5] kann er etwa zwischen 850 K und 1200 K angenommen werden. In diesem Temperaturbereich, in dem auch die Zündung eingeleitet wird, kommt es zu einer massiven Bildung von Hydrogenperoxid-Molekülen (H_2O_2), die aus der Reaktion z.B. eines Alkans mit einem $HO_2\bullet$ -Radikal hervorgehen.



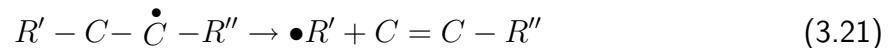
Mit M ist ein nicht näher spezifizierter Stoßpartner bezeichnet, der für die Aktivierung bzw. für den Ablauf der Reaktion notwendig ist, dabei jedoch nicht umgesetzt wird. Die Bildung von H_2O_2 hat für den Zündprozess eine entscheidende Bedeutung. Diese bei geringeren Temperaturen gebildeten Spezies sind so lange stabil, bis sie einem entsprechend mittleren Temperaturniveau ausgesetzt sind. Dann erfolgt in einer sehr schnell ablaufenden Reaktion die Aufspaltung in zwei $OH\bullet$ -Radikale.



Diese massive Freisetzung von $OH\bullet$ -Radikalen führt damit zu einer erheblichen Beschleunigung des Zündprozesses.

In diesem mittleren Temperaturbereich setzt auch ein weiterer Zerfallsmechanismus der Kohlenwasserstoffe ein, der als β -Zerfall [4, 2] bezeichnet wird. Es ist ein rein thermisch bedingter

Prozess, der z.B. aus einem beliebigen Alkyl-Radikal ein Alken und ein kleineres Alkyradikal bildet.



Dieser Prozess findet so lange statt, bis die als relativ stabil bekannten Radikale Methyl (CH_3) und Ethyl (C_2H_5) entstehen.

3.5 Hochtemperatur-Kinetik

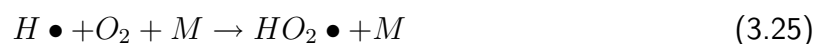
Die Hochtemperatur-Kinetik läuft in einem Temperaturbereich oberhalb von 1200 K ab. Nach [4] kann die Oxidation von Alkanen und Alkenen bei diesen Temperaturen im Wesentlichen in drei Schritte zusammengefasst werden:

1. Überführung der Kohlenwasserstoffe unter Bildung von H_2O und geringer Energieabgabe in kleinere Kohlenwasserstoffe
2. Weiterreaktion der Kohlenwasserstoffe unter Bildung von CO
3. Umsetzung von CO in CO_2

Damit findet dieser Prozess für alle höheratomigen Kohlenwasserstoffe in ähnlicher Form statt. Zu den wichtigsten radikalbildenden Reaktionen im Hochtemperaturbereich gehören:



Dabei sind auch Rekombinationsreaktionen in stabilere Radikale wie z.B. $HO_2 \bullet$ möglich:



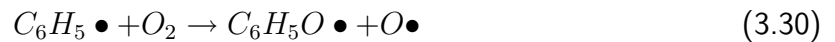
Wichtigster Energielieferant ist die Oxidation von CO zu CO_2 . Dieser Reaktionsschritt trägt 45-50% zur Gesamtenergiefreisetzung bei [4] und ist gleichzeitig auch die finale Reaktion bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen.



Bei hohen Temperaturen erfolgt der größte Teil der Energiefreisetzung über die erste Reaktion. All diese Reaktionen finden in der Regel verzögert statt, da die für die Reaktionen benötigten Radikale bevorzugt eine Reaktion mit Kohlenwasserstoffradikalen eingehen.

Ein Sonderstellung nimmt die Oxidation von den Aromaten ein. Wie schon im Abschnitt der Tieftemperatur-Kinetik erwähnt, sind die Aromaten wegen ihrer Ringstruktur sehr stabil. Die

schon im Niedertemperaturbereich gebildeten $C_6H_5\bullet$ -Radikale, die immer noch eine Ringstruktur aufweisen, lagern im Hochtemperaturbereich durch Oxidation mit O_2 ein Sauerstoffatom an die Ringstruktur an.



Das so entstandene $C_6H_5O\bullet$ -Radikal, welches immer noch eine Ringstruktur aufweist, reagiert dann unter Abspaltung von CO zu $C_5H_5\bullet$.



Mit dieser Reaktion lässt sich auch erklären, weshalb es bei Verbrennungsprozessen basierend auf Aromaten (im Vergleich zu Alkanen und Alkenen) schon in einer relativ frühen Phase zur CO -Bildung kommt [4].

3.6 Cool-Flames und negativer Temperaturkoeffizient (NTC)

Im Niedertemperaturbereich tritt bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen ein Effekt auf, der als Cool-Flame bezeichnet wird. Dies ist eine erste Stufe der Wärmefreisetzung im Verbrennungsablauf mit dem Zündverzug $t_{zv,1}$ (siehe Abbildung 3.1). Im Anschluss daran geht die Reaktivität des Gemischs auf ein sehr geringes Niveau zurück, bis mit dem Beginn der Hauptverbrennung (Zündverzug $t_{zv,2}$) der zweite Teil der Energiefreisetzung folgt. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von einer Mehrstufenzündung.

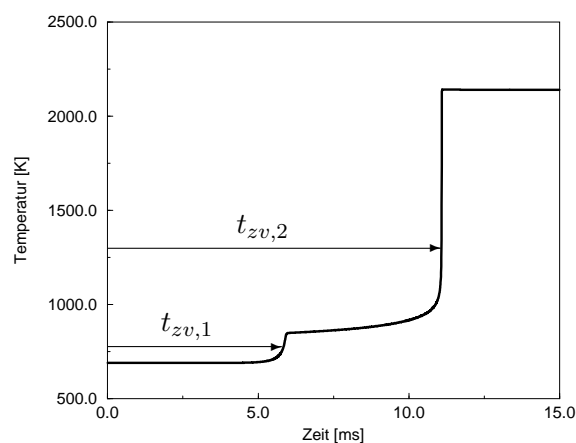
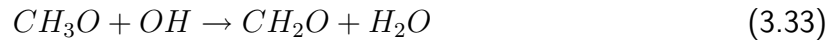
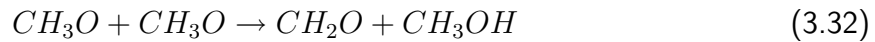


Abbildung 3.1: Mehrstufiges Zündverhalten einer *n*-Heptan/Luft-Mischung (isochore Rechnung) mit den Zündverzugszeiten für die Cool-Flame-Zündung ($t_{zv,1}$) und die Hauptzündung ($t_{zv,2}$).

Innerhalb dieser temporären Verbrennungsphase kann die Temperatur um bis zu 200 K ansteigen [8] und es wird bis zu 10 % der Energie freigesetzt [4]. Die Cool-Flames charakterisieren sich

optisch durch eine bläuliche Farbe. Sie resultiert aus der Bildung von Formaldehyd (CH_2O), welche im Wesentlichen durch die beiden folgenden Reaktionen [8] beschrieben werden kann.



Die abklingende Reaktivität im Anschluss an die Cool-Flame-Verbrennung hat eine Verzögerung der Zündung bzw. eine Verlängerung der Induktionszeit zur Folge. Dieser Effekt zeigt sich auch bei der typischen, logarithmischen Auftragung der Zündverzugszeit über dem mit 1000 multiplizierten Kehrwert der Starttemperatur (Abbildung 3.2). Der Temperaturbereich, bei dem trotz Erhöhung der Temperatur eine Verlangsamung der Zündung eintritt, wird als negativer Temperaturkoeffizient (NTC) bezeichnet.

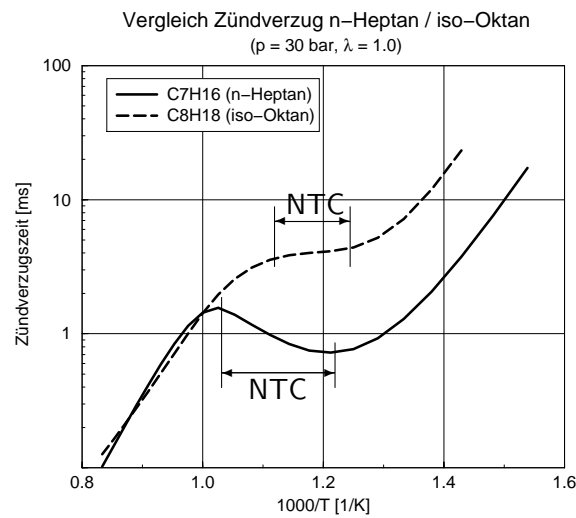


Abbildung 3.2: Vergleich des Zündverzugsverhaltens von *n*-Heptan (C_7H_{16}) und *iso*-Oktan (C_8H_{18}) (Simulationsergebnisse (isochor) erzeugt mit Mechanismen von Golovitchev [100]).

Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass für alle gasförmigen Reaktionen generell ein exponentielles Temperaturverhalten vorliegt [2, 8, 95, 97, 98], siehe auch Arrhenius-Ansatz in Kapitel 3.12). Deshalb führt eine Temperaturerhöhung um 10 K bei den meisten Reaktionen zu einer Erhöhung der Reaktionsgeschwindigkeit um den Faktor 2-4 [98]. Mit diesem Grundverhalten chemischer Reaktionen läßt sich der NTC-Effekt jedoch nicht erklären. Das Phänomen des NTC beruht vielmehr auf der Tatsache, dass im Niedertemperaturbereich durch Sauerstoffaddition Vorläufer-Spezies für Kettenverzweigungsreaktionen entstehen [8]. Mit Erreichen eines etwas höheren Temperaturniveaus zerfallen diese Spezies jedoch wieder, und es folgt eine Phase sehr geringer Reaktivität. Diese Phase dauert so lange an, bis bei steigenden Temperaturen radikalbildende Reaktionen wieder das Reaktionsverhalten bestimmen und die Zündung des Gemischs einleiten.

Da die Reaktivität von *iso*-Oktan erst mit Erreichen des mittleren Temperaturbereichs und damit erheblich später als der Reaktionsbeginn von *n*-Heptan einsetzt, ist auch der negative Temperaturkoeffizient von *iso*-Oktan erheblich schwächer ausgeprägt. In der Literatur [8] werden für *iso*-Oktan nennenswerte Reaktionen ab 850 K angegeben, während die Oxidation von

n-Heptan schon ab 550 K beginnt. Somit tritt bei iso-Oktan in Bezug auf den Verlauf der Zündverzugszeit im Bereich des NTC lediglich eine Abflachung auf, während bei n-Heptan im NTC-Bereich ein deutlicher Wiederanstieg der Zündverzugszeit zu erkennen ist (siehe Abbildung 3.2).

3.7 Zündverhalten von Kohlenwasserstoffen

Das Zündverhalten von Kohlenwasserstoffen kann sehr anschaulich in einem P-T-Zünddiagramm dargestellt werden. Die entsprechenden Regimes sind in Abbildung 3.3 für den motorisch relevanten Druck- und Temperaturbereich skizziert.

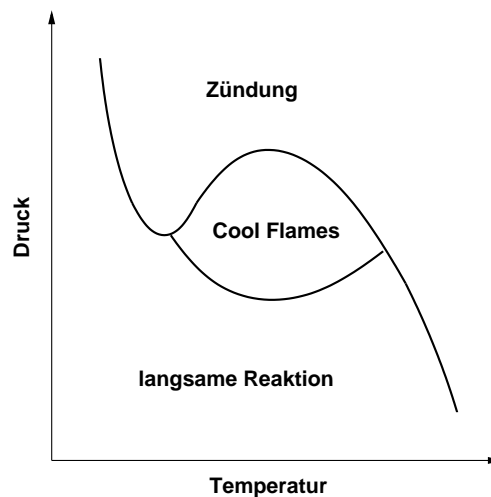


Abbildung 3.3: Schematisches P-T-Zünddiagramm für Kohlenwasserstoffe (analog [96]) im motorisch relevanten Druck- und Temperaturbereich.

P-T-Zünddiagramme werden generiert, indem bei unterschiedlichen Drücken das Zündverhalten eines Luft-Kohlenwasserstoff-Gemischs in einem Gefäß beobachtet wird, welches in einem Ofen auf konstanter Temperatur gehalten wird [96]. Die auf diese Weise ermittelten Grenzen der einzelnen Regimes sind scharf. Im linken unteren Bereich von Abbildung 3.3 wird das Verhalten der Kohlenwasserstoffe von langsamen Reaktionen bestimmt. Ohne das Auftreten von Cool-Flames würde sich ein direkter Übergang des Bereichs der langsamen Reaktionen zum Zündbereich ergeben. Da jedoch Kohlenwasserstoffe zu einer Cool-Flame-Verbrennung neigen, ergibt sich das komplexe Aussehen des Diagramms. Dabei schiebt sich zwischen den Bereich der langsamen Reaktionen und der Zündung in der dargestellten Weise der Bereich der Cool-Flames. Der Grund für den wieder ansteigenden Ast der Zündgrenze auf Höhe des Cool-Flame-Bereichs hat seine Ursache im NTC-Effekt [96]. Im rechten Bereich des Diagramms dominiert bei ausreichend hohen Temperaturen unabhängig vom Druck die Zündung.

3.8 Einfluss motorisch relevanter Temperaturen, Gemischzusammensetzungen, Drücke und AGR-Raten auf den Zündprozess

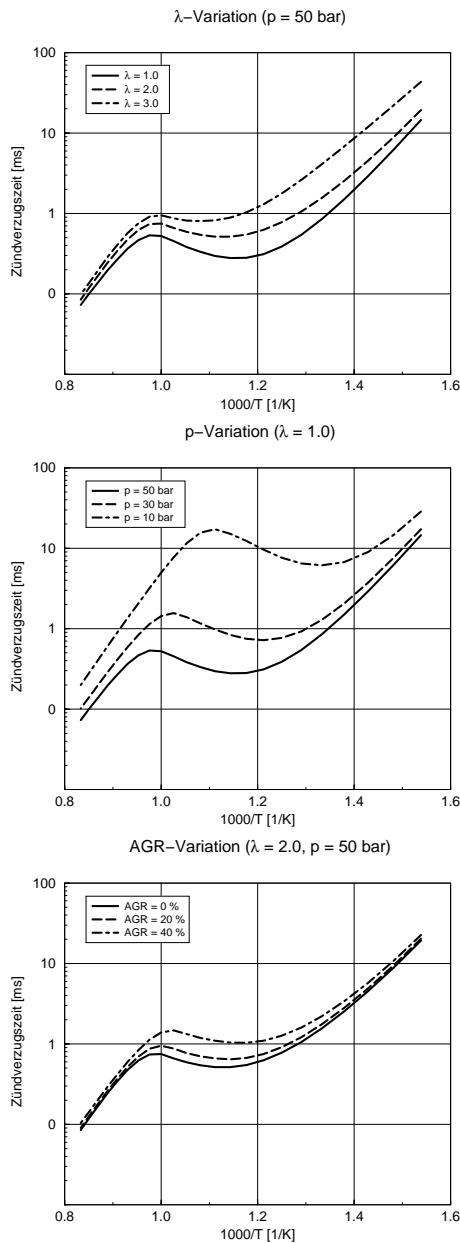


Abbildung 3.4: Zündverzugs-Diagramme (Simulationsergebnis, isochor gerechnet, C_7H_{16} -Mechanismus von Golovitchev [100]): λ -Variation (oben), Druck-Variation (Mitte), AGR-Variation (unten).

Am Beispiel von n-Heptan-Luft-Gemischen soll der Einfluss der Gemischzusammensetzung λ , des Druckes p und der AGR-Rate auf den Zündprozess verdeutlicht werden. Basis sind 0d-Kinetik-Simulationen, in denen zum einen eine Variation der genannten Parameter und zum anderen eine gleichzeitige Variation der Starttemperatur durchgeführt wurden. Die Ergebnisse sind in den Diagrammen in Abbildung 3.4 dargestellt, in denen jeweils die Zündverzugszeit über dem mit 1000 multiplizierten Kehrwert der Start-Temperatur aufgetragen ist. Für dieses numerische Experiment ist eine isochore Randbedingung gewählt worden. Auf diese Weise können mit guter Näherung Stoßrohruntersuchungen simuliert werden.

Unabhängig von den variierten Parametern ist in allen Diagrammen der charakteristische Verlauf der Zündverzugszeit in jeder Kurve gut zu erkennen, der aus dem für Kohlenwasserstoffe typischen negativen Temperaturkoeffizienten (NTC) resultiert.

Abbildung 3.4 (oben) zeigt eine Variation der Gemischzusammensetzung. Klar erkennbar ist eine Zunahme der Zündverzugszeit mit zunehmenden λ -Werten [99]. Während bei großen Starttemperaturen ($T > 1000$ K) die Unterschiede in den Zündverzugszeiten nur sehr gering sind (hohe Dichte der Linienzüge), nimmt die Spreizung beginnend mit dem NTC-Bereich hin zu kleineren Starttemperaturen zu.

Eine Druckvariation ist in Abbildung 3.4 (Mitte) dargestellt. Dabei ist der Einfluss auf die Zündverzugszeit im Bereich des NTC am größten (geringe Liniendichte). Erwartungsgemäß nimmt die Zündverzugszeit mit steigendem Druck ab [99]. Dieser Effekt erklärt sich durch die Zunahme der Stoßprozesse zwischen den einzelnen Molekülen, wodurch die Wahrscheinlichkeit einer Reaktion erhöht wird.

Eine Variation der AGR-Rate bzw. des Restgasanteils (Abbildung 3.4, unten) wirkt sich primär im Bereich des NTC aus. Die grundsätzliche Verzögerung der Zündung mit Erhöhung der AGR-Rate resultiert aus der abnehmenden Sauerstoffkonzentration und der gegenüber Luft erhöhten Wärmekapazität des Rest-

gasanteils (insbesondere CO_2 und H_2O).

3.9 Einfluss der Turbulenz auf die Verbrennung

Unter verbrennungsmotorischen Bedingungen kommt die Turbulenz als weiterer Einflussparameter hinzu. Der Einfluss der Turbulenz auf die Verbrennung ist dabei stark abhängig vom Flammentyp des jeweiligen Brennverfahrens.

Bei der konventionellen ottomotorischen Verbrennung mit ihren Flammenfronten steigt mit höherer Turbulenz auch die Brenngeschwindigkeit. Ursache dafür ist die durch Turbulenz stärker zerklüftete und damit vergrößerte Flammenfrontoberfläche. Diesem Effekt ist es zu verdanken, dass die ottomotorische Verbrennung auch mit steigender Motordrehzahl noch funktioniert, da die Verbrennung durch die ebenfalls erhöhte Turbulenz (erzeugt durch die zerfallende Tumble-Strömung) beschleunigt wird. Da beim Ottomotor das Luft-Kraftstoff-Gemisch einen sehr hohen Homogenisierungsgrad aufweist, treten turbulenzbedingte Varianzen vornehmlich in der Temperatur auf.

Bei der Diffusionsverbrennung im Dieselmotor trägt ebenfalls ein erhöhtes Turbulenzniveau zu einer schnelleren Verbrennung bei, hervorgerufen durch eine beschleunigte Durchmischung von Kraftstoff und Oxidator in der Verbrennungszone. Die Turbulenz wird in diesem Fall durch die Einspritzstrahlen induziert. Im Extremfall kann auch Flammenlöschen auftreten. Dabei liegt die Vorstellung zugrunde, dass in Bereichen sehr hoher Turbulenz die Flammen starken Streckungseffekten unterworfen sind verbunden mit einem schnellen Stoff- und Wärmetransport aus der Reaktionszone [2, 72]. Verläuft dieser Abtransport schneller als die Wärmeproduktion durch chemische Reaktion, so verlöschen die Flammen. Generell treten bei der Dieselverbrennung durch die auf engem Raum stattfindenden und zeitlich dicht aufeinanderfolgenden Verdampfungs- und Mischungsprozesse ausgeprägte λ - und Temperatur-Varianzen im Bereich der Verbrennungszone auf.

Bei homogenen Brennverfahren mit tendenziell vorgemischter Gleichraumverbrennung ist die Wirkungsweise der Turbulenz auf die Verbrennung im Detail noch nicht eindeutig geklärt. Für HCCI-Brennverfahren konnten jedoch sowohl experimentell [88] als auch numerisch [89, 90] bei gesteigerter Turbulenz im Brennraum gemäßigte Wärmefreisetzungsraten nachgewiesen werden.

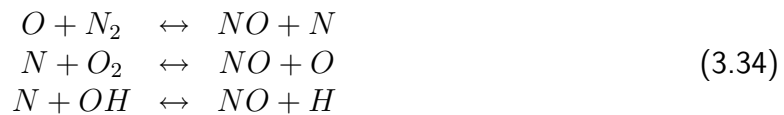
3.10 Schadstoffverhalten der motorischen homogenen Verbrennung

Die bei der motorischen Verbrennung wesentlichen Schadstoffe sind Stickoxide (NO_x), Ruß, Kohlenmonoxid (CO) und unverbrannte Kohlenwasserstoffe (HC).

Wie schon in den vorherigen Kapiteln erwähnt, liegt der entscheidende Vorteil der homogenen Brennverfahren in der starken Verringerung von NO_x und Ruß. Die Ursache für das stark reduzierte Rußaufkommen ist das vor der Zündung weitgehend homogenisierte Luft-Kraftstoff-Gemisch, in dem wegen des globalen Luftüberschusses praktisch keine fetten Zonen mehr vorhanden sind.

Die NO_x -Emissionen in herkömmlichen Verbrennungsmotoren setzen sich im Wesentlichen aus

NO und NO₂ zusammen. Generelle Voraussetzungen für die Bildung von NO_x sind hohe Temperaturen (dominierender Einflussparameter) bei einem ausreichenden Sauerstoffangebot. Es wird zwischen der thermischen und der prompten NO-Bildung unterschieden. Durch Folgereaktionen wird dann ein Teil des NO zu NO₂ umgesetzt. Die thermische NO-Bildung wird in der Regel durch folgende drei Elementarreaktionen beschrieben:



Diese Reaktionsgleichungen sind auch unter dem Namen erweiterter Zeldovich-Mechanismus bekannt, wobei Zeldovich [118] die beiden ersten Elementargleichungen vorgeschlagen hat. Die erste der drei Reaktionen benötigt wegen der Aufspaltung der Dreifachbindung von N₂ eine hohe Aktivierungsenergie, die entsprechend hohe Temperaturen oberhalb von 2000 K voraussetzt. Temperaturen in dieser Größenordnung werden jedoch bei homogenen Brennverfahren wegen des überstöchiometrischen Betriebs idealerweise nicht erreicht. Neben der Temperatur spielen jedoch auch das Luftverhältnis und die Verweilzeit eine entscheidende Rolle bei der NO-Bildung. Die höchsten adiabaten Flammentemperaturen werden bei einem Luftverhältnis von $\lambda = 0.95$ erreicht. Untersuchungen von Hohlbaum [91] haben jedoch ergeben, dass die maximale NO-Bildung bei einem leicht mageren Luftverhältnis von $\lambda = 1.1$ erreicht wird. Doch da homogene Brennverfahren mit größeren Luftverhältnissen und folglich auch mit geringeren Verbrennungstemperaturen betrieben werden, wird die Bildung von NO erheblich verringert. Als zusätzliche Maßnahme zur Vermeidung von NO werden hohe AGR-Raten, mitunter sogar gekühlt, eingesetzt (siehe Kapitel 2.4.2). Durch die hohe Wärmekapazität des Restgases werden die Verbrennungstemperaturen nochmals gesenkt. Die durch das Restgas reduzierte Sauerstoffmenge im Brennraum trägt zusätzlich zur Vermeidung von NO bei. Das prompte NO hingegen entsteht bei konventionellen Dieselmotoren vornehmlich in der Flammenfront. Es konnte gezeigt werden [92], dass dessen Bildung jedoch nur unterhalb eines Luftverhältnisses von $\lambda = 1.4$ auftritt, womit auch dieser NO-Bildungsmechanismus für homogene Brennverfahren nur eine geringe Relevanz hat.

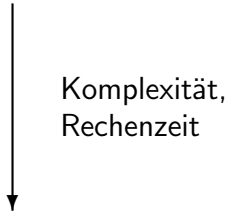
Die eigentlichen Schadstoffe der homogenen Brennverfahren sind somit CO und HC. Wie bereits in Abschnitt 3.5 angedeutet, ist die Bildung von CO die Folge der Oxidation von niedermolekularen Kohlenwasserstoffen. Für die finale Umsetzung von CO zu CO₂ ist in erster Linie Reaktion 3.26 maßgeblich [93, 8]. Diese Reaktion besitzt jedoch erst bei Temperaturen oberhalb von 1100 K [93] nennenswerte Geschwindigkeiten. In wandnahen Bereichen wird diese Temperatur unterschritten und damit eine Weiterreaktion von CO zu CO₂ unterbunden. Auch bei mageren Gemischen ($\lambda > 1.4$), wie sie typischerweise auch in homogenen Brennverfahren auftreten, kommt es wegen der geringen Verbrennungstemperaturen und unvollständiger Verbrennung zu erhöhten CO-Konzentrationen. Unabhängig vom Brennverfahren wird während der Expansion durch die absinkenden Temperaturen im Brennraum die Oxidation von CO zunehmend erschwert [94].

Die gegenüber konventionellen Brennverfahren erhöhten HC-Emissionen rühren von unvollständiger Verbrennung her. Sie tritt analog zu CO in der Nähe der relativ kühlen Brennraumwände, im Quetschspalt und im Feuerstegbereich auf. Nachteilig wirkt sich hierbei das den homogenen Brennverfahren zugrunde liegende Prinzip der Homogenisierung aus, wodurch der Kraftstoffdampf auch diese Brennraumbereiche erfasst. Hinzu kommt die Möglichkeit, dass auch im Inneren des Brennraums lokal zu stark ausgemagerte Bereiche nicht bzw. nicht

vollständig am Verbrennungsprozess teilnehmen und ihrerseits zu einer Erhöhung der HC-Emissionen beitragen.

3.11 Numerische Simulation kinetischer Prozesse

Für die numerische Simulation von Verbrennungsprozessen müssen die entsprechenden kinetischen Abläufe in einer mathematischen Form bereitgestellt werden, die sowohl alle möglichen Spezies als auch die Reaktionen beschreibt, die während des Verbrennungsprozesses relevant sind. Vier verschiedene Ansätze sind bekannt:

- Phänomenologischer Mechanismus
 - Generalisierter Mechanismus
 - Reduzierter Mechanismus
 - Detaillierter Mechanismus
- 

In der Reihenfolge der Auflistung spiegelt sich die Erhöhung der Komplexität wie auch die Zunahme in der Rechenzeit wider.

Die einfachste Form zur Abbildung kinetischer Vorgänge stellen die phänomenologischen Mechanismen dar. Sie enthalten keine spezifischen kinetischen Informationen bzgl. einzelner Spezies oder Reaktionsgleichungen. Stattdessen wird das Gleichungssystem mit Hilfe einer gewissen Anzahl von Konstanten empirisch an das jeweilige Problem angepasst.

Auch der Generalisierte Mechanismus hat eine empirische Grundlage. Dort werden Spezies mit ähnlicher Zusammensetzung bzw. mit ähnlichen Eigenschaften in Gruppen zusammengefasst. Zwei sehr bekannte Vertreter dieser Art von Mechanismus zur Simulation von Zünd- und Verbrennungsmodellen sind das Schreiber-Modell [113] und das Shell-Modell [114]. Auch bei diesem Ansatz müssen die Konstanten auf Basis entsprechender experimenteller Daten angepasst werden. Damit liegt auch hier wie schon beim Einschritt-Mechanismus keine chemische Basis vor.

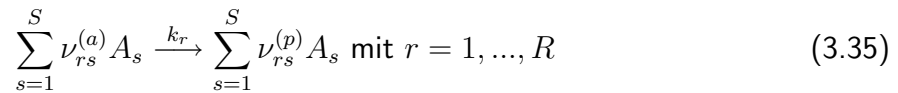
Dies ist dagegen bei den detaillierten Mechanismen der Fall. Hier wird versucht, eine möglichst realitätsnahe Abbildung der im Verbrennungsprozess auftretenden Spezies und der Reaktionen umzusetzen. Soweit möglich, werden die Konstanten für den Arrhenius-Ansatz zur Berechnung der Geschwindigkeitskoeffizienten der jeweiligen Reaktionsgleichungen mit Experimenten bestimmt oder numerisch abgeschätzt. Auf diese Weise entstehen Mechanismen, die zum Teil weit über tausend Spezies enthalten und mehrere tausend Reaktionsgleichungen für die Beschreibung der komplexen Kinetik benötigen. Detaillierte Mechanismen haben in den vergangenen Jahrzehnten einen großen Beitrag zum Verständnis von Verbrennungsprozessen geleistet. Sie haben allerdings gerade wegen ihres hohen Detaillierungsgrades den Nachteil sehr hoher Rechenzeiten. Deshalb sind sie selbst bei den heutzutage zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten mittel- bis langfristig nicht geeignet, um in 3D-Verbrennungsrechnungen eingesetzt zu werden.

Einen kurz- bis mittelfristig gangbaren Weg bieten in dieser Hinsicht die reduzierten Mechanismen. Ausgangsbasis sind wiederum detaillierte Mechanismen, die durch Sensitivitätsanalysen und Quasistationaritätsannahmen bez. einzelner Spezies und Reaktionsgleichungen vereinfacht werden. Es ist an dieser Stelle allerdings wichtig zu betonen, dass die Reduzierung eines detail-

lierten Mechanismus immer auch eine Einschränkung seines Anwendungsbereiches nach sich zieht.

3.12 Grundgleichungen der 0d-Kinetik-Simulation

Den Kern einer jeden Kinetik-Simulation bildet ein kinetischer Mechanismus. Er besteht aus einer definierten Anzahl von Spezies S . Die ebenso definierten Reaktionsgleichungen der Anzahl R bestimmen das Reaktionsverhalten eines aus den Spezies zusammengesetzten Gemisches und lassen sich mathematisch folgendermaßen beschreiben [2].



Dabei haben $\nu_{rs}^{(a)}$ und $\nu_{rs}^{(p)}$ die Bedeutung der stöchiometrischen Koeffizienten der Ausgangsstoffe (a) und Produkte (p), A_s ist der Platzhalter für den Namen der Spezies s . Der Parameter k_r steht für den Geschwindigkeitskoeffizienten der jeweiligen Reaktion r , der insbesondere die Temperaturabhängigkeit der jeweiligen Reaktion beschreibt und sich über den Arrhenius-Ansatz

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_A}{RT}} \quad (3.36)$$

bestimmt mit der Arrhenius-Konstanten A , der Aktivierungsenergie E_A , der allgemeinen Gaskonstante R und der Temperatur T . Die Reaktionsrate $\dot{\omega}_i$ einer Spezies i innerhalb eines Reaktionssystems mit R Reaktionsgleichungen ergibt sich dann zu

$$\dot{\omega}_i = \left(\frac{\delta c_i}{\delta t} \right) = \sum_{r=1}^R k_r \left(\nu_{ri}^{(p)} - \nu_{ri}^{(a)} \right) \prod_{s=1}^S c_s^{\nu_{rs}^{(a)}} \quad \text{mit } i = 1, \dots, S \quad (3.37)$$

mit c als molarer Konzentration. Diese Reaktionsraten werden nun dazu verwendet, die Spezies in einem Reaktionssystem in Form einer Spezieserhaltungsgleichung zu bilanzieren.

Im einfachsten Fall wird ein Reaktionssystem als 0-dimensional angenommen und durch einen sogenannten homogenen Reaktor abgebildet. Wegen seiner 0-Dimensionalität - und damit fehlender räumlicher Informationen - können bei der Modellbildung weder Konvektions- noch Diffusionseffekte berücksichtigt werden. Außerdem treten keine Druckkräfte auf, weshalb keine Impulsgleichung zur Beschreibung eines homogenen Reaktors benötigt wird. Es sind nur die Spezieserhaltungsgleichungen und die Energieerhaltungsgleichung notwendig.

In integraler Form sieht die Spezieserhaltungsgleichung der Spezies i auf Basis des Massenbruches y_i wie folgt aus

$$\int_V \rho \frac{\partial y_i}{\partial t} dV = \int_V \dot{\omega}_i M_i dV \quad (3.38)$$

mit einem Reaktionsterm auf der rechten Seite. Mit M_i ist die molare Masse bezeichnet, während dV das Integrationsvolumen symbolisiert. Eine Aufsummation der einzelnen Spezieserhaltungsgleichungen ergibt folgerichtig die Erhaltungsgleichung für die Gesamtmasse.

$$\int_V \frac{\partial \rho}{\partial t} dV = 0 \quad (3.39)$$

Die Energieerhaltungsgleichung kann sowohl basierend auf der spezifischen inneren Energie u als auch basierend auf der spezifischen Enthalpie h formuliert werden.

$$\int_V \rho c_v \frac{\partial T}{\partial t} dV = - \int_V \sum_{i=1}^S \dot{\omega}_i M_i u_i dV + \int_V \frac{p}{V} \frac{\partial V}{\partial t} dV + \int_V \frac{\dot{Q}}{V} dV \quad (3.40)$$

$$\int_V \rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} dV = - \int_V \sum_{i=1}^S \dot{\omega}_i M_i h_i dV + \int_V \frac{\partial p}{\partial t} dV + \int_V \frac{\dot{Q}}{V} dV \quad (3.41)$$

Der erste Term der rechten Seite entspricht jeweils dem Reaktionsterm von Gleichung 3.38 ergänzt um die spezifische innere Energie bzw. spezifische Enthalpie. Die Volumenänderungsarbeit wird durch den zweiten Term beschrieben. Der jeweils letzte Term auf der rechten Seite stellt einen beliebigen Energiequell- bzw. Senkenterm dar (z.B. Wandwärmeübergang). Für motorische Berechnungsfälle ist der Version basierend auf der inneren Energie der Vorzug zu geben, da die zeitliche Volumenentwicklung eines Motors a priori bekannt ist, und deshalb die Volumenänderung $\frac{\partial V}{\partial t}$ im Term der Volumenänderungsarbeit sehr leicht berechnet werden kann.

Die Schließung des Gesamtsystems erfolgt dann mit der Berechnung der Dichte mit Hilfe der idealen Gasgleichung

$$\rho = \frac{p \bar{M}}{\Re T} \quad (3.42)$$

mit der universellen Gaskonstante \Re und \bar{M} als der mittleren molaren Masse des Gemischs.

3.13 Ersatzkraftstoffe für die Simulation von Diesel- und Ottokraftstoffen

Bei der Simulation von otto- bzw. dieselmotorischen Kraftstoffen steht man automatisch vor dem Problem der komplexen realen Zusammensetzung dieser Kraftstoffe. Sie bestehen aus einer Vielzahl von einzelnen Spezies. Dazu gehören insbesondere Alkane und Alkene mit einer großen Bandbreite in der Anzahl der C-Atome, wie auch diverse Aromate (Benzol, Toluol, Xylen, etc.). Hinzu kommt noch die Tatsache, dass sich die Zusammensetzungen je nach Herkunftsland des Rohöls merklich unterscheiden können. Ein weiterer Faktor sind unterschiedliche Vorgehensweisen bei der Raffination, die ebenfalls zu Abweichungen in der Zusammensetzung von Kraftstoffen führen können. Bei der Simulation dieser beiden Kraftstofftypen steht man vor zwei Problemen: Zum einen bereiten die Schwankungen in der Zusammensetzung der Kraftstoffe Schwierigkeiten, zum anderen liegen keine detaillierten Mechanismen vor, welche die Vielzahl von Ausgangsspezies beinhalten. Die Simulation eines Kraftstoffes mit realer Zusammensetzung ist deshalb nicht möglich. Aus diesem Grund werden Ersatzkraftstoffe mit einfacherer Zusammensetzung gesucht, die möglichst viele charakteristische Eigenschaften (z.B. Cetan-Zahl (Dieselkraftstoff), Oktan-Zahl (Ottokraftstoff), C-H-Verhältnis, Aromatenanteil, Heizwert, Dichte, Viskosität, etc.) mit dem Kraftstoff gemeinsam haben, den sie repräsentieren sollen.

Bei der Verbrennungssimulation von Dieselkraftstoff hat es sich etabliert, n-Heptan als

Ersatzkraftstoff zu verwenden, wobei beide Kraftstoffe eine sehr ähnliche Cetan-Zahl besitzen und damit auch ein vergleichbares Zündverhalten aufweisen. Für n-Heptan liegen eine Vielzahl von Messungen vor [129, 130], die damit eine gute Basis für die Validierung entsprechender kinetischer Mechanismen bieten. Eine nochmals gesteigerte Abbildungsqualität der Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung von Diesekraftstoff wird durch eine Mischung von 70 Vol-% n-Dekan und 30 Vol-% α -Methylnaphtalin erzielt, welche auch unter dem Namen IDEA¹-Kraftstoff [107] bekannt ist. Dieser Modellkraftstoff ist im Rahmen eines EU-Projekts vorgeschlagen worden und weist - genauso wie n-Heptan - eine dem Diesekraftstoff sehr ähnliche Cetan-Zahl von 56 (Diesekraftstoff: ungefähr 53) auf. Allerdings stellt sich bei IDEA-Kraftstoff das Problem einer sehr geringen Anzahl von Messungen (z.B. [131]), die mit dieser Mischung durchgeführt worden sind und damit nur eine schwache Validierungsbasis gegeben ist.

Ottokraftstoff wird im einfachsten Fall mit iso-Oktan abgebildet. Um den Einfluss der unterschiedlichen Oktan-Zahlen zu berücksichtigen, können auch entsprechende Anteile an n-Heptan beigefügt werden [129].

Eine sehr ausführliche Beschreibung der Reaktionskinetik speziell für n-Heptan bzw. iso-Oktan findet sich in [6] bzw. [7].

3.14 Validierungsmöglichkeiten von kinetischen Mechanismen

Als Messungen für die Validierung von kinetischen Mechanismen werden typischerweise Stoßrohrmessungen [129] und seltener auch Messungen mit Rapid-Compression-Machines herangezogen. Diese beiden Versuchsanordnungen haben z.B. gegenüber einem Verbrennungsmotor den entscheidenden Vorteil, dass verfälschende bzw. schwer messbare Einflüsse (Turbulenz, Gemischinhomogenitäten, Temperaturinhomogenitäten, etc.) durch einen vergleichsweise einfachen Versuchsaufbau und durch eine relativ genaue Vorkonditionierung des Gemischs und des thermodynamischen Gemischzustands nahezu vollständig eliminiert werden können. Eine Validierung eines Mechanismus allein auf der Basis von Motorversuchen ist nicht ratsam. Dagegen spricht einerseits der komplexe Versuchsaufbau, andererseits die Unwägbarkeit des Zusammenspiels der einzelnen Phänomene (Turbulenz, Einspritzung, Verdampfung, Verbrennung, etc.) für die Gesamtsimulation der Prozesse im Motor.

Stoßrohrmessungen werden in der Regel durch isobare oder isochore Rechnungen simuliert. Diese Rechnungen haben damit 0-dimensionalen Charakter. Nur bei sehr detaillierten Nachrechnungen wird auch der Einfluss der Stoßwellen auf die Zündung und Verbrennung mit berücksichtigt. Für die Validierung der Mechanismen wird meist analog zu Abbildung 3.2 die Zündverzugszeit logarithmisch über dem mit 1000 multiplizierten Kehrwert der Starttemperatur aufgetragen. Auswertekriterium für die Zündverzugszeit ist entweder der maximale Druck- oder der maximale Temperaturgradient über den Verlauf des Versuchs bzw. der Simulation hinweg. Für die zusätzliche Bewertung der Güte der Cool-Flame-Zündverzugszeit muss auch diese spezielle Zündverzugszeit durch ein entsprechendes lokales Gradientenkriterium ermittelt werden. Für einen Vergleich der freigesetzten Energiemenge während

¹engl.: Integrated Diesel European Action

der Cool-Flame-Verbrennung müsste über der Zeit der Druck- oder der Temperaturverlauf miteinander verglichen werden. Diese Art der Validierung von Mechanismen auf Basis von Stoßrohrexperimenten wird in der Literatur jedoch praktisch nicht verwendet.

Zur Nachrechnung von Messungen mit einer Rapid-Compression-Machine muss als Randbedingung der Volumenverlauf vorgegeben werden, um die Kompressionsphase korrekt abbilden zu können. Hier wird üblicherweise auch der Wandwärmeübergang mitberücksichtigt. Für die Validierung werden über der Zeit die Druck- bzw. die Temperaturverläufe aus der Messung mit denen der Simulation verglichen.

Kapitel 4

Reaktorbasierte Simulation homogener Brennverfahren

Alle in diesem Kapitel beschriebenen Modelle haben den gemeinsamen Vorteil, dass der Reaktionsquellterm keiner Modellierung bedarf, da er in geschlossener Form vorliegt. Des Weiteren basieren alle Modelle auf detaillierter Chemie. Die Reaktionsraten liefert dabei in Abhängigkeit von der Gemischzusammensetzung, des Druckes und der Temperatur ein geeigneter kinetischer Mechanismus. Diese Modelle erfreuen sich auch deshalb großer Beliebtheit, weil sie in sehr unterschiedlichen Komplexitätsgraden mit entsprechenden Unterschieden im Rechenaufwand verfügbar sind. Der einfachste Ansatz ist ein homogener Reaktor, in dem - wie der Name schon sagt - eine homogene Gemisch- und Temperaturverteilung angenommen wird. Dabei handelt es sich um einen 0-dimensionalen Ansatz. Einen gesteigerten Detaillierungsgrad weisen Mehrzonen-Modelle und das stochastische Reaktormodell auf. In beiden Modellen wird eine Gemischverteilung im Brennraum berücksichtigt. Sie sind jedoch als quasi-0-dimensional anzusehen, da nur nach der Zeit, nicht jedoch nach dem Ort bilanziert wird. Der derzeit detaillierteste Ansatz für turbulente kinetische Strömungen ist der Transported-PDF-Ansatz. Hier werden 3-dimensional (und damit lokal) alle physikalischen Effekte erfasst.

In Bezug auf die Simulation von homogenen Brennverfahren wurde und wird der homogene Reaktor häufig angewendet, da die erhoffte Gemisch-Homogenität des jeweiligen Brennverfahrens die Anwendung von homogenen Reaktoren zu rechtfertigen scheint. Verlockend sind in diesem Zusammenhang insbesondere die kurzen Rechenzeiten. Dabei darf allerdings nicht vergessen werden, dass weder die ideale Gemisch- noch die ideale Temperatur-Homogenität in einem Verbrennungsmotor erreicht werden kann. Gemischinhomogenitäten ergeben sich insbesondere bei direkter Einspritzung mit verkürztem Zeitfenster (zwischen Gemischeinbringung und Kompressionsende), aber auch bei der Saugrohreinspritzung reicht die Zeit für eine vollständige Gemischhomogenisierung nicht aus. Und selbst bei einer ausgeprägten Homogenisierung des Gemischs verbleiben immer Inhomogenitäten der Temperatur im Brennraum, welche durch die kalten Brennraumwände induziert werden. Auf Basis dieser Tatsache muss der Anwender eines Modells sich darüber im Klaren sein, welche Modellierungsanforderungen das zu simulierende Brennverfahren benötigt bzw. muss er abschätzen können, welche Fehler er mit einem eventuell zu einfachen Modell macht.

Die folgenden Abschnitte geben einen Überblick über die bekannten und gängigen 0d- und 3d-Modelle mit geschlossenem Reaktionsquellterm. Die Grundgleichungen und die physikalischen Grenzen der Modelle werden aufgezeigt. Das Kapitel schließt mit der Vorstellung eines neu-

ein Ansatzes, welcher einen Kompromiss aus physikalischer Komplexität und Rechenaufwand darstellt und damit auch für industrielle Anwendungen applizierbar ist.

4.1 0d-Modelle

Kinetik-Simulationen auf 0-dimensionaler Basis können in verschiedenen Detaillierungsgraden erfolgen. Im Wesentlichen lassen sich die verschiedenen Modelle in steigender Komplexität in Einzonen-Modell (homogener Reaktor), Mehrzonen-Modell und Stochastischer Reaktor einteilen. Auch die beiden letztgenannten Reaktorarten sind, obwohl sie mit einem System von homogenen Reaktoren beschrieben werden, als 0-dimensional anzusehen. Diese Reaktorsysteme stellen damit eine rein statistische Auflösung des Brennraums dar. In Abbildung 4.1 sind diese drei grundlegenden 0d-Modellierungsansätze skizziert. Sie werden nun von ihrer prinzipiellen Funktionsweise in Bezug auf den motorischen Anwendungsfall beschrieben. Eine detaillierte Analyse der Stärken und Schwächen dieser Modelle wird im sich anschließenden Unterkapitel 4.3 durchgeführt.

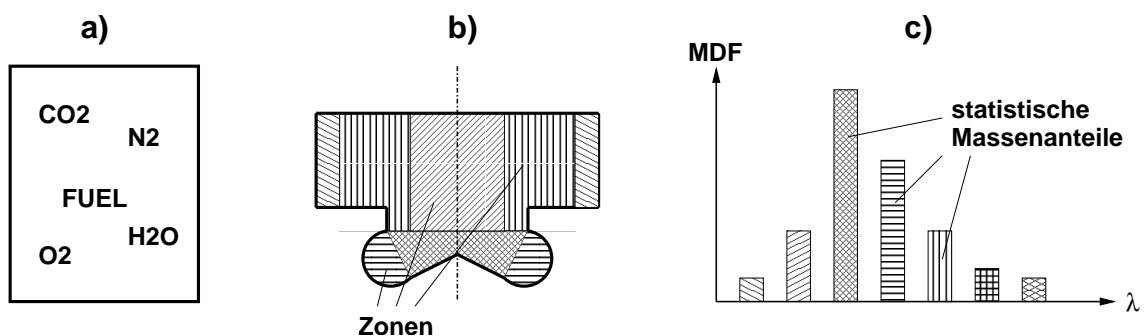


Abbildung 4.1: Schematische Darstellungen: a) Einzonen-Modell (Homogener Reaktor), b) Mehrzonen-Modell, c) Stochastischer Reaktor (mit: MDF=Massendichtefunktion, λ =Luftverhältnis).

4.1.1 Einzonen-Modell - Homogener Reaktor (HR)

Die simpelste Form der Kinetik-Modellierung einer motorischen Verbrennung stellt das Einzonen-Modell bzw. der homogene Reaktor dar (Abbildung 4.1 a). Der Reaktor wird in der Regel in kompressibler Form abgebildet, das heißt, sein Volumen ändert sich in Abhängigkeit der Kolbenbewegung bzw. des Brennraumvolumens. Der globale Wandwärmeübergang kann mit sehr geringem Aufwand durch Beaufschlagung der Energiegleichung 3.40 bzw. 3.41 mit einem entsprechenden Quellterm \dot{Q} in das Modell implementiert werden. Wegen der fehlenden räumlichen Auflösung beim homogenen Reaktor ist die Behandlung des Wandwärmeübergangs jedoch bedenklich.

4.1.2 Mehrzonen-Modell

Bei Mehrzonen-Modellen (Abbildung 4.1 b) wird der Brennraum in eine gewisse Anzahl von Zonen bzw. von homogenen Reaktoren unterteilt. Es ist hilfreich, bei der Beschreibung von Mehrzonen-Modellen zwischen entkoppelten und gekoppelten Modellen zu unterscheiden. Beide Varianten werden im Folgenden beschrieben.

Entkoppelte Mehrzonen-Modelle

Die klassischen Mehrzonen-Modelle fallen unter die Rubrik der entkoppelten Mehrzonen-Modelle. Charakteristisch für diese Gruppe der Mehrzonen-Modelle ist eine einmalige Initialisierung der Reaktoren zu einem definierten Zeitpunkt. Die Initialisierung der Reaktoren bez. Masse, Temperatur und Gemischzusammensetzung erfolgt dabei häufig auf halbempirische Weise z.B. unter Verwendung von 1d-Ladungswechselrechnungen oder geeigneten Versuchsergebnissen. Fundiertere Initialisierungen werden auf Basis von 3d-CFD-Gemischbildungsrechnungen durchgeführt. Grundlage dafür ist die makroskopische, konvektive Gemischverteilung im Brennraum, welche sich zum Initialisierungszeitpunkt aus der 3d-CFD-Simulation ergibt. Nach erfolgter Initialisierung entwickelt sich die Kinetik-Simulation dann unabhängig bzw. entkoppelt von der 3d-CFD-Simulation weiter. Die Wahl bzw. die Vorgabe des Initialisierungszeitpunktes muss jedoch als kritisch angesehen werden, da eine Abhängigkeit des Simulationsergebnisses vom thermo-chemischen Anfangszustand der Mehrzonen-Simulation möglich ist.

In der Regel wird bei entkoppelten Mehrzonen-Modellen als einzige Form der Interaktion zwischen den homogenen Reaktoren die Volumenänderungsarbeit berücksichtigt. Diffusion oder turbulente Mischungseffekte werden von diesen Modellen nicht erfasst. Durch eine Zuordnung der einzelnen Zonen in diverse Brennraumbereiche können sie individuell mit einem entsprechenden Anteil des Wandwärmeübergangs beaufschlagt werden, der zusätzlich auch von der Masse und der Temperatur des jeweiligen homogenen Reaktors abhängen kann. Auch die Wärmeleitung kann in solch einem Modell erfasst werden, wird aber in der Regel nicht modelliert. Beispiele für entkoppelte Mehrzonen-Modelle sind durch Ogink [40] und Easley et al [41] (halbempirische Initialisierung) und durch Aceves et al [42] (Initialisierung auf Basis 3d-CFD) gegeben.

Gekoppeltes Mehrzonen-Modell

Zu den aktuellen Entwicklungen auf dem Gebiet der Mehrzonen-Modelle gehört das gekoppelte Mehrzonen-Modell von Babajimopoulos et al [43, 44]. Es unterscheidet sich in der Weise von den entkoppelten Mehrzonen-Modellen, dass es sich in ständiger Interaktion mit einer parallel ablaufenden CFD-Rechnung befindet. Dazu werden in jedem Zeitschritt die CFD-Zellen bez. der zwei Dimensionen Temperatur und Gemischzusammensetzung gruppiert und einer entsprechenden 2-dimensionalen Zonen-Matrix zugeordnet. Nach kinetischer Berechnung der einzelnen Zonen wird die Energiefreisetzung und die Speziesumsetzung auf Basis spezieller Algorithmen in die CFD-Zellen zurückgekoppelt. Damit besitzt das gekoppelte Mehrzonen-Modell gegenüber den entkoppelten Mehrzonen-Modellen zwei wesentliche Vorteile: Zum einen entfällt die aus kinetischer Sicht fehlerträchtige Festlegung eines einmaligen Initialisierungszeitpunktes, zum anderen werden Konvektion und Diffusion implizit im CFD-Code berücksichtigt.

4.1.3 Stochastischer Reaktor (SR)

Der einzige 0-dimensionale kinetische Modell-Ansatz, der den Turbulenzeinfluss berücksichtigt, ist der stochastische Reaktor (Abbildung 4.1 c)). Dieser setzt sich, wie das Mehrzonen-Modell auch, aus einer gewissen Anzahl von homogenen Reaktoren zusammen. Allerdings besitzen diese keine räumliche Zuordnung zueinander, da sie in statistischer Form eine turbulente und damit eine mikroskalige Gemischverteilung abbilden. Für eine mathematische Beschreibung dieser Statistik bietet sich die Einführung einer sogenannten Massendichtefunktion \mathcal{M} (engl.: Mass Density Function (MDF)) an. Die daraus resultierende Gemischverteilung ist in Abbildung 4.1 c) durch die Balken angedeutet. Weitere mathematische Eigenschaften der Massendichtefunktion \mathcal{M} werden in detaillierterer Form in Abschnitt 4.2 beschrieben.

Für die mathematische Beschreibung des stochastischen Reaktors [46, 47, 48] werden zunächst globale und reaktorbezogene Größen festgelegt. Zu den globalen Größen zählen die Gesamtmasse m , das Gesamtvolumen V und insbesondere der Brennraumdruck p . Als reaktorbezogene Größen werden dagegen die Speziesmassenbrüche y_i mit $i = 1 \dots N_s$ (N_s : Anzahl der Spezies) und die Temperatur T definiert, mit deren Hilfe die statistische Gemischverteilung im Gesamtsystem abgebildet wird. Die Speziesmassenbrüche und die Temperatur werden im Rahmen des mathematischen Modells als Zufallsvariablen angesehen und folgendermaßen als Vektor definiert:

$$\underline{\Phi} = (\Phi_1, \dots, \Phi_{N_s+1}) = (y_1, y_2, \dots, y_{N_s}, T) \quad (4.1)$$

Die Massendichtefunktion \mathcal{M} erhält somit die Form $\mathcal{M}_{\underline{\Phi}} = (\Psi_1, \dots, \Psi_{N_s+1}; t)$, wobei die zeitliche Entwicklung durch folgende Bilanzgleichung beschrieben wird:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathcal{M}_{\underline{\Phi}}(\underline{\Psi}; t) + \frac{\partial}{\partial \Psi_i} (Q_i(\underline{\Psi}) \mathcal{M}_{\underline{\Phi}}(\underline{\Psi}; t)) = \frac{\partial}{\partial \Psi_i} \left(\frac{1}{2} \frac{C_{\Phi}}{\tau_{turb}} (\Psi_i - \langle \Phi_i \rangle) \mathcal{M}_{\underline{\Phi}}(\underline{\Psi}; t) \right) \quad (4.2)$$

Der Term Q_i auf der linken Seite beschreibt die Änderung von \mathcal{M} durch chemische Reaktion, Wandwärmeübergang und Volumenänderung und stellt sich mathematisch wie folgt dar [46, 47, 48]:

$$Q_i = \frac{M_i}{\rho} \sum_{j=1}^R \nu_{i,j} \dot{\omega}_j \quad i = 1, \dots, N_s \quad (4.3)$$

$$Q_{N_s+1} = \frac{1}{c_v} \sum_{i=1}^{N_s} (u_i) \frac{M_i}{\rho} \sum_{j=1}^R \nu_{i,j} \dot{\omega}_j + \alpha A (T - T_{wall}) + p \frac{1}{c_v} \frac{dV}{dt} \quad (4.4)$$

Der Wandwärmeübergang wird dabei mit dem Wandwärmeübergangskoeffizienten α , der Fläche A und der Wandtemperatur T_{wall} modelliert. Die Änderung der Massendichtefunktion \mathcal{M} durch turbulente Mischung erfolgt in Gleichung 4.2 durch den Term auf der rechten Seite. In diesem speziellen Fall ist das IEM-Modell (siehe Abschnitt 4.2.1) als einfachstes turbulentes Mischungsmodell formuliert mit einer Mischung hin zum Mittelwert $\langle \Phi_i \rangle$ des Systems. C_{Φ} ist eine Modellkonstante und τ_{turb} ist ein charakteristisches turbulentes Zeitmaß. Die Ermittlung dieses Zeitmaßes sowie die Beschreibung weiterer gängiger Mischungsmodelle finden sich in

Abschnitt 4.2.1.

Für eine detaillierte mathematische Beschreibung der Modellierung und der numerischen Umsetzung von stochastischen Reaktoren wird auf Kraft [45] verwiesen. Hinsichtlich motorischer Anwendungen wird das Modell z.B. in Maigaard et al [46], Soyan et al [47] und Montorsi et al [48] beschrieben und appliziert.

4.2 3d-Modell: Transported-PDF-Ansatz

Den vollständigsten und detailliertesten Ansatz zur Beschreibung turbulenter, reaktiver Strömungen stellt der Transported-PDF-Ansatz dar. Kern dieses Ansatzes ist die Verwendung einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion PDF (engl.: Probability Density Function). Sie dient dazu, die Statistik eines turbulenten Verbrennungsvorgangs wiederzugeben.

Ausgangsbasis für eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist die Verteilungsfunktion $F(u, \phi; x, t)$. Sie gibt die Wahrscheinlichkeit P für das Auftreten eines bestimmten turbulenten Zustandes im Strömungsfeld am Ort $x = (x_1, x_2, x_3)^T$ und zum Zeitpunkt t an. Dabei werden durch u die 3 Geschwindigkeitskomponenten und mit ϕ die Skalare repräsentiert. Zu den Skalaren zählen analog zum stochastischen Reaktor (siehe Abschnitt 4.1.3) die Massenbrüche y_i ($i = 1, \dots, N_s$) und die Temperatur T (bzw. die Enthalpie h) der verwendeten Spezies der Anzahl N_s .

$$u = (u_1, u_2, u_3)^T \quad (4.5)$$

$$\phi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_{N_s+1})^T = (y_1, y_2, \dots, y_{N_s}, T)^T \quad (4.6)$$

Folglich wird durch den Ausdruck $F(U, \Psi; x, t)$ die Wahrscheinlichkeit P für das Auftreten der Realisierungen $u < U$ und $\phi < \Psi$ angegeben. U und Ψ können Werte aus dem gesamten Wertebereich von u und ϕ annehmen. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(U, \Psi; x, t)$ ergibt sich schließlich durch Ableitung der Verteilungsfunktion $F(U, \Psi; x, t)$:

$$f(U, \Psi; x, t) = \frac{\partial F(U, \Psi; x, t)}{\partial U \partial \Psi} \quad (4.7)$$

In dem hier dargestellten Fall bezieht sich die Wahrscheinlichkeitsdichte auf die beiden unabhängigen Variablen u und ϕ . Nach einer Konvention von Pope [49] werden sie formal durch ein Semikolon von den abhängigen Variablen getrennt.

Die Wahrscheinlichkeit, mit der zum Zeitpunkt t an der Stelle x das Ereignis $U < u < U + dU$ und $\Psi < \phi < \Psi + d\Psi$ eintritt, wird durch den Ausdruck

$$f(U, \Psi; x, t) \partial U \partial \Psi \quad (4.8)$$

beschrieben. Als fundamentale Eigenschaft von $f(U, \Psi; x, t)$ ergibt sich nach [49] für das sichere Ereignis $-\infty \leq u < \infty$ und $-\infty \leq \phi < \infty$ der Zusammenhang:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(U, \Psi; x, t) dU d\Psi = 1 \quad (4.9)$$

Der Erwartungswert, und damit das erste Moment einer Größe $Q(x, t)$, lässt sich berechnen, indem über alle möglichen Ereignisse im Zustandsraum - gewichtet mit ihrer Wahrscheinlichkeit - integriert wird.

$$\langle Q(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(U, \Psi) f(U, \Psi; x, t) dU d\Psi \quad (4.10)$$

Entsprechend können die höheren Momente ($n > 1$) bestimmt werden:

$$\langle Q(x, t)^n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} Q(U, \Psi)^n f(U, \Psi; x, t) dU d\Psi \quad (4.11)$$

Eine Sonderstellung nimmt dabei die Berechnung des turbulenten, chemischen Quellterms einer beliebigen Spezies α ein, der nur von der Spezieszusammensetzung und der Temperatur, nicht jedoch von den lokal vorliegenden Geschwindigkeiten abhängt. Deshalb vereinfacht sich seine Berechnung zu

$$\langle S_\alpha(x, t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} S_\alpha(\Psi) f(\Psi; x, t) d\Psi \quad (4.12)$$

wobei der Term $f(\Psi; x, t)$ gemäß

$$f(\Psi; x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} f(U, \Psi; x, t) dU \quad (4.13)$$

ermittelt wird. Um aus strömungsmechanischer und reaktionskinetischer Sicht eine Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(u, \phi; x, t)$ umzusetzen, muss eine geeignete Transportgleichung definiert werden. Grundlegende Arbeiten hierzu liegen von Lundgren [51] und Pope [49] vor. Für eine ausführliche Herleitung wird deshalb auf diese Abhandlungen verwiesen. Hält man sich an die formale Darstellung der pdf-Transportgleichung von Pope [49], so hat sie folgendes Aussehen:

$$\underbrace{\rho(\Psi) \frac{\partial f}{\partial t}}_I + \underbrace{\rho(\Psi) U_j \frac{\partial f}{\partial x_j}}_{II} + \underbrace{\left(\rho(\Psi) g_j - \frac{\partial \langle p \rangle}{\partial x_j} \right) \frac{\partial f}{\partial U_j}}_{III} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} [\rho(\Psi) S_\alpha(\Psi) f]}_{IV} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial U_j} \left[\left\langle -\frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \frac{\partial p'}{\partial x_j} \middle| U, \Psi \right\rangle f \right]}_V + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \Psi_\alpha} \left[\left\langle \frac{\partial J_i^\alpha}{\partial x_i} \middle| U, \Psi \right\rangle f \right]}_{VI} \quad (4.14)$$

Dabei ist p der Druck, p' die Druckfluktuation, g_j die Erdbeschleunigung und J_i^α ein Term, in dem (Diffusion und Wärmeleitung) berücksichtigt sind. Die Terme I bis VI haben für die Transportgleichung folgende Bedeutung:

- I: zeitliche Änderung
- II: Konvektion

III: Beschleunigung durch Schwerkraft und mittleren Druck

IV: chemische Reaktion

V: viskose Kräfte und Druckfluktuationen

VI: molekulare Diffusion, turbulente Diffusion und Wärmeleitung

Die Terme der linken Seite (I bis IV) der PDF-Transportgleichung sind sogenannte Einpunktprozesse und liegen in geschlossener Form vor. Besonders bemerkenswert ist in diesem Zusammenhang der Term für die chemische Reaktion, der im Gegensatz zu den meisten anderen turbulenten Verbrennungsmodellen keiner Modellierung bedarf, was auch den entscheidenden Vorteil der PDF-Transportgleichung hinsichtlich turbulenter reaktiver Strömungen darstellt. Dagegen stellen die beiden Terme (V und VI) der rechten Seite Zweipunktprozesse mit bedingten Wahrscheinlichkeiten dar. Die zur Abbildung der Zweipunktprozesse benötigten Gradienten werden nicht implizit von der PDF beschrieben und müssen folglich modelliert werden. Dazu wird im Falle des Terms V für die viskosen Kräfte und Druckfluktuationen im Geschwindigkeitsraum in der Regel das Langevin-Modell [49] verwendet. Eine besondere Herausforderung ergibt sich mit der Modellierung der molekularen und turbulenten Diffusion, die im letzten Term der PDF-Transportgleichung enthalten sind. Da der turbulente Diffusionsanteil bei turbulenten Verbrennungsvorgängen überwiegt, wird oft nur dieser Diffusionseffekt modelliert. Hierzu werden sogenannte turbulente Mischungsmodelle verwendet. Die gängigsten Modelle dieser Art werden im nächsten Unterkapitel kurz vorgestellt.

Die Violdimensionalität der PDF-Transportgleichung, die insbesondere von der Anzahl der verwendeten Spezies abhängig ist, macht auch bei kleineren kinetischen Systemen eine numerische Beschreibung mittels klassischer Verfahren wie Finite-Volumen- oder Finite-Differenzen-Verfahren mit den heute zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten nahezu unmöglich. Pope [52, 49] hat für eine numerische Umsetzung deshalb das Monte-Carlo-Verfahren vorgeschlagen. Dabei wird die Realisierung bzw. Diskretisierung des strömungsmechanischen und thermochemischen Zustands mittels stochastischer Partikel vorgenommen. Jedes dieser Partikel kennt deshalb neben seiner räumlichen Position und Geschwindigkeit auch die aktuelle Gemischzusammensetzung und die Temperatur. Der Vorteil des Monte-Carlo-Verfahrens liegt im linearen Verhalten seines Berechnungsaufwandes mit der Erhöhung der Dimensionalität der PDF-Transportgleichung. Nachteilig wirkt sich lediglich die hohe Partikelzahl aus, die für die Konvergenz benötigt wird.

Für die numerische Umsetzung dieser Transportgleichung mit Hilfe des Monte-Carlo-Verfahrens wird in geeigneter Weise eine Massendichtefunktion (MDF) \mathcal{M} anstelle der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion f eingeführt, da mit dem Monte-Carlo-Verfahren im Prinzip eine Massenverteilung abgebildet wird. Die Massendichtefunktion \mathcal{M} ergibt sich aus der Multiplikation der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion mit der Dichte ρ

$$\mathcal{M}(U, \Psi, x; t) = \rho f(U, \Psi; x, t) \quad (4.15)$$

Die fundamentalen Eigenschaften der Massendichtefunktion \mathcal{M} lassen sich durch

$$\langle \rho \rangle = \int \mathcal{M}(U, \Psi, x; t) dU d\Psi \quad (4.16)$$

$$M = \int \mathcal{M}(U, \Psi, x; t) dU d\Psi dx \quad (4.17)$$

mit $\langle \rho \rangle$ als mittlerer Dichte und M als Masse des Systems beschreiben. Die numerische Approximation \mathcal{M}_N der Massendichtefunktion \mathcal{M} des jeweiligen Problems erfolgt dann in Form von δ -Funktionen

$$\mathcal{M}_N = m_p \sum_{n=1}^{N_p} \delta(u - U^{(n)}) \delta(\phi - \Psi^{(n)}) \delta(x - x^{(n)}) \quad (4.18)$$

mit der üblicherweise einheitlichen Partikelmasse m_p . Sie berechnet sich auf einfache Weise aus der Gesamtanzahl der Partikel N_p und der Systemmasse M :

$$m_p = \frac{M}{N_p} \quad (4.19)$$

Großer Beliebtheit bezüglich der Simulation der PDF-Transportgleichung erfreuen sich hybride Berechnungsverfahren. Auf Basis der Standard Navier-Stokes-Gleichungen liefern dabei konventionelle CFD-Codes das jeweils gemittelte Turbulenz- und Geschwindigkeitsfeld sowie den gemittelten Druck. Auf Partikelebene hingegen wird die Chemie und die Massendichtefunktion abgebildet. Da das charakteristische turbulente Zeitmaß, welches für die Mischungsmodelle (siehe folgenden Abschnitt) verwendet wird, nicht aus den Partikeleigenschaften abgeleitet werden kann, wird diese Information extern über die Turbulenzberechnung des CFD-Codes beschafft. Die Kopplung der beiden Berechnungssysteme erfolgt dabei in iterativer Weise über die Dichte. Als weitere Eigenschaft, welche das Strömungsfeld beeinflusst, wird die molekulare Viskosität an den CFD-Code übergeben. Für eine mit dem CFD-Code konsistente Abbildung der Massendichtefunktion muss gewährleistet sein, dass die aufsummierten Partikelmassen innerhalb einer CFD-Zelle bezogen auf das Zellvolumen der Zelldichte des CFD-Codes entsprechen. Diesbezüglich notwendige Korrekturen können auf Partikelebene z.B. durch Verschieben eines Partikels in eine Nachbarzelle umgesetzt werden.

Auch die Behandlung der Randbedingungen weist Besonderheiten auf. Im Falle einer Auslassrandbedingung werden die Partikel einfach aus dem Ensemble entfernt. Hingegen erfolgt bei einer Einlassrandbedingung eine ständige Reinitialisierung der Partikel im relevanten Zellbereich, um die Massendichtefunktion korrekt abbilden zu können. An Wänden werden die Partikel reflektiert.

Bei den hybriden Verfahren macht man sich auch die CFD-seitige, räumliche Strukturierung in Form von Zellen zunutze. So werden entsprechende Mittelwerte aus dem CFD-Code denjenigen Partikeln zugeordnet, die sich in der entsprechenden Zelle befinden. Für die Modellierung der turbulenten Mischung werden wiederum nur Interaktionen zwischen Partikeln zugelassen, die sich in der gleichen Zelle befinden.

Für heute übliche Netzauflösungen wird als unterer Richtwert eine Partikelzahl von 100 je CFD-Zelle verwendet [56, 57, 58], um eine adäquate Auflösung des Problems zu erzielen. Grund für diesen hohen Wert ist der statistische Fehler des Monte-Carlo-Verfahrens, der nur mit $1/\sqrt{N_p}$ abnimmt [56]. Für die Minimierung des statistischen Fehlers ist folglich eine hohe Gesamtpartikelzahl erforderlich.

Auch wenn die numerische Umsetzung des Monte-Carlo-Verfahrens auf Lagrange'scher Basis mittels Partikel sich als sehr eingängig erweist, soll an dieser Stelle nicht unerwähnt bleiben, dass auch die Eulersche Umsetzung der PDF-Transportgleichung eine ernstzunehmende Alternative darstellt [50].

In den letzten Jahren wurden viele umfangreiche Arbeiten in Bezug auf die Simulation von

stationären Verbrennungsvorgängen (z.B. Brennerflammen) mittels des Transported-PDF-Ansatzes [53, 54, 55, 56, 50] durchgeführt. Diese Verbrennungstypen haben den Vorteil, dass sie häufig 2-dimensional und aufgrund der oft niedermolekularen Kohlenwasserstoffe mit handhabbaren kinetischen Mechanismen berechnet werden können. Eine komplexere 3-dimensionale Simulation eines 2-Takt-Verbrennungsmotors wurde z.B. von Taut [57] vorgestellt. Er verwendete n-Heptan als Modell-Kraftstoff und ging von einem vorgemischten Luft-Kraftstoff-Gemisch aus. Zum gegenwärtigen Stand der Forschung gehören 2-phasige, reaktive Strömungen (Zhu et al. [60], Liu et al. [61] (inert)). Dazu wird eine gebundene PDF-Transportgleichung abgeleitet, in der die Tropfeneigenschaften inklusive des Verdampfungsprozesses mit der Gasphase korreliert werden. Besondere Bedeutung kommt dabei der Behandlung der turbulenten Dispersion der Tropfen im Strömungsfeld zu. Dieser physikalische Effekt wird üblicherweise mit der Langevin-Gleichung [122] modelliert. Erste Anwendungen des Transported-PDF-Ansatzes auf homogene Brennverfahren mit direkter Einspritzung wurden in der jüngsten Vergangenheit von Zhang et al. [62] und Kung et al. [63] vorgestellt. Dabei standen insbesondere Emissionsaussagen im Vordergrund.

4.2.1 Turbulente Mischungsmodelle

Wie bereits im vorherigen Abschnitt erwähnt, ist zur Schließung der PDF-Transportgleichung ein Mischungsmodell notwendig, um die mikroskalige turbulente Interaktion zwischen den einzelnen Spezies wiederzugeben. Ein Mischungsmodell beschreibt demnach die Entwicklung der Spezieszusammensetzung der Partikel im Speziesraum. Dazu sind in den vergangenen 3 Jahrzehnten Modelle entwickelt worden, deren Funktionsweise und Qualität in Anlehnung an die Arbeiten von Peters [64] und Nooren [56] nun diskutiert werden sollen.

Vorab sollen jedoch die drei wesentlichen Grundeigenschaften vorgestellt werden, die einem Mischungsprozess zugrunde liegen und folglich auch von einem Mischungsmodell abgebildet werden sollten. Zu diesen Eigenschaften gehören:

- Ein Mischungsprozess ändert nur die höheren Momente einer Verteilung, der Mittelwert bleibt erhalten.
- Eine beliebige turbulente Start-Verteilung relaxiert immer zu einer Gauß-Verteilung.
- Für einen turbulenten Mischungsprozess gilt das Lokalisierungsprinzip.

Das letztgenannte Lokalisierungsprinzip besagt dabei, dass der Mischungsprozess nur von seiner direkten Umgebung beeinflusst wird. Ist dieses Prinzip verletzt, so können Mischungsprozesse unrealistischer Weise auch über die Reaktionszone hinweg erfolgen.

Interaction by Exchange with the Mean (IEM)

Das mit Abstand einfachste Modell ist das IEM-Modell (Interaction by Exchange with the Mean). Bei diesem Modell wird angenommen, dass sich die Spezieskonzentrationen ϕ_i innerhalb der einzelnen Partikel einer Gruppe von Partikeln in Richtung ihres gemeinsamen Mittelwerts $\langle \phi \rangle$ hin entwickeln. Das Modell hat damit eine rein deterministische Basis.

$$\frac{d\phi_i}{dt} = -\frac{C_0}{2} \frac{\phi_i - \langle \phi \rangle}{\tau_{turb}} \quad (4.20)$$

Als Standardwert wird für den Vorfaktor C_0 der Wert 2.0 [49] verwendet. Der Gradient der Entwicklung wird dabei über das charakteristische turbulente Zeitmaß τ_{turb} vorgegeben. Im Falle einer hybriden Kopplung von Standard-CFD-Code und PDF-Transportgleichung wird aus dem turbulenten Zustand (turbulente kinetische Energie k und Dissipationsrate ϵ) der entsprechenden CFD-Zelle über den einfachen Zusammenhang

$$\tau_{turb} = \frac{k}{\epsilon} \quad (4.21)$$

ermittelt. Dabei liegt die Annahme zugrunde, dass zwischen dem turbulenten Zeitmaß bez. des Abbaus der Geschwindigkeitsfluktuationen im Strömungsfeld und dem Zeitmaß hinsichtlich des Abbaus von skalaren Fluktuationen eine Korrelation besteht.

Das IEM-Modell besticht durch seine Einfachheit, hat allerdings den Nachteil, dass seine Relaxation nicht in einer Gauß-Verteilung mündet, wie sie aus DNS-Simulationen bekannt ist. Stattdessen bleibt die Form einer vorgegebenen turbulenten Verteilung über den Mischungsprozess hinweg erhalten. Erfolgt z.B. die Initialisierung einer PDF durch zwei δ -Funktionen, so bleiben diese während des Mischungsprozesses bestehen und streben auf ihren gemeinsamen Mittelwert zu. Pope [49] sieht die Ursache in diesem unrealistischen Verlauf in der Tatsache, dass die Mischungsgleichung nur den Mittelwert sieht, nicht aber die Form der gesamten Verteilung. Auch dem Lokalisitätsprinzip wird nicht Rechnung getragen, da der gemeinsame Mittelwert $\tilde{\phi}$, auf den die einzelnen Partikel zumischen, einen globalen Charakter besitzt.

CURL/Modified CURL

Zu den stochastischen Mischungsmodellen gehört das CURL-Modell [65]. Der stochastische Charakter des Modells resultiert aus einem Mischungsprozess, der jeweils zwischen zwei Partikeln stattfindet. Die Auswahl dieser Partikel erfolgt dabei zufällig. Die ursprüngliche Version des CURL-Modells sieht vor, dass nach dem Mischungsprozess beide Partikel 1 und 2 den gleichen Wert annehmen, welcher dem Mittelwert der beiden Ausgangswerte ϕ_1^0 und ϕ_2^0 entspricht.

$$\phi_1 = \phi_2 = \frac{1}{2} (\phi_1^0 + \phi_2^0) \quad (4.22)$$

Um eine bessere Abbildung der Varianzentwicklung zu gewährleisten, nimmt jedoch nicht jedes Partikel am Mischungsprozess teil. Stattdessen wird die Anzahl der für den Mischungsprozess verwendeten Partikelpaare N_{mix} aus der Gesamtzahl der Partikel N_p in folgender Weise bestimmt,

$$N_{mix} = 2N_p\omega\Delta t \quad (4.23)$$

wobei Δt die Zeitschrittweite und ω eine Mischungsfrequenz darstellt. Da auch dieses Modell nicht in der Lage ist, aus einer beliebigen Ausgangsverteilung zu einer Gauß-Verteilung hin zu relaxieren, ist von Dopazo [66] eine Verbesserung des Modells durchgeführt worden, die unter dem Namen *modified Curl model* in der Literatur Einzug gehalten hat. Der paarweise Mischungsprozess bleibt zwar erhalten, wird aber um Wichtungsfaktor α ergänzt. Dieser Faktor hat einen Wertebereich von 0 bis 1, wird zufällig bestimmt und hat die Aufgabe, den Grad

der Mischung zwischen den beiden Partikeln zu beeinflussen. Durch die (ortsunabhängige) stochastische Auswahl jeweils zweier Reaktoren für den Mischungsprozess wird auch von diesem Modell das Lokalitätsprinzip verletzt.

$$\phi_1 = (1 - \alpha)\phi_1^0 + \frac{1}{2}(\phi_1^0 + \phi_2^0) \quad (4.24)$$

$$\phi_2 = (1 - \alpha)\phi_2^0 + \frac{1}{2}(\phi_1^0 + \phi_2^0) \quad (4.25)$$

Wie leicht einzusehen ist, findet für $\alpha = 0$ keine Mischung statt, während für $\alpha = 1$ das Modell in das ursprüngliche CURL-Modell übergeht. Für eine korrekte Abbildung der Varianzentwicklung wird bei diesem Modellansatz die Anzahl der Mischungspaare mit

$$N_{mix} = 3N_p\omega\Delta t \quad (4.26)$$

berechnet. Im Gegensatz zum ursprünglichen CURL-Modell ist die modifizierte Version in der Lage, nach Beendigung des Mischungsvorgangs zweier Delta-Funktionen zwar eine Verteilung abzubilden, die jedoch nicht der zu erwartenden Gauß-Verteilung entspricht. Damit stellt das modifizierte CURL-Modell eine erhebliche Verbesserung in der Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsdichte gegenüber dem ursprünglichen CURL-Modell dar, weist aber immer noch Schwächen auf. Allen bisher vorgestellten Mischungsmodellen ist neben ihrer Relaxationschwäche auch ihr nichtlokales Verhalten [64] im Speziesraum anzulasten.

Mapping Closure

Das Mapping-Closure-Modell ist ein Mischungsmodell, welches alle drei Grundeigenschaften eines turbulenten Mischungsprozesses (Erhaltung des ersten Moments, Relaxation zur Gauß-Verteilung, Lokalitätsprinzip) erfüllt. Kern des Modellansatzes ist dabei ein Mapping-Prozess, in dem das skalare Feld auf ein gauß'sches Referenz-Feld gemappt wird. Eine detaillierte Beschreibung des Modells findet sich z.B. in Dopazo [67]. Beim Abgleich des Modells mit DNS-Ergebnissen konnte eine exzellente Ergebnisqualität hinsichtlich des Relaxationsverhaltens nachgewiesen werden. Als nachteilig erweist sich jedoch der sehr hohe Rechenaufwand des Modells wie auch der hohe Implementierungsaufwand.

Euclidean Minimum Spanning Trees (EMST)

Eine der neuesten Mischungsmodell-Entwicklungen geht auf Subramaniam et al. [68] zurück und hat den Namen *Euclidean Minimum Spanning Trees*. Dieses Modell verhält sich lokal im Speziesraum und wird damit dem Lokalitätsprinzip gerecht. Für den Mischungsprozess wird aus der Gesamtmenge der für den Mischungsprozess relevanten Partikel auf Basis eines Partikelalterungsprozesses eine Teilmenge von Partikeln extrahiert. Zwischen diesen Partikeln wird eine imaginäre Baum-Struktur generiert. Der Mischungsprozess selbst erfolgt, indem Partikel entlang der Verästelungen entsprechend miteinander interagieren. Laut Subramaniam et al. [68] ist dieses Modell allen bisher verfügbaren Modellen bez. seines Relaxationsverhaltens überlegen.

4.3 Bewertung der 0d- und 3d-Modelle

4.3.1 Detaillierungsgrad und Rechenaufwand

Im Folgenden sollen nun die Modelle hinsichtlich ihrer Abbildung folgender physikalischer Effekte gegeneinander abgewogen werden:

- Konvektion
- Diffusion
- Wandwärmeübergang
- Turbulente Mischung

Zum besseren Vergleich sind die Modelle in Tabelle 4.1 bezüglich der Abbildungsqualität dieser physikalischen Effekte gegenübergestellt. Die Bewertung erfolgt nach guter (+), formal vorhandener jedoch unzureichender (o) und nicht vorhandener (-) Abbildung. Zusätzlich ist die Raum-Dimension, eine grobe Abschätzung für die Anzahl der benötigten Reaktoren und der Rechenaufwand aufgeführt.

	HR	Mehrzonen (entkop.)	Mehrzonen (gekop.)	SR	T-PDF
Konvektion	-	-	+	-	+
Diffusion	-	-	+	-	-
WWÜ	o	+	+	o	+
turb. Mischung	-	-	-	+	+
Dimension	0d	quasi 0d	quasi 0d	0d	3d
# Reaktoren	1	> 1	> 1	> 1	>> 1
Rechenaufwand	gering	mittel	mittel	mittel	sehr hoch

Tabelle 4.1: Bewertung unterschiedlicher 0d- und 3d-Reaktor-Modelle hinsichtlich der physikalischen Abbildungsqualität

In der sehr einfachen Modellierung des homogenen Reaktors werden Konvektion und Diffusion nicht berücksichtigt. Eine Ausnahme bildet die Modellierung des Wandwärmeübergangs (WWÜ). Dieser kann (abgesehen von der strömungsmechanischen Beeinflussung des Wandwärmeübergangs z.B. durch eine Drallströmung) mit Hilfe von gängigen empirischen Ansätzen (z.B. Woschni-Ansatz, siehe Heywood [39]) bestimmt werden. Dennoch ist auch dieses Vorgehen beim homogenen Reaktor als sehr kritisch zu betrachten, da der Wandwärmeübergang in einem Verbrennungsmotor im Wesentlichen von der Ausprägung der Temperaturschicht abhängt (Rußstrahlung ausgenommen), die in diesem einfachen Modell in keinsten Weise berücksichtigt wird.

Einen etwas höheren Detaillierungsgrad weisen die entkoppelten Mehrzonen-Modelle auf. Hier wird durch die Aufteilung des Brennraums in eine vorgegebene Anzahl von Zonen in einem gewissen Grad der Gemisch- wie auch der Temperaturinhomogenität im Brennraum Rechnung

getragen. Die Konvektion wird in der Regel während der Kinetikberechnung nicht berücksichtigt. Gleiches gilt auch für die Diffusion, die zwar zwischen den einzelnen Zonen abgebildet werden könnte, jedoch üblicherweise in der Literatur in den entkoppelten Mehrzonen-Modellen keine Berücksichtigung findet. Da die einzelnen homogenen Reaktoren, die jeweils eine Zone im Brennraum repräsentieren, unabhängig voneinander zu sehen sind und damit rein laminaren Charakter haben, entfällt auch die Modellierung der turbulenten Mischung. Durch gezielte Einteilung des Brennraums auch in wandnahe Zonen, kann der Einfluss des Wandwärmeübergangs mit diesem Ansatz relativ gut simuliert werden. Bei diesem Modell ist jedoch bezüglich der mehr oder weniger willkürlichen Aufteilung des Brennraums durch den Anwender des Modells Skepsis angebracht.

Gegenüber den entkoppelten Mehrzonen-Modellen wird die physikalische Abbildungsqualität um die Konvektion und die Diffusion erhöht.

Der einzige der drei 0d-Ansätze, der in der Lage ist, turbulente Mischungseffekte zu erfassen, ist der stochastische Reaktor. Bei dieser Modellierung wird jedoch auf konvektive und diffusive Einflüsse verzichtet. Der Wandwärmeübergang wird mitunter zwar berücksichtigt [48], beruht aber immer auf Annahmen von Wandabständen bzw. Wärmeübergangszahlen der einzelnen homogenen Reaktoren, die ebenfalls eine gewisse Willkür nicht leugnen lassen, da keine räumliche Zuordnung der einzelnen HR bei der Belegung erfolgt, wie es z.B. im Mehrzonen-Modell der Fall ist.

Der hohe physikalische Detaillierungsgrad des Transported-PDF-Ansatzes führt zusammen mit seiner 3-dimensionalen Ortsauflösung zu einer gleichermaßen guten Abbildung aller Effekte. Da bei turbulenter Verbrennung bzw. bei hohen Re -Zahlen die turbulente Mischung gegenüber der molekularen Diffusion dominiert, wird üblicherweise auf eine zusätzliche Modellierung der Diffusion verzichtet [54, 55, 59].

Bei einem Vergleich der Rechenzeiten aller Modellierungskonzepte liegt der eindeutige Vorteil beim homogenen Reaktor, da hier die Kinetik für nur einen Reaktor berechnet werden muss. Beim Mehrzonen-Modell wie auch beim stochastischen Reaktor ist die Zunahme des Berechnungsaufwands gegenüber einem homogenen Reaktor mehr oder weniger proportional zur Anzahl der (homogenen) Reaktoren, die für die Diskretisierung herangezogen werden. Die Größenordnung der verwendeten Reaktoren liegt in der Regel zwischen 10^1 und 10^2 . Da beim Transported-PDF-Ansatz je CFD-Zelle üblicherweise etwa 100 Partikel (bzw. Reaktoren) zur Minimierung des statistischen Fehlers verwendet werden, erreicht die Partikelzahl schon bei einem eher groben CFD-Netz mit einer Zellzahl von 10.000 eine Größenordnung von 10^6 . Hinzu kommen zum Teil sehr aufwendige Teilmodelle z.B. zur Berechnung der turbulenten Mischung, die zusätzlich den Rechenaufwand in die Höhe treiben.

4.3.2 Anwendbarkeit auf motorische Brennverfahren

Sämtliche vorgestellten 0d-Modelle sind unbrauchbar für die Simulation konventioneller Otto- oder Diesel-Brennverfahren. Bei Diesel-Brennverfahren scheitert die Anwendung an den ausgeprägten mikroskopischen und makroskopischen Gemisch- und Temperaturinhomogenitäten und an der daraus resultierenden komplexen Diffusionsverbrennung. Auch ist keines der Modelle auch nur ansatzweise in der Lage, die instationäre Flammenfrontausbreitung eines Otto-Motors abzubilden.

Eine feinere Differenzierung der 0d-Modelle muss bei der Simulation von Otto-HCCI- bzw. Diesel-HCCI-Brennverfahren vorgenommen werden. Bedingt durch den früheren Spritzbeginn

und durch die besseren Verdampfungseigenschaften von Otto-Kraftstoff kann gegenüber einem Diesel-Brennverfahren von einer besseren Homogenisierung bez. Gemisch und Temperatur ausgegangen werden. Die restlichen Inhomogenitäten können eingeschränkt mit dem SR-Modell bzw. mit dem Mehrzonen-Modell abgebildet werden. Die prinzipbedingt sehr schnelle Wärmefreisetzung eines homogenen Reaktors wird jedoch grundsätzlich die der turbulenten Verbrennung eines Motors überschätzen. Dieses Modellierungskonzept ist damit auch für ein Otto-HCCI-Brennverfahren zu ungenau.

Bei einem Diesel-HCCI-Brennverfahren nehmen aus besagten Gründen insbesondere auch die makroskopischen Inhomogenitäten im Brennraum zu. Ein HR-Modell ist deshalb unbrauchbar. Aber auch die Anwendung eines entkoppelten Mehrzonen-Modells, in dem die Inhomogenitäten zum Initialisierungszeitpunkt "eingefroren" werden und während der langen Zündphase demnach keine weitere Homogenisierung stattfinden kann, wird der realen Komplexität nicht gerecht. Am ehesten scheint noch das SR-Modell geeignet zu sein, da hier ein Fortschreiten der Homogenisierung durch die Berücksichtigung der Mischung möglich ist. Grundsätzlich kommt bei der Simulation von Diesel-HCCI-Brennverfahren mit 0d-Modellen noch erschwerend hinzu, dass Verdampfungsprozesse und Beginn der chemischen Reaktivität parallel ablaufen können. Der Verdampfungsprozess wird jedoch in den Standard-0d-Modellen nicht berücksichtigt ¹.

Für alle Verbrennungsregimes (vorgemischt, teilweise vorgemischt, nicht vorgemischt) ist aus theoretischer Sicht der Transported-PDF-Ansatz applizierbar. Bei der konventionellen Dieselverbrennung erweist sich jedoch der hohe Diffusionsanteil der Verbrennung als problematisch, da die Mischungsmodelle diesen Effekt nur unzureichend beschreiben. Homogene Brennverfahren mit hohem Vormischungsgrad wie auch die konventionelle Otto-Verbrennung eignen sich dagegen gut für den Transported-PDF-Ansatz.

In Tabelle 4.2 ist die Anwendbarkeit der einzelnen 0d- und 3d-Modelle auf die verschiedenen Brennverfahren noch einmal kompakt dargestellt:

	HR	Mehrzonen (entkop.)	Mehrzonen (gekop.)	SR	T-PDF
Diesel (konv.)	-	-	-	-	o
Otto (konv.)	-	-	-	-	+
Diesel-HCCI	-	-	o	o	+
Otto-HCCI	-	o	o	o	+

Tabelle 4.2: Bewertung unterschiedlicher 0d- und 3d-Reaktor-Modelle hinsichtlich der Anwendung auf verschiedene Brennverfahren: gut (+), bedingt möglich (o), nicht möglich (-)

Insgesamt lässt sich zusammenfassen, dass alle 0-dimensionalen kinetischen Ansätze Vereinfachungen oder Vernachlässigungen enthalten, die selbst hinsichtlich der Berechnung von Zündung und Verbrennung von HCCI-Verfahren als kritisch angesehen werden müssen. Unbestritten ist allerdings deren Nutzen im Zusammenhang mit dem Studium von Einflussfaktoren wie beispielsweise der AGR-Rate oder von Radikalkonzentrationen auf das Zündverhalten von Gemischen. Der Transported-PDF-Ansatz dagegen ist, abgesehen von seinem sehr hohen Rechenaufwand, insbesondere für HCCI-Brennverfahren sehr gut geeignet.

¹In einem gekoppelten Mehrzonen-Modell ist der Verdampfungsprozess implizit im 3d-CFD-Code enthalten. Auch in SR-Modellen sind teilweise einfache Verdampfungsmodelle verfügbar.

4.4 Erweiterung des SR-Ansatzes: Multi-SR-Ansatz

Wie bereits detailliert in den Unterkapiteln 4.1 und 4.3 erläutert, sind 0d-Modelle (homogener Reaktor, Mehrzonen-Modell und stochastischer Reaktor) nur begrenzt geeignet, um das komplexe Gesamtsystem von Zündung und Verbrennung in einem Motor unter HCCI-Betrieb zu modellieren. Auch wenn der Homogenisierungsgrad bei HCCI-Brennverfahren vergleichsweise groß ist, so treten doch Gemischinhomogenitäten (makroskopisch und mikroskopisch) auf, die Einfluss auf den Zünd- und Verbrennungsprozess haben. Hinzu kommen Temperaturinhomogenitäten, verursacht durch Kraftstoffverdampfung und Wandwärmeübergang.

Ziel dieses Unterkapitels ist es nun, ein neues Modellierungskonzept vorzustellen, welches insbesondere für Diesel-HCCI-Brennverfahren geeignet ist. Ein erste Anforderung an die Modellierung soll über die Betrachtung der Verdampfungseigenschaft und der Zündwilligkeit von Dieselkraftstoff abgeleitet werden. Dazu ist in Abbildung 4.2 ein Vergleich der Siedekurven von Diesel- und Ottokraftstoff dargestellt. Demnach benötigt Dieselkraftstoff ein deutlich höheres Temperaturniveau jenseits von 200 °C und besitzt folglich im Vergleich zu Ottokraftstoff das trägere Verdampfungsverhalten.

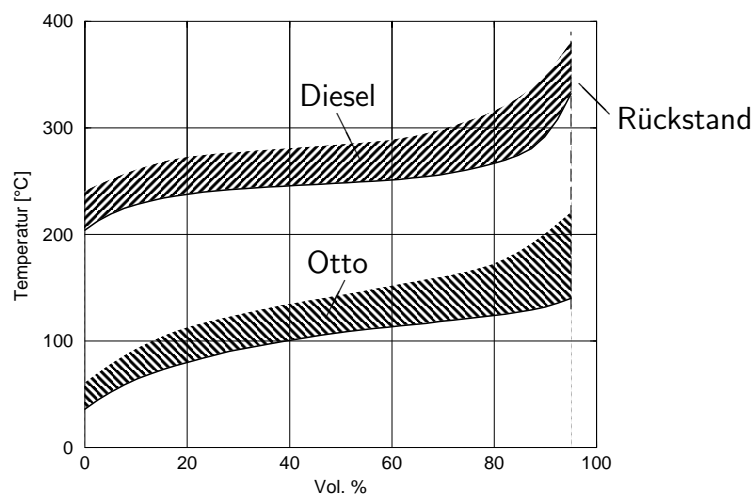


Abbildung 4.2: Siedekurven von Otto- und Dieselkraftstoff (ähnlich [94])

Wie der folgenden Korrelation [94] von Cetan-Zahl (CZ) und Oktan-Zahl (ROZ) anzusehen ist, ist die Zündwilligkeit von Dieselkraftstoff dagegen erheblich höher als die von Ottokraftstoff:

$$CZ = 100 - ROZ \quad (\text{für } ROZ > 80) \quad (4.27)$$

Bei einer angenommenen Oktan-Zahl von 95 für Benzin ergibt sich lediglich eine Cetan-Zahl von 5, welche damit deutlich unterhalb der von Dieselkraftstoff ($CZ \approx 53$) liegt. Die hohe Zündwilligkeit gepaart mit der schlechten Verdampfungseigenschaft von Dieselkraftstoff haben zur Folge, dass bei Diesel-HCCI-Brennverfahren Verdampfung und einsetzende chemische Reaktion - wie auch bei konventionellen Diesel-Brennverfahren - parallel ablaufende Prozesse darstellen können. Die Interaktion dieser beiden Prozesse muss deshalb bei der Modellierung von Diesel-HCCI-Brennverfahren berücksichtigt werden.

In Unterkapitel 4.2 wurde der Transported-PDF-Ansatz beschrieben. Dieser ist in der Lage,

die Komplexität eines turbulenten kinetischen Verbrennungsvorgangs unter Berücksichtigung aller lokalen Effekte zu erfassen. Als nachteilig erweist sich jedoch die zum Teil komplexe Modellierung einiger Terme der Transportgleichung (4.14) wie auch der hohe Rechenaufwand, der sich durch eine angemessene Diskretisierung der Transportgleichung auf Basis des Monte-Carlo-Verfahrens ergibt.

Es stellt sich nun die Frage nach einem Kompromiss aus Detaillierungsgrad und Rechenaufwand. Aus industrieller Sicht ist der Transported-PDF-Ansatz derzeit noch zu rechenzeit- und damit auch zu kostenintensiv. Geht man in der Hierarchie der Modellierung einen Schritt zurück, landet man unweigerlich beim Konzept des stochastischen Reaktors, welches jedoch nicht in der Lage ist, lokale Effekte zu berücksichtigen, da es den Brennraum nur rein statistisch beschreibt.

Im Rahmen dieser Arbeit wird nun ein Modellierungskonzept vorgestellt, welches zwischen dem stochastischen Reaktor und dem Transported-PDF-Ansatz platziert ist. Die Ortsauflösung wird dabei durch mehrere, räumlich verteilte, stochastische Reaktoren erzielt, weshalb dieser Ansatz im Folgenden als Multi-SR-Ansatz bezeichnet wird. Wie ein SR-Modell beschreibt der Multi-SR-Ansatz eine Gemisch- und Temperatur-Statistik im Brennraum. Die modelltechnische Überlegenheit des Multi-SR-Ansatzes beruht dabei auf der Tatsache, dass dessen Statistik zusätzlich eine räumliche Auflösung besitzt. Die Neuerungen des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Multi-SR-Ansatzes im Vergleich zu einem singulären SR-Ansatz sind im Folgenden aufgelistet:

- Abbildung des Brennraums durch ein System von stochastischen Reaktoren
- Entwicklung des SR-Systems durch Einkopplung der relevanten physikalischen Prozesse (Konvektion, Verdampfung, Wandwärmeübergang, Turbulenz) basierend auf der direkten Kopplung mit einer 3d-CFD-Rechnung
- turbulente Dampfeinkopplung in die stochastischen Reaktoren auf Basis eines β -PDF-Ansatzes

Basis für den Multi-SR-Ansatz ist eine 3d-CFD-Rechnung der Ladungsbewegung, Einspritzung und Gemischbildung. Diese Berechnung ist mit der Kinetik-Berechnung (Multi-SR-Ansatz) gekoppelt. Die SR bewegen sich konvektiv analog zum CFD-Strömungsfeld. Während der Verdampfung des eingespritzten Kraftstoffs wird der Kraftstoffdampf und die Verdampfungsenthalpie turbulent in den Multi-SR-Code eingekoppelt. Die Kinetik innerhalb der SR wird mit CHEMKIN [134] berechnet. Zwischen den einzelnen SR wird die Diffusion mit einem geeigneten Modellansatz umgesetzt. Auf die Kopplung zwischen der Multi-SR-Berechnung mit der 3d-CFD-Berechnung wie auch die Modellierung sämtlicher Teilkonzepte des Multi-SR-Ansatzes wird in den nächsten Abschnitten detailliert eingegangen.

4.4.1 Kopplung Multi-SR-Code/3d-CFD-Code

In Abbildung 4.3 ist der Ablauf innerhalb des Multi-SR-Codes und die Kopplung zwischen dem Multi-SR-Code und dem 3d-CFD-Code skizziert. Die linke Spalte kennzeichnet alle Prozesse bzw. Schritte, die innerhalb des Multi-SR-Codes ablaufen. In der rechten Spalte finden sich

Prozesse und Informationen innerhalb des 3d-CFD-Codes, welche für den Multi-SR-Code relevant sind. Es ist an dieser Stelle wichtig anzumerken, dass alle Kopplungen bzw. Interaktionen in Richtung des Multi-SR-Codes ablaufen (gestrichelte Pfeile). Einzige Ausnahme bildet die Einkopplung der innerhalb des SR-Systems freigesetzten Energie in den 3d-CFD-Code (strichpunktiertes Pfeil bzw. Schritt I).

Primäres Ziel des Multi-SR-Ansatzes ist die Berechnung der Wärmefreisetzung und des daraus resultierenden Druckverlaufs von Diesel-HCCI-Brennverfahren unter Berücksichtigung detaillierter Kinetik. All diese Funktionalitäten - insbesondere die Verwendung detaillierter Kinetik - weist der Multi-SR-Code auf, weshalb er auch hinsichtlich der Berechnung der Wärmefreisetzung die führende Rolle einnimmt. Dies wird auch durch die nur schwache Rückkopplung in den 3d-CFD-Code in Form einer Energieeinkopplung mit sehr stark vereinfachter Speziesumsetzung deutlich.

Die Hauptaufgabe des 3d-CFD-Codes wiederum ist es, alle für den Zünd- und Verbrennungsprozess physikalisch relevanten Prozesse zeitlich und lokal abzubilden, um diese Informationen dann geeignet in den Multi-SR-Code einzukoppeln. Dazu gehören die Konvektion, der Wandwärmeeübergang, die Verdampfung, das charakteristische turbulente Zeitmaß und das Brennraumvolumen.

Alle Prozesse in den beiden Code-Teilen wie auch insbesondere die Kopplung zwischen den beiden Codes werden massen- und energiekonservativ umgesetzt. Auch ist die Erhaltung des Gesamtvolumens im Multi-SR-Code in Bezug auf das Brennraumvolumen des 3d-CFD-Codes gegeben.

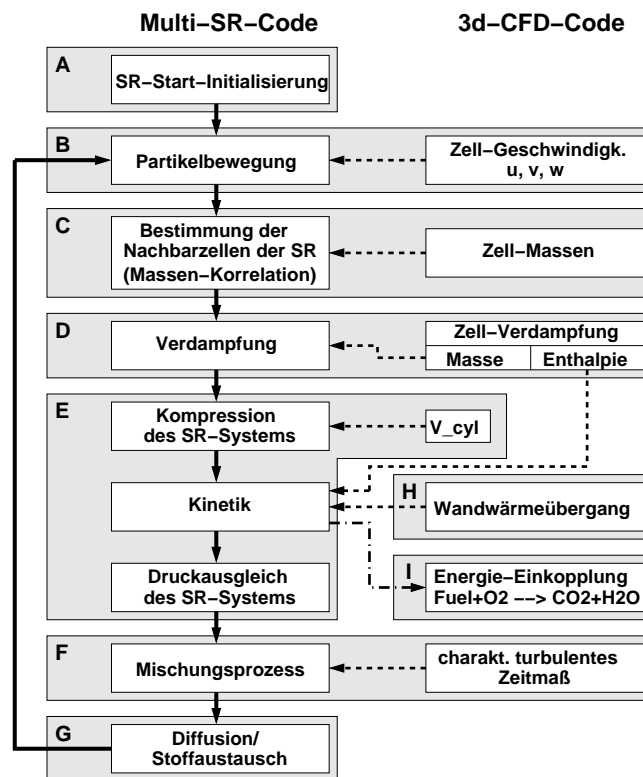


Abbildung 4.3: Kopplung zwischen Multi-SR-Code (linke Seite) und 3d-CFD-Code (rechte Seite): Prozessablauf innerhalb des Multi-SR-Codes (durchgezogene Pfeile), Kopplung 3d-CFD-Code → Multi-SR-Code (gestrichelte Pfeile), Kopplung Multi-SR-Code → 3d-CFD-Code (strichpunktiertes Pfeil).

Es werden nun der Reihe nach die einzelnen Schritte aus Abbildung 4.3 beschrieben.

4.4.2 A: SR-Start-Initialisierung

Die Start-Initialisierung der SR erfolgt vor der Einspritzung. Die Anzahl der SR wird dabei vom Anwender fest vorgegeben und bleibt im weiteren Verlauf der Simulation unverändert. Folgende SR-Parameter sind von der Initialisierung betroffen:

- SR-Koordinaten
- SR-Masse
- SR-Temperatur
- SR-Druck
- SR-Gemischzusammensetzung

Für die Ermittlung der SR-Koordinaten werden Partikel auf Basis eines stochastischen Würfelprozesses zufällig im Brennraum bzw. im CFD-Netz verteilt. Anschließend ermittelt ein Algorithmus die nächstliegenden CFD-Zellen eines jeden SR, im Folgenden "Nachbarzellen" genannt. Die Startmasse des SR ergibt sich durch Aufsummierung der Massen der Nachbarzellen. Gleiches gilt für die Initialisierung der Start-Massenbrüche der einzelnen SR. Die SR-Temperatur wird über einen adiabaten Mischungsprozess bestimmt, in dem der thermodynamische Zustand aller Nachbarzellen berücksichtigt wird.

Durch das zuvor beschriebene Vorgehen ergeben sich unterschiedliche Massen der einzelnen SR. Der große Vorteil liegt in der strengen Erhaltung der Gesamtmasse und der Gesamtenergie der beiden Berechnungssysteme. Nach der Start-Initialisierung kann sich die Masse eines SR nur noch über Kraftstoffverdampfung aus entsprechenden Nachbarzellen ändern. Auch während der Kinetik-Berechnung ist die Massen- und Energieerhaltung gewährleistet.

Zur Abbildung einer turbulenten Gemischverteilung besteht ein SR definitionsgemäß aus einer Anzahl N_{hr} von homogenen Reaktoren (HR). Im Multi-SR-Konzept repräsentiert jeder HR ein gewisses Intervall im Mischungsbruchraum (siehe Anhang A), um die Massendichtefunktion \mathcal{M} eines SR abzubilden (siehe auch Abbildung 4.1). Konform zur Formulierung der Bilanzgleichung 4.2 eines jeden SR erfolgt die Start-Initialisierung \mathcal{M}_0 aus mathematischer Sicht durch eine Anzahl von N_{hr} δ -Funktionen

$$\mathcal{M}_0(\underline{\Psi}) = \sum_{n=1}^{N_{hr}} w^{(n)} \delta(\underline{\Psi}_0 - \underline{\Psi}_0^{(n)}) \delta(\underline{x}_0 - \underline{x}_0^{(n)}) \quad (4.28)$$

mit der Massengewichtung $w^{(n)}$. Zu Beginn der Initialisierung liegt jedoch noch keine turbulente Verteilung in den SR vor, da vor der Einspritzung initialisiert wird und folglich kein Kraftstoff im Brennraum und damit in den SR enthalten ist. Daraus ergibt sich, dass bei der Initialisierung eines einzelnen SR die gesamte SR-Masse demjenigen HR zugeteilt wird, welcher die Oxidatorseite des Mischungsbruchraums (siehe Anhang A) repräsentiert (HR₁ in Abbildung 4.4).

Alle anderen HR werden noch nicht initialisiert und erfahren erst mit Beginn des Verdampfungsprozesses einen Massenzuwachs (siehe Schritt D). Demzufolge ergibt sich für die Gewichtungsfaktoren $w^{(n)}$ in Gleichung 4.28 der einfache Zusammenhang

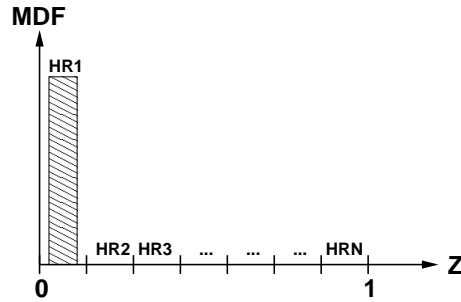


Abbildung 4.4: HR-Massenverteilung eines SR nach der Initialisierung

$$w^{(n)} = \begin{cases} m_{sr}^{init} & n = 1 \\ 0 & n = 2, \dots, N_{hr} \end{cases}$$

mit m_{sr}^{init} als der Gesamtmasse des jeweiligen SR.

4.4.3 B: Partikelbewegung

Die Partikelbewegung wird in Lagrange'scher Betrachtungsweise beschrieben und erfolgt rein konvektiv auf Basis des 3d-CFD-Strömungsfeldes. Auf eine Modellierung der turbulenten Dispersion wurde im Rahmen dieser Arbeit verzichtet. Der aktuelle Geschwindigkeitsvektor \vec{v}_{cfD} eines SR ergibt sich aus der CFD-Zelle, in der sich das den SR repräsentierende Partikel aktuell befindet. Damit berechnen sich die neuen SR-Koordinaten $\vec{x}_{sr,i}(t + \Delta t)$ innerhalb eines Zeitschritts Δt in einfacher Weise zu

$$\vec{x}_{sr,i}(t + \Delta t) = \vec{x}_{sr,i}(t) + \Delta t \vec{v}_{cfD} \quad (4.29)$$

4.4.4 C: Bestimmung der Nachbarzellen der SR

Nachdem die Partikelbewegung erfolgt ist (Schritt B), müssen die Nachbarzellen der einzelnen SR neu zugeordnet werden. Dazu werden sukzessive die nächstliegenden Zellen zu einem SR ermittelt, bis die aufsummierte Masse der Zellen möglichst genau mit der SR-Masse korreliert. CFD-Zellen, die nach dem Durchlaufen dieses Algorithmus noch keinem SR zugeordnet werden konnten, werden in einem anschließenden Suchprozess dem angrenzenden SR zugeschrieben, zu dem sie den geringsten Abstand haben.

Insbesondere die großen Zellen innerhalb des 3D-CFD-Netzes führen auflösungsbedingt zu Abweichungen zwischen der SR-Masse und der aufsummierten Masse der Nachbarzellen. Diese Abweichungen werden in Kauf genommen. Sie können jedoch durch eine feinere Netztopologie bzw. durch eine Verringerung der Zahl der SR reduziert werden. Im letzteren Fall muss dafür Sorge getragen werden, dass durch die schlechtere Auflösung lokaler Effekte das Ergebnis der Kinetik-Berechnung dennoch plausibel bleibt.

4.4.5 D: Verdampfung

Für die Modellierung des Verdampfungsprozesses in den SR wird das Mischungsbruch-Konzept und der β -PDF-Ansatz angewendet (siehe Anhang A). Ziel ist es, den innerhalb der Nachbarzellen eines SR verdampften Kraftstoff turbulent verteilt in den SR einzukoppeln. Basis dafür ist die bekannte turbulente Gemischverteilung im Z -Raum. Neben der turbulenten Verteilung ist auch der mittlere Mischungsbruch \tilde{Z} bekannt. Damit kann mit Hilfe des β -PDF-Ansatz die mit Z gewichtete Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $Z\tilde{P}(Z)$ bzw. deren Verteilungsfunktion $\tilde{F}(Z)$ abgeleitet werden. Für einen Mischungsbruch von $\tilde{Z} = 0.2$ und eine Varianz $\tilde{Z}''^2 = 0.01$ sind beide Funktionen beispielhaft in Abbildung 4.5 (links) im Mischungsbruch-Raum aufgetragen.

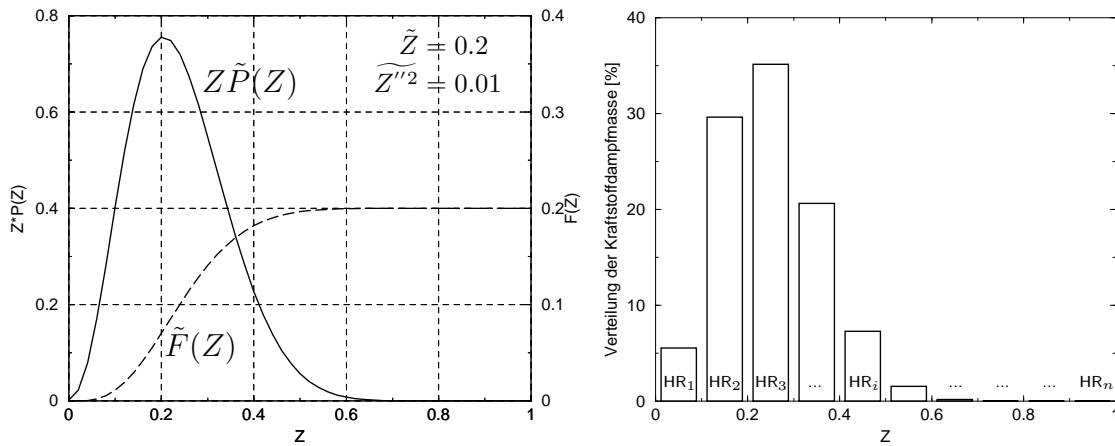


Abbildung 4.5: Gewichtete Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $Z\tilde{P}(Z)$ (β -PDF) und deren Verteilungsfunktion $\tilde{F}(Z)$ im Z -Raum (links), prozentuale Massenverteilung des Kraftstoffdampfs auf die HR (rechts).

Die Massenanteile des innerhalb des CFD-Codes verdampften Kraftstoffs werden gemäß der Verteilungsfunktion $\tilde{F}(Z)$ in die homogenen Reaktoren eingekoppelt. Eine entsprechend diskretisierte Verteilung ist in Abbildung 4.5 (rechts) dargestellt.

Generell wird die Form der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}(Z)$ durch Verdampfung in einer Weise geändert, die eine Umverteilung des bereits in den homogenen Reaktoren befindlichen Kraftstoffs notwendig machen würde. Im Rahmen dieser Arbeit wird jedoch auf diese Umverteilung verzichtet und die Kraftstoffdampfeinkopplung ausschließlich durch Addition zu den homogenen Reaktoren umgesetzt. Dieser Fehler kann jedoch als gering angesehen werden. Eine qualitative Bewertung dieses Fehlers wird in Anhang B aufgezeigt.

Damit ergibt sich folgendes numerisches Vorgehen zur Bestimmung der Verteilung des verdampften Kraftstoffs im Z -Raum: Zuerst wird die Verteilungsfunktion $\tilde{F}(Z)$ durch Integration der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}(Z)$ bestimmt:

$$\tilde{F}(Z) = \int_0^Z Z\tilde{P}(Z)dZ \quad \text{mit} \quad \tilde{F}(Z=1) = \tilde{Z} \quad (4.30)$$

Die Verteilungsfunktion $\tilde{F}(Z)$ wird dann mit dem gegebenen Mischungsbruch \tilde{Z} auf 1 normiert:

$$\tilde{F}_{norm}(Z) = \frac{\tilde{F}(Z)}{\tilde{Z}} \quad (4.31)$$

und die so erhaltene Verteilungsfunktion $\tilde{F}_{norm}(Z)$ erneut differenziert

$$\tilde{P}_{norm}(Z) = \frac{\partial \tilde{F}_{norm}(Z)}{\partial Z}. \quad (4.32)$$

mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}_{norm}(Z)$ als Ergebnis. Für $\tilde{P}_{norm}(Z)$ gilt jetzt wegen der Normierung folgender Zusammenhang:

$$\int_0^1 Z \tilde{P}_{norm}(Z) dZ = 1 \quad (4.33)$$

Im finalen Schritt wird die Verdampfungsrate \dot{m}_{vap} der CFD-Zelle durch intervallweise Integration von $\tilde{P}_{norm}(Z)$ in die turbulenten Anteile $\dot{m}_{vap,i}$ zerlegt.

$$\dot{m}_{vap,i} = \dot{m}_{vap} \int_{Z_i}^{Z_{i+1}} Z \tilde{P}_{norm}(Z) dZ. \quad (4.34)$$

Die Intervallgrenzen Z_i im Mischungsbruchraum sind dabei vom Anwender zu Beginn der Rechnung vorzugeben. Damit sind die Raten $\dot{m}_{vap,i}$ des verdampften Kraftstoffs für die einzelnen Intervalle i im Mischungsbruchraum bestimmt.

Aufgrund des Mischungsbruch-Konzepts kann jedem Mischungsbruch Z im Z -Raum eine eindeutige Gemischzusammensetzung zugeordnet werden. Bei geeigneter Definition von Z repräsentiert Z den Kraftstoffmassenbruch y_{fuel} an der entsprechenden Stelle im Z -Raum. Durch die Massenbruch-Bilanz

$$y_{fuel} + y_{air,egr} = 1 \quad (4.35)$$

gelten somit für den Kraftstoffmassenbruch y_{fuel} und den Luft-AGR-Massenbruch $y_{air,egr}$ folgende beiden Beziehungen an der Stelle Z :

$$\begin{aligned} y_{fuel} &= Z \\ y_{air,egr} &= 1 - Z \end{aligned} \quad (4.36)$$

Mit dem mittleren Mischungsbruch $Z_{mid,i}$ eines Mischungsbruchsintervalls als Hilfsgröße

$$\begin{aligned} Z_{mid,i} &= \frac{Z_i + Z_{i+1}}{2} \\ y_{fuel,i} &= Z_{mid,i} \\ y_{air,egr,i} &= 1 - Z_{mid,i} \end{aligned} \quad (4.37)$$

kann nun zum verdampften Kraftstoffanteil $\dot{m}_{vap,i} \Delta t$ die äquivalente Luft-AGR-Masse $\dot{m}_{air,egr,i} \Delta t$ berechnet werden.

$$\begin{aligned} \dot{m}_i &= \dot{m}_{vap,i} + \dot{m}_{air,egr,i} \\ \dot{m}_i \Delta t &= \frac{\dot{m}_{vap,i} \Delta t}{y_{fuel,i}} \\ \dot{m}_{air,egr,i} \Delta t &= \dot{m}_i \Delta t y_{air,egr,i} \end{aligned} \quad (4.38)$$

Die Masse des i -ten HR erhöht sich dabei um $\dot{m}_i \Delta t$. Der Anteil der Luft-AGR-Masse wird dem ersten (oxidatorseitigen) HR₁ eines SR entnommen und über einen adiabaten Mischungsprozess dem Reaktor i zugeschlagen (siehe Abbildung 4.6).

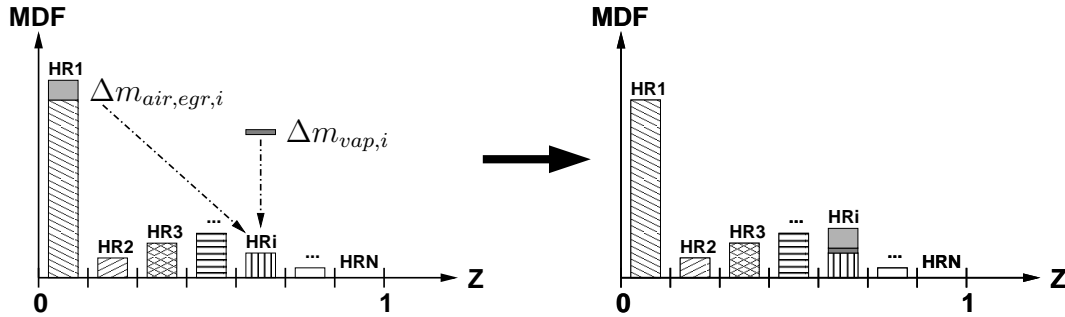


Abbildung 4.6: Schematischer Ablauf einer Verdampfungseinkopplung in Reaktor HR _{i}

Liegt keine Masse mehr im HR₁ vor, dann wird in HR _{i} die Einkopplung des verdampften Kraftstoffanteils $\dot{m}_{vap,i} \Delta t$ zwangsläufig ohne einen korrespondierenden Luft-AGR-Massenanteil durchgeführt. Die dadurch entstehenden Abweichungen vom vorgesehenen mittleren Mischungsbruch $Z_{mid,i}$ können als Folge der Überfettung interpretiert werden.

Wie Abbildung 4.6 anschaulich zeigt, hat beim Multi-SR-Ansatz der Verdampfungsprozess in zweifacher Hinsicht eine Umverteilung der Reaktormassen und demzufolge auch eine Umverteilung der Massendichtefunktion \mathcal{M} zur Folge: Zum einen erhöht sich die Masse einzelner HR (und folglich auch des zugehörigen SR) durch die Kraftstoffverdampfung, zum anderen ändern sich die Massenanteile durch die zusätzliche Beaufschlagung der HR _{i} mit einem Luft-AGR-Massenanteil aus dem HR₁. Drückt man diese Massenumverteilung durch die in Abschnitt 4.4.3 eingeführte Massengewichtung $w^{(n)}(t)$ aus und schreibt ihr eine zeitliche Abhängigkeit zu, so ergeben sich für den Verdampfungsprozess folgende Zusammenhänge:

$$\dot{m}_{air,egr} = \sum^{N_{neighbour}} \left[\sum_{i=1}^{N_{hr}} \dot{m}_{air,egr,i} \right] \quad (4.39)$$

$$w^{(i)}(t + \Delta t) = \begin{cases} w^{(i)}(t) + \sum^{N_{neighbour}} [\dot{m}_{vap,i} \Delta t] - \dot{m}_{air,egr} \Delta t & i = 1 \\ w^{(i)}(t) + \sum^{N_{neighbour}} [\dot{m}_{vap,i} \Delta t] + \sum^{N_{neighbour}} [\dot{m}_{air,egr,i} \Delta t] & i = 2, \dots, N_{hr} \end{cases}$$

$$\mathcal{M}(\underline{\Psi}; t) = \sum_{i=1}^{N_{hr}} w^{(i)}(t + \Delta t) \delta(\underline{\Psi} - \underline{\Psi}^{(i)}) \quad (4.40)$$

Auf Basis von Gleichung 4.40 werden im Falle von Dampfeinkopplung die Massen der HR eines SR umverteilt. Dies geschieht durch Reinitialisierung. Gleichzeitig wird auch unter Beachtung des adiabaten Mischungsprozesses die Reaktortemperatur und die Gemischzusammensetzung unter Berücksichtigung der Konservativität bez. Energie und Speziesmassen reinitialisiert. Analog zu Gleichung 4.34 wird auch die Rate der Verdampfungsenthalpie $\dot{h}_{vap,i}$ intervallweise berechnet

$$\dot{h}_{vap,i} = \dot{h}_{vap} \int_{Z_i}^{Z_{i+1}} Z \tilde{P}_{norm}(Z) dZ. \quad (4.41)$$

und in Form eines Senkenterms $\dot{S}_{evap,i}$ in Gleichung 4.52 für jeden HR berücksichtigt. Der Term \dot{h}_{vap} in Gleichung 4.41 repräsentiert dabei die Gesamtrate der Verdampfungsenthalpie innerhalb einer CFD-Zelle.

4.4.6 E: Kompression, Kinetik und Druckausgleich des SR-Systems

Das für die Kompression (s.u.: Schritt 1) und den Druckausgleich nach der Kinetikberechnung (s.u.: Schritt 3) notwendige Gesamtvolumen V_{cyl} wird in jedem Zeitschritt vom CFD-Code an den Multi-SR-Code übergeben. Auf diese Weise wird auch der in der CFD-Berechnung modellierte Effekt der Pleuelstauchung implizit im Multi-SR-Code berücksichtigt.

Der Ablauf der Berechnung Kompression, Kinetik und Druckausgleich innerhalb eines Zeitschrittes Δt besteht aus einer sequentiellen Abarbeitung der drei folgenden Teilschritte:

1. adiabate Kompression (bzw. Expansion) aller Reaktoren des Systems auf das neue Gesamtvolumen des Motors → Ermittlung der kompressiblen Volumenänderung der einzelnen Reaktoren
2. Berechnung der Kinetik in allen Einzelreaktoren (mit Berücksichtigung von Volumenänderungsarbeit, Wandwärmeübergang und Verdampfungsenthalpie)
3. adiabate Berechnung des neuen Gesamtdruckes des Systems nach der Wärmefreisetzung mit Anpassung der Einzelvolumina (Berücksichtigung von Volumenarbeit)

Der formelmäßige Berechnungsablauf ist im Wesentlichen an Aceves et al [42] angelehnt. Dort dient als Basis die ideale Gasgleichung und der erste Hauptsatz, die jeweils auf einen homogenen Reaktor i angewendet werden:

$$pV_i = n_i \mathfrak{R} T_i \quad (4.42)$$

$$Q_{kin,i} + Q_{wall,i} = n_i c_{v,i} \Delta T_i + p \Delta V_i \quad (4.43)$$

Dabei ist p der Druck, V_i das Volumen, n_i die Stoffmenge, T_i die Temperatur des Reaktors i und \mathfrak{R} die universelle Gaskonstante. Die Terme $Q_{kin,i}$ und $Q_{wall,i}$ stehen für die kinetisch freigesetzte Energie und die durch Wandwärmeübergang zu- oder abgegebene Energie. Die Berechnung von $Q_{kin,i}$ ergibt sich aus

$$Q_{kin,i} = \sum_{j=1}^{nsp} \dot{\omega}_{i,j} M_{i,j} u_{i,j} V_{i,j} \Delta t \quad (4.44)$$

mit der Anzahl der verwendeten Spezies nsp , dem Laufindex j für die einzelnen Spezies, der Reaktionsrate $\dot{\omega}_{i,j}$, der molaren Masse $M_{i,j}$, der spezifischen inneren Energie $u_{i,j}$ und dem Zeitschritt Δt . Der Wandwärmeübergangsterm $Q_{wall,i}$ kann z.B. mit dem Woschni-Modell (siehe Heywood [39]) abgebildet werden.

Des Weiteren gilt als Randbedingung, dass die Summe aller Einzelreaktoren dem Gesamtvolumen V_{cyl} des Brennraums zum jeweiligen Zeitpunkt entspricht.

$$\sum V_i = V_{cyl} \quad (4.45)$$

Nach Ende der Berechnung der Kinetik wird aus den thermodynamischen Daten aller Einzelreaktoren zuerst der neue Gesamtdruck p bestimmt. Die Konstanz des Druckes im Brennraum entspricht dabei in guter Näherung dem Verhalten eines realen Motors unter HCCI-Bedingungen.

$$p = \frac{\sum(Q_{kin,i} + Q_{wall,i}) \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0}\right) + \sum n_i c_{v,i} T_i^0 \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0}\right)}{V_{cyl} - \sum V_i^0 \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0}\right)} \quad (4.46)$$

Dabei bezeichnet γ_i^0 das Verhältnis der spezifischen Wärmekapazitäten $c_{p,i}$ und $c_{v,i}$. Anschließend werden die neuen Volumina berechnet, die sich beim Gesamtdruck p ergeben.

$$V_i = \frac{Q_{kin,i} + Q_{wall,i} + n_i c_{v,i} T_i^0 + p V_i^0}{p} \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0}\right) \quad (4.47)$$

Zuletzt kann mit Hilfe der idealen Gasgleichung die neue Temperatur in den jeweiligen homogenen Reaktoren des Systems berechnet werden.

$$T_i = \frac{p V_i}{n_i \mathfrak{R}} \quad (4.48)$$

Der Charme dieses Vorgehens von Aceves et al [42] liegt in der Tatsache, dass alle Operationen bez. des Gesamtsystems der Reaktoren mit analytischen Gleichungen gelöst werden können, ohne ein aufwändiges Gesamtgleichungssystem lösen zu müssen.

Es folgt nun die Übertragung dieses Vorgehens auf die drei zu Beginn des Abschnittes skizzierten Teilschritte.

Schritt 1: Adiabate Kompression (bzw. Expansion) des Gesamtsystems auf das neue Motorvolumen

Ziel dieses ersten Teilschrittes ist lediglich, der Energieerhaltungsgleichung und den Spezieserhaltungsgleichungen der jeweiligen homogenen Reaktoren in Schritt 2 die neuen Volumina V_i und Dichten ρ_i bereitzustellen. Der Berechnungsschritt erfolgt adiabatisch, und es wird der folgende Gleichungssatz auf die Gesamtheit aller im System vorkommenden homogenen Reaktoren unabhängig von ihrer Zugehörigkeit zu einem stochastischen Reaktor angewendet. Eine wichtige Eingabegröße ist das neue Gesamtvolumen des Brennraums V_{cyl} . Dieser Wert wird vom CFD-Code in den Multi-SR-Code eingekoppelt. Der Gesamtdruck p und die einzelnen Volumina V_i der homogenen Reaktoren des Systems berechnen sich dann wie folgt:

$$p = \frac{\sum n_i c_{v,i} T_i^0 \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0}\right)}{V_{cyl} - \sum V_i^0 \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0}\right)} \quad (4.49)$$

$$V_i = \frac{n_i c_{v,i} T_i^0 + p V_i^0}{p} \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0} \right) \quad (4.50)$$

Da dieser Schritt adiabat und inert erfolgt, entfallen die beiden Terme $Q_{kin,i}$ und $Q_{wall,i}$ (siehe Gleichungen 4.46 und 4.47). Die Temperatur nach der Kompression wird bewusst nicht berechnet. Sie wird implizit in der Energiegleichung von Schritt 2 durch den dortigen Term für Volumenänderungsarbeit $\frac{p}{V_i} \frac{\partial V_i}{\partial t}$ berücksichtigt.

Schritt 2: Berechnung der Kinetik (mit Berücksichtigung von Volumenänderungsarbeit, Wandwärmeübergang und Verdampfungsenthalpie)

In diesem Teilschritt werden unabhängig voneinander die einzelnen homogenen Reaktoren des Gesamtsystems in Bezug auf die Kinetik gelöst. Dafür werden in bekannter Art und Weise die Spezieserhaltungsgleichungen und die Energieerhaltungsgleichung gelöst.

$$\rho_i \frac{\partial y_{j,i}}{\partial t} = \dot{\omega} M_i \quad (4.51)$$

$$\rho_i c_{v,i} \frac{\partial T_i}{\partial t} = - \sum u_i \dot{\omega} M_i - \frac{p}{V_i} \frac{\partial V_i}{\partial t} + \dot{S}_{wall,i} + \dot{S}_{evap,i} \quad (4.52)$$

In der Energiegleichung für den jeweiligen Reaktor i steht der Quellterm $\dot{S}_{wall,i}$ für den Wandwärmeübergang (Berechnung siehe Schritt H) und der Senkenterm $\dot{S}_{evap,i}$ für die Verdampfungsenthalpie (Berechnung siehe Schritt D).

Schritt 3: Adiabate Berechnung des neuen Gesamtdruckes, der Volumina und der Temperaturen

Dieser finale Schritt eines Zeitschrittes kann als Druckausgleich zwischen den einzelnen homogenen Reaktoren bei konstantem Gesamtvolumen V_{cyl} angesehen werden. Dieser Teilschritt beginnt analog zu Teilschritt 1. Es werden aber zusätzlich auch explizit die Temperaturen der einzelnen homogenen Reaktoren berechnet, die sich nach dem Druckausgleich einstellen.

$$p = \frac{\sum n_i c_{v,i} T_i^0 \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0} \right)}{V_{cyl} - \sum V_i^0 \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0} \right)} \quad (4.53)$$

$$V_i = \frac{n_i c_{v,i} T_i^0 + p V_i^0}{p} \left(\frac{\gamma_i^0 - 1}{\gamma_i^0} \right) \quad (4.54)$$

$$T_i = \frac{p V_i}{n_i \mathfrak{R}} \quad (4.55)$$

Wie schon im ersten Teilschritt entfallen wegen der adiabaten und inerten Berechnung die Terme für die kinetisch freigesetzte Energie und für den Wandwärmeübergang, da diese beiden Effekte bereits in Schritt 2 berücksichtigt wurden.

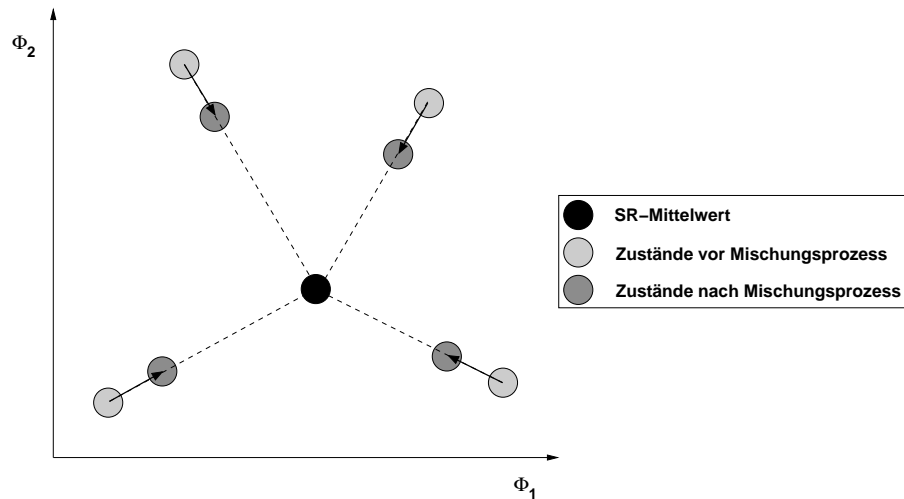


Abbildung 4.7: IEM-Mischungsprozess skizziert in einem 2-dimensionalen Zustandsraum für zwei Skalare Φ_1 und Φ_2 (ähnlich [57])

4.4.7 F: Mischungsprozess

Der Vorgang der turbulenten Mischung ist lokal auf jeden stochastischen Reaktor beschränkt. Im Rahmen dieser Arbeit wird das IEM-Modell verwendet. In Abbildung 4.7 ist dieses Modell für einen 2-dimensionalen Raum skizziert, in dem die Skalare Φ_1 und Φ_2 einem Mischungsprozess ausgesetzt sind. Trotz der bereits im Abschnitt 4.2.1 erwähnten Schwächen ist dieses Modell insbesondere wegen seiner einfachen Handhabung in Bezug auf die Implementierung und wegen seines geringen Rechenaufwands für anwendungsorientierte Simulations-Software das Modell der Wahl.

Das für die Mischungsmodellierung notwendige turbulente charakteristische Zeitmaß wird auf Basis des k - ϵ -Turbulenzmodells über Gleichung 4.21 bestimmt. Die darin auftretenden Terme für die turbulente kinetische Energie k und die turbulente Dissipationsrate ϵ ergeben sich durch Mittelung aus den Nachbarzellen eines SR.

Bei einem Mischungsprozess auf Basis des IEM-Modells ändern sich nur die skalaren Eigenschaften (Massenbrüche und Enthalpie) der beteiligten HR, nicht jedoch deren Masse [57]. Dies hat zur Folge, dass sich beim Multi-SR-Modell die HR-Massen lediglich durch die Dampfeinkopplung inklusive des entsprechenden Luft-AGR-Massenanteils (siehe Abschnitt 4.4.5) ändern.

4.4.8 G: Diffusion bzw. Stoffaustausch

Neben der Volumenänderungsarbeit ist innerhalb des vorgestellten Modells die Diffusion der einzige physikalische Effekt, der eine Interaktion zwischen den einzelnen stochastischen Reaktoren des Gesamtsystems gewährleistet. Die physikalische Grundlage dafür stellt das 2. Fick'sche Gesetz dar

$$\rho \frac{\partial y_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial y_i}{\partial x} \right) \quad (4.56)$$

mit dem Speziesmassenbruch y_i der Spezies i und dem Diffusionskoeffizienten D . Die Berücksichtigung der Diffusion hat für das Modell insofern eine entscheidende Bedeutung, als es

der einzige Prozess ist, welcher - abgesehen vom Verdampfungsprozess - einen räumlichen Stoffaustausch über die Systemgrenzen eines SR hinweg zulässt. Ansonsten könnte ein einmal global fett gewordener SR auch bei noch so mageren globalen Bedingungen im restlichen Brennraum nicht mehr ausmagern. Aus kinetischer Sicht muss die Modellierung der Diffusion zwischen den SR allerdings als kritisch angesehen werden, da das in Abschnitt 4.2.1 erwähnte Lokalisierungsprinzip wegen der möglicherweise größeren räumlichen Abstände der SR verletzt wird.

Da die stochastischen Reaktoren innerhalb des Gesamtmodells als punktförmige Massen angesehen werden und die Diffusion ein Prozess ist, dem eine räumliche Speziesverteilung mit entsprechenden Konzentrationsgradienten zugrunde liegt, ist ein räumlicher Diffusionsprozess innerhalb eines stochastischen Reaktors selbst ausgeschlossen. Diese spezielle Aufgabe übernimmt das verwendete Mischungsmodell. Stattdessen werden SR-Paare bestimmt, zwischen denen der Diffusionsprozess abläuft.

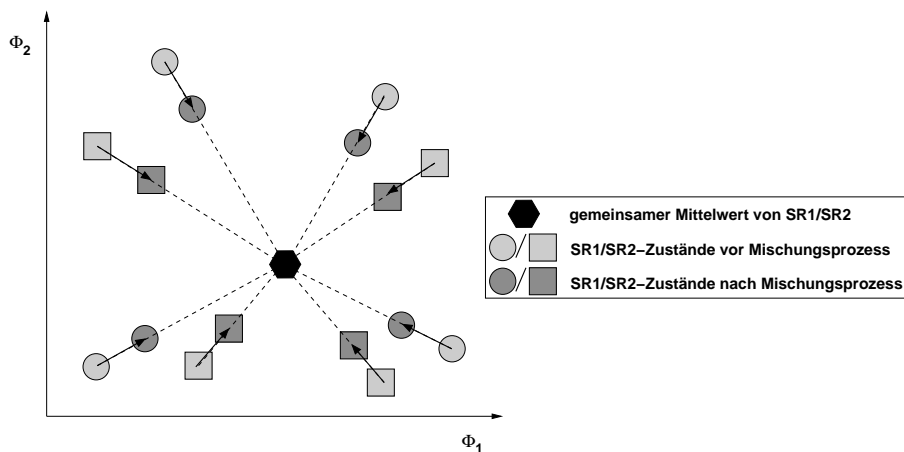


Abbildung 4.8: Modell zur Abbildung des Stoffaustauschs bei einem SR-Paar basierend auf einem IEM-Mischungsprozess

Im Laufe der Modellentwicklung hat sich jedoch herausgestellt, dass die Diffusion auf Basis von Gleichung 4.56 die Homogenisierung auf Ebene des gesamten SR-Systems zu langsam beschreibt. Als Folge hat sich eine im Vergleich zum CFD-Code zu geringe Ausmagerung der SR ergeben.

Zur Intensivierung des Stoffaustauschs zwischen den SR wird deshalb beim derzeitigen Stand des Modells ein Mischungsprozess basierend auf dem IEM-Mischungsmodell analog Abschnitt 4.4.7 verwendet. Dieser Mischungsprozess wird jeweils zwischen zwei SR durchgeführt (siehe Abbildung 4.8). Der Suchalgorithmus ist dabei so ausgelegt, dass bei den SR-Paarungen möglichst kleine Abstände zwischen den beiden SR auftreten, damit eine räumliche Nähe im Brennraum gewährleistet ist.

Somit erfahren die SR beim derzeitigen Stand des Multi-SR-Modells zwei Mischungsvorgänge: einen Mischungsprozess in sich (siehe Abschnitt 4.4.7) und einen weiteren Mischungsprozess mit dem nächstliegenden SR. Folglich stellt sich die Frage nach dem Umgang mit der Konstanten $C_0 = 2$ der Mischungsgleichung 4.20 des verwendeten IEM-Mischungsmodells. Um bei einer zweifachen Durchführung des Mischungsprozesses konsistent mit dieser Modellkonstanten zu sein, wurde deshalb in dieser Arbeit für jeden einzelnen Mischungsprozess nur der halbierte Wert verwendet, woraus sich eine abweichende Konstante $C_0^{MSR} = 1$ ergeben hat.

4.4.9 H: Wandwarmeubergang

Am Wandwarmeubergang nehmen nur diejenigen SR Teil, deren Nachbarzellen Wandkontakt (Zylinderwand, Brennraumdach oder Kolben) besitzen. Der integrale Wandwarmestrom eines SR $\dot{S}_{wall, sr}$ ergibt sich durch Aufintegration der Wandwarmestrome der entsprechenden CFD-Nachbarzellen mit Wandkontakt $N_{neighbour, wall}$.

$$\dot{S}_{wall, sr} = \sum_{k=1}^{N_{neighbour, wall}} \dot{S}_{wall, cfd, k} \quad (4.57)$$

Die Aufteilung des integralen Warmestroms eines SR auf die einzelnen HR erfolgt durch einen Gewichtungsprozess. Als Gewichtungsgroen gehen dabei die Temperatur T_i und die Masse m_i der einzelnen HR ein. Da die HR nur eine rein statistische Information ohne Ortsauflosung darstellen, scheidet eine Abstandsinformation fur die Gewichtung aus.

Normierungsgroen fur den Gewichtungsprozess sind die arithmetisch auf Basis der Anzahl der Reaktoren N_{hr} berechnete Temperatur \bar{T}_{hr} und Masse \bar{m}_{hr} .

$$\begin{aligned} \bar{T}_{hr} &= \frac{1}{N_{hr}} \sum_{i=1}^{N_{hr}} T_i \\ \bar{m}_{hr} &= \frac{1}{N_{hr}} \sum_{i=1}^{N_{hr}} m_i \end{aligned} \quad (4.58)$$

Die Gewichtung w_i der i HR stellt sich wie folgt dar:

$$\begin{aligned} w_{sum} &= \sum_{i=1}^{N_{hr}} \left(\frac{T_i}{\bar{T}_{hr}} \right) \left(\frac{m_i}{\bar{m}_{hr}} \right) \\ w_i &= \frac{\left(\frac{T_i}{\bar{T}_{hr}} \right) \left(\frac{m_i}{\bar{m}_{hr}} \right)}{w_{sum}} \end{aligned} \quad (4.59)$$

In Anlehnung an den Quell- bzw. Senkenterm $\dot{S}_{wall, i}$ in Gleichung 4.52 ergibt sich schlielich fur jeden HR der Wandwarmestrom zu

$$\dot{S}_{wall, i} = w_i \dot{S}_{wall, sr}. \quad (4.60)$$

4.4.10 I: Energie-Einkopplung in den CFD-Code mit vereinfachter Spezies-Umsetzung

Ziel der Energie-Einkopplung in den CFD-Code ist es, CFD-seitig in den Nachbarzellen ein Temperaturniveau einzustellen, welches zu dem des jeweiligen SR moglichst konsistent ist. Auf diese Weise soll insbesondere der Einfluss der durch die Verbrennung erhoheten Brennraumtemperaturen auf die Tropfenverdampfung, die Wandfilmverdampfung und den Wandwarmeubergang berucksichtigt werden. Dazu muss die innerhalb eines SR freigesetzte Energie adquat auf die Nachbarzellen verteilt werden.

Wie schon bei der Verteilung des CFD-Wandwarmeubergangs auf die SR (siehe Schritt H) wird eine Gewichtung eingefuhrt. Als Gewichtungsgroen werden die Zelltemperaturen T_k , die Zellmassen m_k und der Kraftstoffmassenbruch $y_{fuel, k}$ der Nachbarzellen k herangezogen. Durch arithmetische Mittelung mit der Anzahl der Nachbarzellen $N_{neighbour}$ werden zunachst die Mittelwerte \bar{T}^{cell} , \bar{m}^{cell} und \bar{y}_{fuel}^{cell} bestimmt.

$$\begin{aligned}
\bar{T}^{cell} &= \frac{1}{N_{neighbour}} \sum_{k=1}^{N_{neighbour}} T_k \\
\bar{m}^{cell} &= \frac{1}{N_{neighbour}} \sum_{k=1}^{N_{neighbour}} m_k \\
\bar{y}_{fuel}^{cell} &= \frac{1}{N_{neighbour}} \sum_{k=1}^{N_{neighbour}} y_{fuel,k}
\end{aligned} \tag{4.61}$$

Diese Mittelwerte werden bei der anschließenden Gewichtung für die Normierung verwendet.

$$\begin{aligned}
w_{sum} &= \sum_{k=1}^{N_{neighbour}} \left(\frac{T_k}{\bar{T}^{cell}} \right) \left(\frac{m_k}{\bar{m}^{cell}} \right) \left(\frac{y_{fuel,k}}{\bar{y}_{fuel}^{cell}} \right) \\
w_k &= \frac{\left(\frac{T_k}{\bar{T}^{cell}} \right) \left(\frac{m_k}{\bar{m}^{cell}} \right) \left(\frac{y_{fuel,k}}{\bar{y}_{fuel}^{cell}} \right)}{w_{sum}}
\end{aligned} \tag{4.62}$$

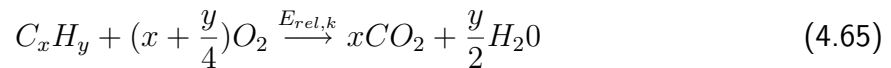
Mit dem Gewichtungsfaktor w_k wird dann der Anteil $\dot{e}_{rel,k}$ der Nachbarzelle k an der Energiefreisetzungsrates $\dot{e}_{rel,sr}$ des entsprechenden SR berechnet.

$$\dot{e}_{rel,k} = w_k \dot{e}_{rel,sr} \tag{4.63}$$

Innerhalb des Zeitschritts $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ wird folglich in einer Nachbarzelle k die Energiemenge $E_{rel,k}$ freigesetzt:

$$E_{rel,k} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \dot{e}_{rel,k} dt. \tag{4.64}$$

Wie schon beschrieben, liegt bei der Energie-Einkopplung in den CFD-Code der Fokus auf der Einstellung eines zum Multi-SR-Code korrelierenden Temperaturniveaus in den CFD-Zellen. Die Beschreibung der Kinetik innerhalb des CFD-Codes spielt dabei eine untergeordnete Rolle, da diese detailliert mit dem Multi-SR-Code beschrieben wird. Die Energiefreisetzung in den CFD-Zellen wird deshalb lediglich durch eine energieäquivalente Umsetzung von Kraftstoff und O_2 zu CO_2 und H_2O gemäß der folgenden molaren Bilanzgleichung umgesetzt.



Der verwendete Modellkraftstoff im CFD-Code wird durch $C_x H_y$ symbolisiert mit x als Anzahl der C -Atome und y als Anzahl der H -Atome.

4.4.11 Konzeptvergleich: Multi-SR / SR

Die grundsätzliche Modellierung eines SR (siehe Abschnitt 4.1.3) ist im SR-Ansatz wie im Multi-SR-Ansatz identisch. Im Multi-SR-Ansatz repräsentiert ein SR jedoch einen massenäquivalenten Bereich des Brennraums, weshalb jeder SR zusätzlich einen Ortsvektor erhält. Durch Konvektion ändert sich diese Ortskoordinate. Dadurch ist gewährleistet, dass über der Zeit die Zuordnung zum jeweiligen Repräsentationsbereich erhalten bleibt. Im Unterschied zum SR-Ansatz ermöglicht der Multi-SR-Ansatz wegen der Ortsdiskretisierung der SR auch die lokale Berücksichtigung der Verdampfung und des Wandwärmeeübergangs. Nicht zuletzt wird auch die turbulente charakteristische Zeitskala aus dem gemittelten Turbulenzfeld des Repräsentationsbereichs ermittelt.

4.4.12 Konzeptvergleich: Multi-SR / Transported-PDF

Wie auch das Multi-SR-Modell wird typischerweise auch das Transported-PDF-Modell in hybrider Form formuliert, d.h. es findet eine Kopplung zwischen einem 3d-CFD-Code und einem zweiten Code statt, der primär für die stochastische Modellierung der Chemie-Turbulenz-Interaktion zuständig ist. Im Folgenden werden beide Konzepte in Bezug auf die Partikelzahl, Diskretisierung, turbulente Mischung, Partikelbewegung, Diffusion, Druckverhalten und generelle Kopplung zwischen 3d-CFD- und Kinetik-Code miteinander verglichen.

In Abbildung 4.9 sind die Unterschiede in der Diskretisierung zwischen Transported-PDF-

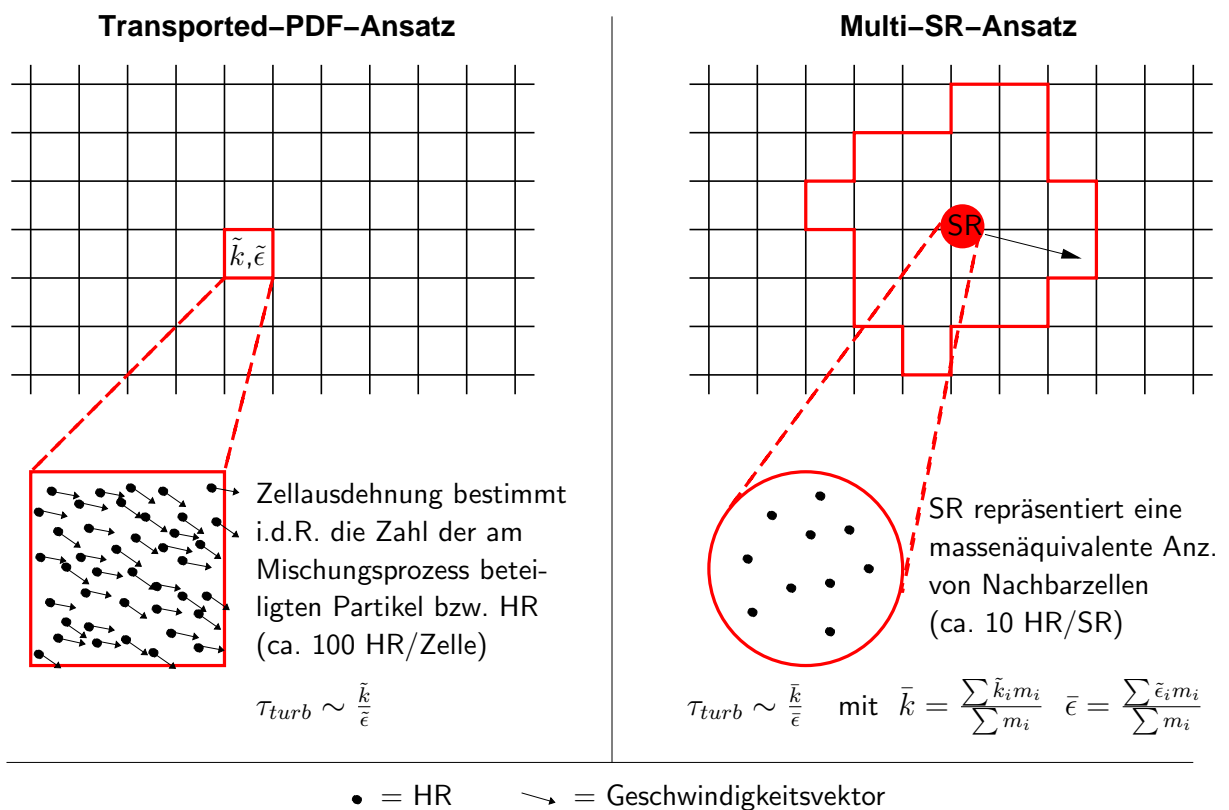


Abbildung 4.9: Vergleich der Diskretisierung und daraus resultierender Berechnung der charakteristischen Zeitskala τ_{turb} beim Transported PDF Ansatz (links) und beim Multi-SR-Ansatz (rechts)

Ansatz und Multi-SR-Ansatz dargestellt. Beim T-PDF-Ansatz (siehe Abbildung 4.9, links) gilt eine Zahl von 100 Partikel/CFD-Zelle als ein Richtwert [56, 57, 58] für die Minimierung des statistischen Fehlers. Daraus ergeben sich für motorische Berechnungen mit einer CFD-Zellzahl der Größenordnung 10^5 entsprechende Partikelzahlen in der Größenordnung 10^7 . Beim Multi-SR-Modell dagegen repräsentiert ein SR mehrere räumlich zusammenhängende CFD-Zellen (siehe Abbildung 4.9, rechts). Im Rahmen dieser Arbeit wurden für die motorischen Berechnungen 200 SR verwendet. Die turbulente Verteilung innerhalb der SR wurde mit je 10 HR aufgelöst. Es ergibt sich eine Gesamtzahl von 2000 HR, wobei ein HR im Multi-SR-Modell mit einem Partikel im T-PDF-Ansatz gleichzusetzen ist. Damit ist die Zahl der Partikel gegenüber

dem T-PDF-Ansatz bei gleicher Berechnungsproblematik um 4 Größenordnungen kleiner. Für den Mischungsprozess werden beim T-PDF-Ansatz zur Berechnung der turbulenten Zeitskala τ_{turb} direkt die reynoldsgemittelten Zellwerte für k und ϵ verwendet (siehe Abbildung 4.9, links). Aus Gründen der Konsistenz nehmen diejenigen Partikel am jeweiligen Mischungsprozess teil, die sich innerhalb der Zelle befinden und damit auf der stochastischen Ebene deren thermochemischen Zustand repräsentieren. Beim Multi-SR-Ansatz wird die turbulente Zeitskala aus den Nachbarzellen eines SR gemittelt (siehe Abbildung 4.9, rechts). Es ist an dieser Stelle bemerkenswert, dass das Multi-SR-Modell trotz der geringen Partikelzahl ($<$ Zellzahl des CFD-Codes) in der Lage ist, die Chemie-Turbulenz-Interaktion zu erfassen - wenn auch auf Basis gemittelter Turbulenzwerte und geringerer Auflösung des Brennraums bez. der Gemischverteilung. Würde man dagegen beim T-PDF-Ansatz die Zahl der Partikel auf die Zahl der CFD-Zellen reduzieren, läge nur noch eine rein laminare Behandlung der Kinetik vor, da die turbulente Gemischverteilung einer CFD-Zelle nicht mehr abgebildet werden könnte.

Abgesehen von der Ermittlung der turbulenten Zeitskala läuft der Mischungsprozess beim T-PDF-Ansatz und beim Multi-SR-Ansatz gleich ab.

Die konvektive Bewegung der SR-Partikel erfolgt beim Multi-SR-Ansatz rein auf Basis der gemittelten Geschwindigkeit derjenigen CFD-Zelle, in der sich das SR-Partikel aktuell befindet. Beim hybriden T-PDF-Ansatz dient ebenfalls die mittlere Zellgeschwindigkeit des CFD-Codes dazu, die konvektive Partikelbewegung zu berechnen [49, 57].

Eine unterschiedliche Philosophie weisen der Multi-SR-Ansatz und der T-PDF-Ansatz jedoch bei der Modellierung der Diffusion auf. Beim Multi-SR-Ansatz vollzieht sich diese im Skalarraum durch Interaktion der HR unterschiedlicher SR mit entsprechender Änderung der Gemischzusammensetzung der HR. Es finden jedoch keine Veränderungen im Ortsraum im Sinne von Bewegung der SR-Partikel statt. Beim T-PDF-Ansatz dagegen wird die Diffusion durch Verschiebung bzw. Umverteilung der Partikel im Ortsraum umgesetzt [57]. Numerische Grundlage für den Diffusionsprozess ist dabei die stochastische Lösung der Langevin-Gleichung [49]. Der skalare Raum eines jeden SR bleibt dabei im Unterschied zum Multi-SR-Ansatz unbeeinflusst.

Der Multi-SR-Ansatz hat nicht den Anspruch, mit der Verteilung der SR auch eine Druckverteilung abzubilden. Deshalb wird als letzter Berechnungsschritt nach erfolgter Kinetik-Berechnung ein Druckausgleich aller im SR-System befindlichen homogenen Reaktoren durchgeführt. Beim hybriden T-PDF-Ansatz ist der Druck keine Kopplungsgröße zwischen CFD-Code und T-PDF-Code. Lediglich die Druckgradienten werden aus der CFD-Rechnung benötigt. Somit liegt zwar im CFD-Code implizit das Druckfeld vor. Für die einzelnen Partikel im T-PDF-Code sind hingegen lediglich Masse, Temperatur und Gemischzusammensetzung bekannt. Folglich fehlt eine Bedingung (Volumen oder Dichte) zur Schließung der idealen Gasgleichung, um so auf den Druck des Partikels zu schließen. Indirekt kann jedoch der gemittelte Druck aller Partikel einer CFD-Zelle einfach bestimmt werden, da auf diese Weise ein definiertes Gesamtvolumen der betreffenden Partikel durch das Volumen der zugehörigen CFD-Zelle gegeben ist und damit die ideale Gasgleichung gelöst werden kann.

Thermodynamische Kopplungsgröße zwischen CFD-Code und T-PDF-Code beim hybriden T-PDF-Ansatz ist die Dichte [49, 57]. Sie ergibt sich aus der aufsummierten Masse der Partikel innerhalb einer CFD-Zelle bezogen auf deren Zellvolumen. Aus dem so veränderten Dichtefeld ergibt sich im CFD-Code ein neues Strömungsfeld, welches wiederum an den T-PDF-Code zur Bestimmung der konvektiven Bewegung der Partikel übergeben wird. Eine erheblich schwächere Kopplung liegt dagegen beim Multi-SR-Ansatz vor. Hier wird nur eine vereinfachte thermo-

chemische Einkopplung der Energie auf Basis einer stark vereinfachten Speziesumsetzung im CFD-Code durchgeführt. Beim Multi-SR-Ansatz ist der CFD-Code neben der Turbulenzinformation primär Lieferant für die Verdampfungsinformation und für den Wandwärmeübergang.

4.4.13 Stärken und Schwächen des Modells

Als Ergänzung zu Tabelle 4.1 dient Tabelle 4.3, in welcher die Beschreibung der grundlegenden physikalischen Effekte im Multi-SR-Modell bewertet wird.

	Multi-SR
Konvektion	+
Diffusion	o
WWÜ	+
turb. Mischung	+
Dimension	quasi 0d
# Reaktoren	$\gg 1$
Rechenaufwand	hoch

Tabelle 4.3: Bewertung des Multi-SR-Modells hinsichtlich der physikalischen Abbildungsqualität

Einer der wesentlichen Vorteile des Modells ist die Berücksichtigung von detaillierter Chemie in Form eines kinetischen Mechanismus in Kombination mit Turbulenz mit einem gegenüber dem Transported-PDF-Ansatz erheblich reduzierten Rechenaufwand. Des Weiteren werden alle relevanten physikalischen Vorgänge wie Konvektion, turbulente Mischung, Diffusion, Wandwärmeübergang und Volumenänderungsarbeit vom Gesamtkonzept, welches aus der interaktiven Kopplung zwischen CFD-Code und Multi-SR-Code besteht, abgebildet. Die interaktive Kopplung hat zudem analog zu den gekoppelten Multi-Zonen-Modellen den Vorteil, dass kein empirischer Transitionspunkt festgelegt werden muss (siehe Abschnitt 4.1.2). Auch eine empirische Aufteilung des Brennraums mit dem Beginn der Kinetik-Rechnung, wie es bei den entkoppelten Multi-Zonen-Modellen der Fall ist, entfällt. Das Gesamtkonzept zeichnet sich nicht zuletzt durch Konservativität bez. Masse und Energie aus.

4.4.14 Modelltechnische Verbesserungsmöglichkeiten

Beim Multi-SR-Ansatz liegt - abgesehen von der Modellierung des Stoffaustauschs zwischen den SR - nur noch ein begrenztes Optimierungspotential vor, da neben der Kinetik alle sonstigen relevanten physikalischen Prozesse (Konvektion, Wandwärmeübergang, Verdampfung) berücksichtigt werden. Der Stoffaustauschprozess zwischen den SR wird beim augenblicklichen Stand der Modellierung jedoch vereinfacht in Form eines Mischungsprozesses zwischen zwei jeweils nächstliegenden SR umgesetzt. Hier sollte das Modell dahingehend weiterentwickelt werden, dass der Stoffaustausch einen ausgeprägteren räumlichen Charakter erhält, indem z.B. die Zahl der lokal beteiligten SR erhöht wird. Weiteres Potential könnte sich durch eine

geeignete Berücksichtigung der unterschiedlichen Entfernungen der beteiligten SR zueinander ergeben. Durch die generelle Optimierung des Stoffaustausch könnten insbesondere auch Verbrennungsvorgänge mit erhöhtem Diffusionsverbrennungsanteil besser abgebildet werden.

Kapitel 5

3d-CFD-Simulation homogener Diesel-Brennverfahren

5.1 Grundgleichungen der 3d-Simulation

Die mathematische Beschreibung von strömungsmechanischen Problemstellungen erfolgt auf Basis von Transportgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Dieser Gleichungssatz ist hinlänglich unter dem Namen Navier-Stokes-Gleichungen bekannt und soll im Folgenden für turbulente kompressible Strömungen [116, 2] unter Berücksichtigung von Verbrennungsprozessen dargestellt werden.

Strömungsmechanische Transportgleichungen besitzen gemeinsame Grundelemente, die in einer allgemeinen Transportgleichung für die Fluideigenschaft ψ charakterisiert werden können.

$$\underbrace{\frac{\partial \rho \psi}{\partial t}}_{\text{zeitliche Änderung}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho \psi \vec{u})}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot [\rho \Gamma \nabla \psi]}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\sum_i \dot{Q}^i}_{\text{Quellterme}} \quad (5.1)$$

Dazu gehören die Terme für die zeitliche Änderung, die Konvektion, die Diffusion und der jeweiligen Transportgleichung angepasste Quellterme \dot{Q}^i .

In der Strömungsmechanik wird zwischen laminaren und turbulenten Strömungen unterschieden. Als laminar wird eine Strömung dann bezeichnet, wenn sie gleichmäßig ohne jegliche Störungen verläuft. Damit liegen bei einer stationären laminaren Strömung zu jedem Zeitpunkt an jedem Ort die gleichen Strömungsgrößen vor. Dies gilt sowohl für die Geschwindigkeit, als auch für skalare Größen wie z.B. Temperatur, Dichte oder Spezieskonzentrationen. Eine Strömung ist hingegen turbulent, wenn sie Fluktuationen aufweist, die durch kleinskalige Wirbel kombiniert mit Viskositätseffekten entstehen. Aus diesem Grund ist selbst eine stationäre turbulente Strömung durch Strömungsgrößen charakterisiert, die um einen zeitlichen Mittelwert schwanken.

Eine Transportgleichung gemäß Gleichung 5.1 hat einen rein deterministischen Charakter und ist demzufolge nicht in der Lage, die Statistik turbulenter Fluktuationen zu berücksichtigen. In den folgenden Abschnitten wird nun das Vorgehen beschrieben, wie der allgemeinen Transportgleichung 5.1 statistische Eigenschaften verliehen werden können, mit denen auch turbulente Fluktuationen der jeweiligen Zustandsvariablen ψ erfasst werden können.

Um eine turbulente Strömung mathematisch zu beschreiben, sind zwei Vorgehensweisen üblich.

Zum einen kann der Momentanwert ψ einer Strömungsgröße durch einen zeitlichen Mittelwert $\bar{\psi}$ und eine Schwankungsgröße ψ' beschrieben werden.

$$\psi = \bar{\psi} + \psi' \quad \text{mit} \quad \overline{\psi'} = 0 \quad (5.2)$$

Diese Art der Mittelung ist auch unter dem Namen Ensemble-Mittelung bekannt. Da bei Verbrennungsprozessen in der Regel große Dichteschwankungen auftreten können, bietet sich hier eine dichtegewichtete Mittelung (Favre-Mittelung) an.

$$\psi = \tilde{\psi} + \psi'' \quad \text{mit} \quad \tilde{\psi} = \frac{\overline{\rho\psi}}{\bar{\rho}} \quad \text{und} \quad \overline{\rho\psi''} = 0 \quad (5.3)$$

Wendet man die Favre-Mittelung auf die allgemeine Transportgleichung (5.1) an, so ergibt sich eine neue Transportgleichung, die zusätzlich einen turbulenten Transportterm enthält.

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{\psi}}{\partial t}}_{\text{zeitliche Änderung}} + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\psi}\tilde{\mathbf{u}})}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot [\bar{\rho}\Gamma\nabla\tilde{\psi}]}_{\text{molekularer Transport}} - \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\psi}''\tilde{\mathbf{u}}'')}_{\text{turbulenter Transport}} + \underbrace{\sum_i \bar{Q}^i}_{\text{Quellterme}} \quad (5.4)$$

Für den turbulenten Impulstransport $\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}''\tilde{\mathbf{u}}''$ z.B. ergibt sich für eine dreidimensionale Strömung der sogenannte *Reynolds'sche Spannungstensor*:

$$\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}''\tilde{\mathbf{u}}'' = \bar{\rho} \cdot \begin{pmatrix} \widetilde{u''^2} & \widetilde{u''v''} & \widetilde{u''w''} \\ \widetilde{v''u''} & \widetilde{v''^2} & \widetilde{v''w''} \\ \widetilde{w''u''} & \widetilde{w''v''} & \widetilde{w''^2} \end{pmatrix} \quad (5.5)$$

Generell entstehen durch die Favre-Mittelung in der jeweiligen Transportgleichung Zusatz-Terme der Form $\bar{\rho}\tilde{\psi}''\tilde{\mathbf{u}}''$, die durch einen entsprechenden Schließungsansatz modelliert werden müssen. In der Regel wird dazu ein dem laminaren Transportterm ähnlicher Gradientenansatz gewählt, dem ein Faktor μ_t vorangestellt wird, der die turbulente dynamische Viskosität (oder auch Wirbelviskosität) quantifiziert.

$$\bar{\rho}\tilde{\psi}''\tilde{\mathbf{u}}'' = -\mu_t \nabla \tilde{\psi} \quad (5.6)$$

Der Faktor μ_t wird dabei, wie in einem der nächsten Abschnitte beschrieben, auf Basis des turbulenten Zustands bestimmt.

Im Rahmen dieser Arbeit ist die Simulationssoftware KIVA [87] verwendet worden. Die darin verwendeten turbulenten Strömungsgleichungen basieren auf der zuvor beschriebenen dichtegewichteten Favre-Mittelung. In diesem Zusammenhang wird auch von den RANS (Reynolds averaged Navier Stokes)-Gleichungen gesprochen. Zur Schließung der turbulenten Transportterme wird in dieser Arbeit das aus zwei zusätzlichen Transportgleichungen bestehende k - ϵ -Turbulenzmodell eingesetzt. Alle folgenden Transportgleichungen werden dabei in differentieller und konservativer Form dargestellt.

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}) = \tilde{\rho}^s \quad (5.7)$$

mit dem Sprayquellterm $\tilde{\rho}^s$.

Speziesgleichung

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{y}_i) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{y}_i \right] + \tilde{\rho}_i^c + \tilde{\rho}_i^s \quad (5.8)$$

mit den beiden Quelltermen $\tilde{\rho}_i^c$ und $\tilde{\rho}_i^s$ für chemische Reaktion und Verdampfung der Spezies i .

Impulserhaltung

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{u}) = -\nabla \bar{p} - \frac{2}{3} \nabla (\bar{\rho} \tilde{k}) + \nabla \cdot \tilde{\sigma} + \tilde{F}^s \quad (5.9)$$

mit dem mittleren Spannungstensor $\tilde{\sigma}$ in "Newtonscher Form":

$$\tilde{\sigma} = \mu \left[\nabla \tilde{u} + (\nabla \tilde{u})^t \right] - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \tilde{u} \delta_{ij} \quad (5.10)$$

Thermische innere Energie

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{i}_{th}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{i}_{th}) = -\bar{p} \nabla \cdot \tilde{u} - \nabla \cdot \tilde{J} + \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \tilde{Q}^c + \tilde{Q}^s + \tilde{Q}^w \quad (5.11)$$

mit den Quelltermen \tilde{Q}^c , \tilde{Q}^s und \tilde{Q}^w für Kinetik, Verdampfung und Wandwärmeübergang. Der mittlere Wärmeflussvektor \tilde{J} setzt sich aus Wärmeleitung und Enthalpiediffusion zusammen (mit turbulenter Prandtl-Zahl Pr_t und turbulenter Schmidt-Zahl Sc_t):

$$\tilde{J} = -\frac{\mu \bar{c}_p}{Pr_t} \nabla \tilde{T} - \frac{\mu}{Sc_t} \sum_i h_i \nabla \tilde{y}_i \quad (5.12)$$

Turbulente kinetische Energie

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{k}) = -\frac{2}{3} \bar{\rho} \tilde{k} \nabla \cdot \tilde{u} + \tilde{\sigma} : \nabla \tilde{u} + \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Pr_k} \nabla \tilde{k} \right] - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \tilde{W}^s \quad (5.13)$$

mit der auf die turbulenten kinetischen Energie angepassten Prandtl-Zahl Pr_k und dem Sprayquellterm \tilde{W}^s .

Turbulente Dissipationsrate der kinetischen Energie

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\epsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{\epsilon}) = -\left(\frac{2}{3} c_{\epsilon_1} - c_{\epsilon_3} \right) \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \nabla \cdot \tilde{u} + \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Pr_\epsilon} \nabla \tilde{\epsilon} \right] + \frac{\tilde{\epsilon}}{k} \left[c_{\epsilon_1} \sigma : \nabla \tilde{u} - c_{\epsilon_2} \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + c_s \tilde{W}^s \right] \quad (5.14)$$

mit den Modellkonstanten c_{ϵ_1} , c_{ϵ_2} , c_{ϵ_3} , Pr_ϵ , c_s , dem Sprayquellterm \tilde{W}^s und der dynamischen Viskosität μ , die sich aus einem laminaren Anteil μ_l und einem turbulenten Anteil μ_t zusammensetzt:

$$\mu = \mu_l + \mu_t \quad (5.15)$$

Die laminare Viskosität wird über die Sutherland-Formel berechnet, während die turbulente Viskosität sich aus den Turbulenzgrößen ergibt:

$$\mu_l = \frac{A_1 T^{\frac{3}{2}}}{T + A_2} \quad \mu_t = c_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (5.16)$$

In Tabelle 5.1 ist sowohl der Standard-Konstantensatz des k - ϵ -Turbulenzmodells als auch der in dieser Arbeit verwendete Konstantensatz für die Turbulenzgleichungen aufgelistet. Er unterscheidet sich vom Standard-Konstantensatz in dem Wert für c_{ϵ_1} , welcher für ein realistischeres Ausbreitungsverhalten des Sprays angepasst wurde.

	c_μ	c_{ϵ_1}	c_{ϵ_2}	Pr_k	Pr_ϵ	c_s
Standard	0.09	1.44	1.92	1.0	1.3	-
modifiziert	0.09	1.52	1.92	1.0	1.3	1.5

Tabelle 5.1: Standard-Konstanten [87] und für die Spraymodellierung modifizierte Konstanten des k - ϵ -Turbulenzmodells.

Für Strömungen mit hohen Reynoldszahlen verläuft der turbulente Transport in der Regel viel schneller als laminare Transportprozesse, sodass $\mu \sim \mu_t$ gesetzt werden kann. Näherungsweise wird weiter angenommen, dass die Transportkoeffizienten für alle Spezies gleich sind. Für die turbulente Prandtl- und Schmidt-Zahl wird jeweils der Wert 0.9 vorgegeben. Als weitere Schließungsgleichung wird die thermische Zustandsgleichung für ein ideales Gas formuliert (mit \bar{M} als mittlerer molarer Masse des Gemischs und \mathfrak{R} als universeller Gaskonstante):

$$\bar{p} = \bar{\rho} \frac{\mathfrak{R}}{\bar{M}} \tilde{T} \quad (5.17)$$

Die letzte Schließungsbedingung ist durch die kalorische Zustandsgleichung gegeben, welche für ein ideales Gas die Form

$$\tilde{i}_{th} = \sum_{i=1} \tilde{y}_i \int_{\tilde{T}_0}^{\tilde{T}} \bar{c}_{v,i}(\tilde{T}) d\tilde{T} \quad (5.18)$$

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

$\tilde{\rho}^s$, \tilde{F}^s , $\tilde{\rho}_i^s$, \tilde{Q}^s und \tilde{W}^s repräsentieren Strahlquellterme, die in [87] bzw. [86] im Detail erläutert werden. Für die Ansätze zur Schließung der chemischen Quellterme $\tilde{\rho}_i^c$, \tilde{Q}^c und des Terms zur Modellierung des Wandwärmeeübergangs \tilde{Q}^w wird auf [72] verwiesen.

5.2 Modellierung der Einspritzung und Gemischbildung

Da bei aktuellen Brennverfahren durch die direkte Kraftstoffeinspritzung Gas- und Flüssigphasen parallel vorliegen, muss der Modellierung dieser sogenannten 2-phasigen Strömungen besondere Aufmerksamkeit gewidmet werden. Die Schwierigkeit besteht dabei insbesondere in der Kopplung bzw. Interaktion der beiden Phasen. Einerseits wird das Strömungsfeld massiv durch den Strahlimpuls und durch Ansaugeneffekte ins Strahlinnere (Entrainment) beeinflusst. Andererseits hängt das Eindring- und Verdampfungsverhalten des Kraftstoffstrahls bzw. der Flüssigkeitstropfen von der Strömung und den thermodynamischen Bedingungen (Dichte und Temperatur) im Brennraum ab. Entscheidend für die Qualität der Modellierung einer 2-phasigen Strömung ist somit die Kopplung der beiden Phasen hinsichtlich Massen-, Impuls- und Energieaustausch.

Ein wichtiger Effekt, der bei der Strahl-Modellierung neben der Verdampfung erfasst werden muss, ist der Strahl-Zerfall, der sich in einer Aufspaltung der Tropfen in immer kleinere Tropfen äußert. Für die detailliertere Beschreibung der physikalischen Prozesse, die während des Strahl-Zerfalls ablaufen, wird in der Regel zwischen Primär- und Sekundär-Zerfall unterschieden. Der Primär-Zerfall findet in unmittelbarer Nähe des Düsenlochs statt und wird durch innerhalb der Düse erzeugte Turbulenz und Kavitation dominiert. Weiter stromabwärts spielt der Sekundär-Zerfall eine immer größere Rolle, welcher durch eine Gasphasen-Interaktion geprägt ist. Man spricht in diesem Zusammenhang auch von aerodynamischem Zerfall, der zu einer Schwingungsanregung der Tropfen und schließlich zum Aufbruch führt. Ein anderer Effekt ist das Abscheren von kleineren Tropfen durch hohe Relativgeschwindigkeiten zwischen den Tropfen und der Gasphase. Weitere Effekte, die einen Sekundär-Zerfall auslösen können, werden zum Beispiel von Krüger [86] beschrieben. In Gebieten mit einer sehr hohen Tropfendichte (insbesondere in der Nähe des Düsenlochs), kann auch ein Tropfenzerfall durch Kollision auftreten. Vereinigen sich dagegen mehrere Tropfen zu einem Einzeltropfen, spricht man von Koaleszenz. Nicht zu vergessen sind auch Wandinteraktionseffekte.

Für die Simulation einer 2-phasigen Strömung sollten bei der Modellierung neben der Tropfenbewegung und -verdampfung möglichst viele der beschriebenen Zerfalls-Effekte (wie auch die Wandinteraktion) mit erfasst werden. Damit ist ein komplexes Modellierungsproblem gegeben. Da die deterministische Modellierung von Millionen Einzeltropfen in einem mindestens 8-dimensionalen Raum mit 3 Ortskoordinaten \vec{x} , 3 Geschwindigkeitsvektoren \vec{u} , Tropfenradius r_{tr} und Tropfentemperatur T_{tr} (weitere mögliche Freiheitsgrade: Tropfendeformation und Deformationsgeschwindigkeit) mit vertretbarem Rechenaufwand nicht zu lösen ist, wird einer statistischen Beschreibung der Vorzug gegeben. Die Statistik ist durch eine Wahrscheinlichkeitsverteilung ψ

$$\psi(\vec{x}, \vec{u}_{tr}, r_{tr}, T_{tr}, t) = \frac{d^8 N}{dx^3 du_{tr}^3 dr_{tr} dT_{tr}} \quad (5.19)$$

beschrieben, in der N für die Tropfenanzahl steht. Für die Entwicklung dieser Wahrscheinlichkeitsverteilung hat Williams [85] die sogenannte "spray equation" vorgeschlagen:

$$\frac{\delta\psi}{\delta t} + \nabla_{\vec{x}} \cdot (\psi \vec{u}_{tr}) + \nabla_{\vec{u}_{tr}} \cdot (\psi \vec{F}) + \frac{\delta(\psi R_{tr})}{\delta r_{tr}} + \frac{\delta(\psi \dot{T}_{tr})}{\delta T_{tr}} = \dot{\psi}_{bre} + \dot{\psi}_{col} \quad (5.20)$$

Darin bedeuten \vec{F} die Widerstandskraft und R_{tr} bzw. \dot{T}_{tr} die zeitliche Änderung von Tropfenradius und Tropfentemperatur. Auf der rechten Seite der Gleichung finden sich die

Quellterme \dot{f}_{bre} bzw. \dot{f}_{col} für den Tropfenzerfall bzw. die Tropfenkollision.

5.2.1 Discrete-Droplet-Modell (DDM)

Da auch Gleichung 5.20 wegen der Vieldimensionalität mit konventionellen Lösungsverfahren nur mit immensum Aufwand berechenbar ist, wird die Transportgleichung unter Verwendung von Partikeln auf Basis eines Monte-Carlo-Verfahrens simuliert. Damit geht die zunächst statistische Beschreibung der Tropfeneigenschaften in eine stochastische Beschreibung über. Jedes Partikel steht dabei für eine gewisse Anzahl von Tropfen mit gleichen Eigenschaften. Damit reduziert sich der Rechenaufwand von der Anzahl der Tropfen auf die Anzahl der Partikel. Diese Art der Strahl-Modellierung wird auch als stochastisches Strahlmodell bzw. als Discrete-Droplet-Modell (DDM) bezeichnet. Dabei handelt es sich um eine Lagrange'sche Formulierung des Problems.

Bekanntermaßen besitzt das Discrete-Droplet-Modell schwerwiegende numerische Schwächen [86]. Dazu gehören u.a.:

- Starke Abhängigkeit von Auflösung des Rechennetzes
- Starke Abhängigkeit von Orientierung des Strahls zum Rechennetz

Mit der Abhängigkeit von der Netzauflösung ist direkt das problematische Konvergenzverhalten verbunden. Da die Lagrange'sche Formulierung den Einsatz von Partikeln notwendig macht, ist die Güte der Beschreibung direkt von der Anzahl der Partikel je Zelle abhängig. Wird bei gleichbleibender Partikelzahl das Netz verfeinert, so verschlechtert sich entsprechend die Auflösung der Flüssigphase. Das damit verbundene schlechte Konvergenzverhalten des Discrete-Droplet-Modells ist von Krüger [86] numerisch nachgewiesen worden. Hinzu kommt, dass insbesondere im Düsenbereich mit extremen Geschwindigkeitsgradienten zwischen dem dichten Einspritzstrahl und der umgebenden Gasphase bei üblicher Netzauflösung des Brennraums die Austauschprozesse zwischen Flüssig- und Gasphase wegen der numerisch stark fehlerbehafteten Berechnung der Relativgeschwindigkeit falsch beschrieben werden. Diesen Effekt wie auch den Einfluss der Orientierung des Strahls zum Rechennetz zeigt Abbildung 5.1.

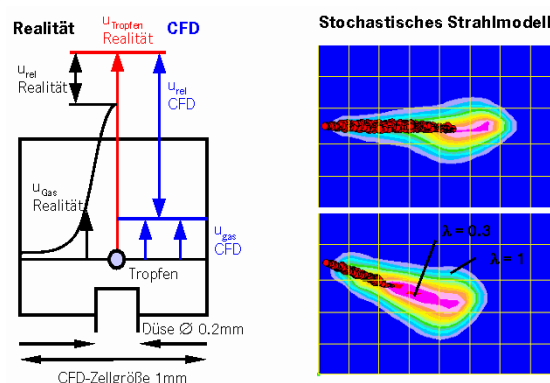


Abbildung 5.1: Numerische Probleme bei Anwendung des DDM-Modells: Berechnung der falschen Relativgeschwindigkeit und Einfluss der numerischen Diffusion bei unterschiedlicher Strahlorientierung zum Netz.

5.2.2 Interactive-Cross-Section-Averaged-Spray (ICAS)-Modell

Mit dem Ziel der Vermeidung der immanenten Probleme des zuvor beschriebenen Discrete-Droplet-Modells hat Krüger [86] auf Basis des von Wan und Peters [119, 120] entwickelten 1d-Strahlmodells als Erweiterung das ICAS-Modell vorgestellt. Anstelle der stochastischen Beschreibung gemäß dem Discrete-Droplet-Modell wird beim ICAS-Modell eine statistische Beschreibung herangezogen. Hierzu werden aus der Spray-Equation 5.20 Bilanzgleichungen für gemittelte Strahleigenschaften (Momentengleichungen) wie z.B. Tropfendurchmesser und Tropfentemperatur abgeleitet. Durch Integration dieser Bilanzgleichungen über den Strahlquerschnitt wird der Strahl auf eine Dimension reduziert. Das Berechnungsgebiet besteht folglich nur noch aus der 1-dimensional abgebildeten Strahlachse. Insbesondere im Düsenbereich ist diese Annahme wegen des dort dichten Strahls gerechtfertigt. Diese Euler'sche Formulierung hat den entscheidenden Vorteil, dass die statistische Verteilung der Sprayeigenschaften durch eine konstante Anzahl von Klassen wiedergegeben wird und damit die numerische Abbildung des Strahls bzw. das Konvergenzverhalten nur noch von der vorzugebenden Anzahl der Klassen abhängt. Die Einkopplung bzw. Verteilung der Strahleigenschaften über den Profilquerschnitt in den 3d-Code erfolgt durch entsprechende Profilvorgaben.

Da der 1d-Charakter des Einspritzstrahls jedoch nur im Düsenbereich Gültigkeit besitzt, wird ab einer vordefinierten Distanz zum Einspritzloch in das bereits beschriebene Discrete-Droplet-Modell eingekoppelt. Dieses Vorgehen ist in Abbildung 5.2 dargestellt.

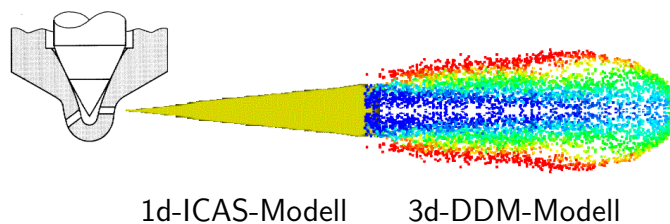


Abbildung 5.2: Kopplung des ICAS-Modells mit dem DDM-Modell.

Die Einkopplung erfolgt konservativ und ist notwendig, um 3-dimensionale Effekte wie z.B. Randwirbel oder den Einfluss der Nachlaufströmung auf einen Einspritzstrahl geeignet auflösen zu können.

Dieses Modellierungskonzept ist Standard in der DC-Forschung und wird auch im Rahmen dieser Arbeit eingesetzt.

5.2.3 Strahladaptive Vernetzung

Um auch in der 3d-Gasphase das strahlinduzierte Geschwindigkeitsprofil abbilden zu können, ist eine strahladaptive Vernetzung im düsenahen Bereich des Einspritzstrahls unumgänglich. Eine entsprechende Vernetzungs- bzw. Netzbewegungsstrategie wurde von Michels [123] vorgestellt und ist in Abbildung 5.3 a) bis c) dargestellt.

Wie der Bilderserie zu entnehmen ist, wird der strahladaptive Netzbereich während der Einspritzung fixiert. Nach Beendigung des Einspritzvorgangs wird der adaptive Bereich wieder

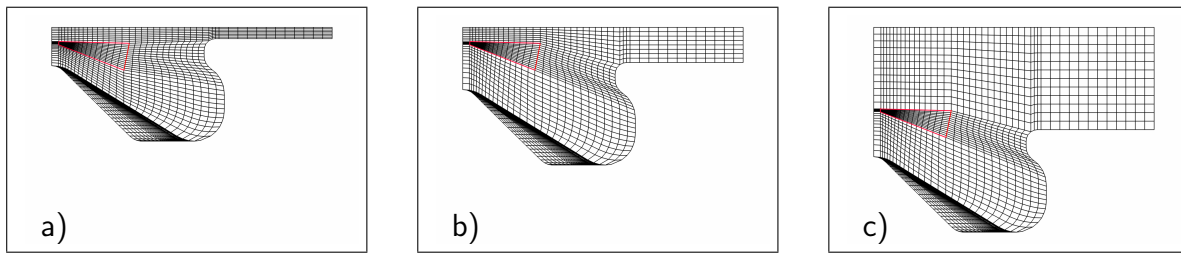


Abbildung 5.3: Adaptive Netzbewegung (adaptiver Netzbereich rot umrandet) für eine beispielhafte Einspritzung mit Spritzbeginn im OT und einer Spritzdauer von 20° KW: a) OT (adaptiver Bereich fixiert, Spritzbeginn); b) 20° KW nOT (adaptiver Bereich fixiert, Spritzende); c) 40° KW nOT (adaptiver Bereich freigegeben)

vertikal freigegeben, um zu große Netzverzerrungen zu vermeiden. Diese Netzbewegungsstrategie wird in der DC-Forschung wie auch in dieser Arbeit standardmäßig verwendet.

5.3 Diskussion bekannter Simulationsmodelle hinsichtlich der industriellen Applikation auf dieselmotorische HCCI-Brennverfahren

Dieses Unterkapitel hat zum Ziel, bereits bekannte Zünd- und Verbrennungsmodelle hinsichtlich ihrer Tauglichkeit zur Simulation von Diesel-HCCI-Brennverfahren zu bewerten. Nach einer anfänglichen tabellarischen Übersicht werden die Modelle und ihre Besonderheiten im Detail beschrieben. Zunächst sollen der Aufbau der Tabellen 5.4 und 5.5 sowie die verwendeten Kriterien erläutert werden.

Die bewerteten Modelle sind innerhalb von Tabelle 5.4 in drei Gruppen gegliedert: reine Zündmodelle, reine Verbrennungsmodelle und Modelle, die Zündung und Verbrennung gleichermaßen beinhalten. Die Kriterien wiederum sind gruppiert in "Konzept", "Chemie", "Reaktionsbeschreibung", "Chemie-Turbulenz-Interaktion", "Spray-Interaktion" und "Weitere Modelleigenschaften".

Im Bereich "Konzept" wird zum einen die *Zündung* klassifiziert. Hier wird unterschieden zwischen der *Einstufen-Zündung* und der *Mehrstufen-Zündung*, womit insbesondere die Cool-Flame-Zündung gemeint ist. Das Kriterium *Wärmefreisetzung* gibt an, ob das Zündmodell die Energiefreisetzung während der Zündphase berücksichtigt. Zuletzt wird das *Kriterium für die Verbrennungsaktivierung* aufgeführt, womit das Umschaltkriterium vom Zünd- auf das Verbrennungsmodell gemeint ist. Unter dem Begriff *Verbrennung* sind die gängigen Verbrennungstypen *Vormischverbrennung*, *Diffusionsverbrennung* und *Flammenfrontausbreitung* aufgeführt. In welcher Form dem Modell die Chemie im Sinne von Reaktionsgleichungen hinterlegt ist, wird unter der Rubrik "Chemie" abgehandelt. Hier wird unterschieden zwischen *Phänomenologisch*, *Reduziert* und *Detailliert*.

Nicht zu verwechseln mit dem Bereich "Chemie" ist der Bereich der "Reaktionsbeschreibung". Hierunter soll die Behandlung des Reaktionsfortschritts im Modell verstanden werden. Dies kann einerseits in Form einer oder mehrerer *Progress-Variablen* oder aber durch einen *Direkten Transport* der Spezies der verwendeten Kinetik (siehe "Chemie") geschehen. Häufig wird

insbesondere in den (Progress)-Modellen auch eine *Library* verwendet, in der in Abhängigkeit diverser Parameter die Raten für die jeweilige *Progress-Variable* hinterlegt sind.

Eine wichtige Rolle zur Beschreibung chemischer Verbrennungsprozesse in turbulenten Strömungen spielt die "Chemie-Turbulenz-Interaktion". In einfachen Modellen wird nur der *Mittelwert* (bezüglich Gemischzusammensetzung und Temperatur) einer CFD-Zelle als Ausgangsparameter zur Berechnung der Stoffumsetzung und Energiefreisetzung verwendet. In aufwendigeren Modellen wird die *Turbulente Speziesverteilung* oder zumindest die *Turbulente Gemischverteilung* berücksichtigt. Bei starker Turbulenz erfährt die Flamme eine Auffaltung und damit eine *Streckung* in der Verbrennungszone, welche im Extremfall zur Löschung der Flamme führen kann. Einige Verbrennungsmodelle verwenden zur Berücksichtigung des Turbulenzeinflusses auf die Kinetik auch die *Turbulente Zeitskala*. Dies ist ein Zeitmaß zur Geschwindigkeitsregulierung der chemischen Reaktion in Abhängigkeit der Turbulenz. Üblicherweise wird dieses Zeitmaß aus der kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ϵ des k - ϵ -Turbulenzmodells berechnet.

Das einzige Kriterium für die "Spray-Interaktion" ist der *Verdampfungsquellterm*. Hiermit ist in strengem Sinne ein Verdampfungsquellterm gemeint, der explizit im jeweiligen Modell auftaucht, um den direkten Einfluss des Verdampfungsprozesses auf die Zündung- bzw. Verbrennungsmodellierung zu beschreiben.

Unter der Rubrik "Weitere Modelleigenschaften" fällt zum einen die *Eignung für Mehrfacheinspritzung*. Damit kommt die Fähigkeit der Modelle zum Ausdruck, auch zeitlich und räumlich verteilte Einspritz- und Gemischbildungsvorgänge aus Sicht der chemischen Umsetzung korrekt zu beschreiben. Letztes Bewertungskriterium ist die *Oxidatortemperatur*. Sie wird in der Regel bei Konzepten mit Berücksichtigung der *Turbulenten Gemischverteilung* (s.o.) verwendet bzw. benötigt, um die oxidatorseitige Temperatur zu quantifizieren.

In Tabelle 5.5 werden etwas detaillierter die einzelnen Modelle auf typische Tuningmöglichkeiten und auf Anwendungsbeispiele hin beschrieben. Wichtige Bemerkungen komplettieren die Tabelle.

Das in etlichen Modellen für die Chemie-Turbulenz-Interaktion verwendete Mischungsbruch-Konzept in Verbindung mit dem "Presumed PDF"-Ansatz kann im Anhang A nachvollzogen werden. Entsprechende Verweise finden sich in den betreffenden Modellbeschreibungen.

5.3.1 Zündmodellierung

Eingleichungsmodelle

Die Eingleichungsmodelle zur Modellierung der Zündung beruhen auf Arrhenius-Ansätzen. Zur Anpassung der Koeffizienten dienen dabei experimentelle Ergebnisse, weshalb diese Modelle auch zur Rubrik der phänomenologischen Modelle gezählt werden. Von Spadaccini [110] oder Wolfer [111] wurden experimentell die Zündverzugszeiten von diversen Kraftstoffen gemessen und anschließend in Form von Arrhenius-Ansätzen mathematisch beschrieben.

Da generell die exponentielle Beschreibung der Arrhenius-Ansätze nur einen rein monoton steigenden Verlauf zulässt, ist dieser Modellierungsansatz für die Beschreibung einer zweistufigen Zündung mit Cool-Flame nicht geeignet. Dieser typische Zündverlauf einer HCCI-Verbrennung ist damit nicht abbildbar.

Modell	Zündung				Verbrennung				Zündung und Verbrennung					
	Eingleichungs-Modelle	Shell-Modell	IFP-Modell	Streule-Modell	EBU-Modell	Mixing-Timescale-Modell	7-Spezies-PDF-Timescale-Modell	ECFM-3Z-Modell	ERC-CHEMKIN-Modell	Schreiber-Modell	Flamelet-Modell	PDF-Timescale-Modell	Transported-PDF-Modell	CMC-Modell
Konzept:														
Zündung	X	X	X	X					X	X	X	X	X	X
• Einstufen-Zündung	X			X										
• Mehrstufen-Zündung (Cool Flame)		X	X						X	X	X	X	X	X
• Wärmefreisetzung		X	X						X	X	X	X	X	X
• Kriterium für Verbrennungsakt.	X	X ¹	X ²	X ³										
Verbrennung					X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
• Vormischverbrennung					X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
• Diffusionsverbrennung					X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
• Flammenfrontausbreitung								X						
Chemie:														
Phänomenologisch	X	X								X				
Reduziert					X ⁵	7-Spez.	7-Spez.	12-Spez.						
Detailliert			X	X							X	X	X	X
Reaktionsbeschreibung:														
Progress			X	X										
Library			X	X							X	X	X	X
Direkter Transport	X	X			X	X	X	X	X	X	X	X	X	X
Chemie-Turbulenz-Interaktion:														
Mittelwert	X	X	X	X ⁴	X	X	X	X	X	X				
Turbulente Speziesverteilung							X ⁶						X	X
Turbulente Gemischverteilung													X	X
Streckung (Löschung)													X	X
Turbulente Zeitskala					X	X		X ⁷	X					
Weitere Modell-Eigenschaften:														
Eignung für Mehrfacheinspritzung	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X	X ⁸	X	X	X
Oxidatortemperatur														X

Abbildung 5.4: Differenzierung diverser Zünd- und Verbrennungsmodelle.

	Typisches Tuning	Anwendungsbeispiel	Bemerkungen
CMC-Modell	Skalare Dissipationsrate	Dieselerbrennung	sehr hoher Rechenaufwand, Chemie geschlossen
Transported-PDF-Modell	Wahl der Mischungsmodelle	Diesel-, Otto- und HCCI-Verbrennung	sehr hoher Rechenaufwand, Chemie geschlossen, Modellierung der turbulenten Mischung herausfordernd
PDF-Timescale-Modell	Modellkonstante A_{prem} zur Anpassung der Vormischverbrennung	Diesel-Verbrennung	Vormischverbrennung muss getunt werden, Reaktionsraten auf Basis einer stationären Flamelet-Library
Flamelet-Modell	Skalare Dissipationsrate	Diesel-Verbrennung, (HCCI eingeschränkt, da Bedingung nicht erfüllt)	mehrere unterschiedliche Modellierungskonzepte hinsichtlich der Flamelet-Repräsentation des Brennraums
Schreiber-Modell	Diverse Modellkonstanten	Diesel-, Otto- und HCCI-Verbrennung	laminare Modell, für Anwendung bei Turbulenz Tuning über Modellkonstanten erforderlich
ERC-CHEMKIN-Modell	-	HCCI-Verbrennung	Chemie-Turbulenz-Interaktion nicht modelliert, hoher Rechenaufwand
ECFM-3Z-Modell	Modellkonstante für Mischung	Diesel-, Otto- und HCCI-Verbrennung	3 Zonen, keine Varianzgleichung für Mischung
7-Spezies-PDF-Timescale-Modell	Modellkonstante A_{prem} zur Anpassung der Vormischverbrennung	Diesel-Verbrennung	Vormischverbrennung muss getunt werden, Reaktionsraten auf Basis turbulenter Gemischverteilung
Mixing-Timescale-Modell	Modellkonstante A_{prem} zur Anpassung der Vormischverbrennung	Diesel-Verbrennung	Vormischverbrennung muss getunt werden, Mittelwertmodell
EBU-Modell	Modellkonstante C_{EBU}	Diesel-Verbrennung	keine Vormischverbrennung, rein mischungskontrolliert
Streule-Modell	Thermisches Zündkriterium, Verbrennungsmodell	Diesel-Zündung	für turbulente Zündung geeignet wegen Berücksichtigung von PDF(Z) und T(Z) für Quelltermberechnung
IFP-Modell	Modellkonstante für Mischung (siehe ECFM-3Z-Modell)	Diesel-Zündung, HCCI-Zündung	lamin. Modell, für turb. Zündung nur mit Konstanten-Tuning anwendbar
Shell-Modell	Parameteranpassung für verschiedene Kraftstoffe notwendig	Klopfmodellierung im Ottomotor	lamin. Modell, für turb. Zündung nur mit Konstanten-Tuning anwendbar
Eingleichungs-Modelle	Arrheniuskonstanten	Diesel-Zündung	lamin. Modelle, für turb. Zündung nur mit Konstanten-Tuning anwendbar

¹: thermisches Zündkriterium

²: Zündverzugszeit

³: Massenbruchgrenzwert (0.02) der Indikatorspezies CO

⁴: vereinfachte Annahme einer im Mischungsbruchraum konstanten Progressvariablen

⁵: Kraftstoff, O₂, Produkte

⁶: thermochemisches GGW

⁷: turbulente Zeitskala für Mischungsprozess der einzelnen Modell-Zonen

⁸: gilt nicht bei Repräsentation des Brennraums durch ein einzelnes Flamelet (z.B. RIF-Konzept)

Abbildung 5.5: Tuning-Möglichkeiten und Anwendungsbeispiele der Modelle von Abbildung 5.4.

Shell-Modell (3-Schritt-Mechanismus)

Phänomenologische Mehrschritt-Mechanismen sind eine rein mathematische Beschreibung der Chemie auf Basis eines Gleichungssystems mit diversen Koeffizienten. Die Gleichungen selbst haben dabei keine chemische bzw. physikalische Grundlage. Folglich müssen die Koeffizienten an experimentelle Daten bzw. an die Ergebnisse von detaillierten Mechanismen angepasst werden. Den einzelnen Gleichungen werden üblicherweise Gruppen von Spezies mit ähnlichem Reaktionsverhalten zugeordnet.

Der bekannteste Vertreter zur Modellierung der Zündung ist das Shell-Modell [113], welches auf 3 Gleichungen beruht. Diese sind nur für die Beschreibung der Niedertemperaturkinetik bestimmt. Die generelle Schwäche von Mehr-Schritt-Modellen besteht in der Tatsache, dass für die Koeffizienten eine problemspezifische Anpassung (Kraftstoff, Brennverfahren und Lastpunkt) erforderlich ist. Eine generelle Anwendung des Modells ist damit nicht möglich. Dennoch kann bei geeigneter Wahl der Parameter auch das mehrstufige Zündverhalten von HCCI-Brennverfahren abgebildet werden.

IFP-Modell

Ein Zündmodell, welches in der Lage ist, sowohl Cool-Flame-Zündungen als auch Hot-Flame-Zündungen abzubilden, wird von Pires da Cruz [83] vorgestellt. Voraussetzung des Modells ist eine Unterteilung der CFD-Zellen in jeweils drei Zonen: eine reine Kraftstoff-Zone, eine Zone bestehend aus Luft bzw. Restgas und eine gemischte Zone (siehe auch ECFM3Z-Modell in Abschnitt 5.3.2). Das Zündmodell wird dabei nur in der gemischten Zone appliziert.

Kern des Modells ist die Progressvariable \tilde{Y}_I , welche über die Gleichung

$$\frac{\delta \bar{\rho} \tilde{Y}_I}{\delta t} + \frac{\delta}{\delta x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_I) = \frac{\delta}{\delta x_i} \left(\bar{\rho} D_t \frac{\delta \tilde{Y}_I}{\delta x_i} \right) + \bar{\omega}_I \quad (5.21)$$

konvektiv und diffusiv transportiert wird. Dabei wird der Quellterm $\bar{\omega}_I$ in folgender Weise gebildet:

$$\bar{\omega}_I = \bar{\rho} \tilde{Y}_{T,Fu} F(\tau_d) \quad (5.22)$$

Die Variable $\tilde{Y}_{T,Fu}$ entspricht dabei dem inerten Kraftstoffmassenbruch (passiv), welcher zu jedem Zeitpunkt der Rechnung in der schon zu Beginn des Abschnitts erwähnten gemischten Zone einer CFD-Zelle bekannt ist. Dieser inerte Kraftstoffmassenbruch besitzt die Eigenschaften eines Mischungsbruchs (siehe Anhang A), da die Transportgleichung nur einen Verdampfungsquellterm, jedoch keinen Senkenterm hinsichtlich Verbrennung enthält. $F(\tau_d)$ ist eine Ansatzfunktion mit der Zündverzugszeit τ_d als Parameter. Dabei ergibt sich τ_d aus einer Tabelle, in der auf Basis von homogenen, isobar durchgeführten Reaktorrechnungen die jeweiligen Zündverzugszeiten τ_d in Abhängigkeit der Startbedingungen (Druck, Temperatur, λ , AGR) abgelegt sind. Die Ansatzfunktion $F(\tau_d)$ muss der Bedingung

$$\int_0^{\tau_d} F(\tau_d) dt = 1 \quad (5.23)$$

genügen. Im simplen Fall konstanter thermodynamischer Bedingungen nimmt sie die Form

$$F(\tau_d) = \frac{1}{\tau_d} \quad (5.24)$$

an. Zur Abbildung der stark variierenden Bedingungen in Verbrennungsmotoren wird jedoch eine komplexere Formulierung gewählt (siehe [83]).

Die Zündung erfolgt mit Erfüllung der Bedingung $\tilde{Y}_I \geq \tilde{Y}_{T,Fu}$. Dann wird der Kraftstoff durch die simple Differentialgleichung

$$\frac{d\tilde{\rho}\tilde{Y}_{Fu}}{dt} = -\tilde{\rho}\frac{\tilde{Y}_{Fu}}{\tau_c} \quad (5.25)$$

umgesetzt. \tilde{Y}_{Fu} steht in dieser Gleichung für die aktuell vorhandene Kraftstoffmenge in der Zelle. Für die Modellierung des Verbrennungsablaufs wird die charakteristische Zeitskala τ_c verwendet, die auf einem empirischen Exponentialansatz beruht (siehe [83]).

Im Falle von einer Cool-Flame-Zündung wird die Menge des umsetzbaren Kraftstoffanteils in der Zelle prozentual begrenzt, bei sonst gleicher Verbrennungsmodellierung analog zu Gleichung 5.25. Für diesen Anteil an der Gesamtkraftstoffmenge wird von Pires da Cruz [83] ein Wert von 10% ($C_1 = 0.1$, siehe Abbildung 5.6 links) angenommen.

Ein kombinierter Zündprozess bestehend aus Cool- (Index 1) und Hot-Flame-Phase (Index 2) wird mit zwei unabhängig voneinander tabellierten Zündverzügen und entsprechend separierter Berechnung der beiden Progressvariablen $\tilde{Y}_{I,1}$ und $\tilde{Y}_{I,2}$ abgebildet.

Die Annahme von einem a priori festgelegten Wert für die Cool-Flame-Energiefreisetzung von 10% (bezogen auf die in der Zelle vorhandene Kraftstoffmenge) bei Erreichen der Cool-Flame-Zündbedingungen stellt jedoch im Konzept von Pires da Cruz [83] eine zu starke Vereinfachung dar. Wie mit Studien von homogenen Reaktorrechnungen gezeigt werden kann, hängt der Anteil der Wärmefreisetzung während der Cool-Flame-Phase nicht unerheblich von der Gemischzusammensetzung und von den thermodynamischen Bedingungen ab. Zudem setzt das Modell nach Abschluss der Cool-Flame-Energiefreisetzung bis zum Einsetzen der Hot-Flame-Zündung keine Energie frei (siehe Plateau in Abbildung 5.6 links).

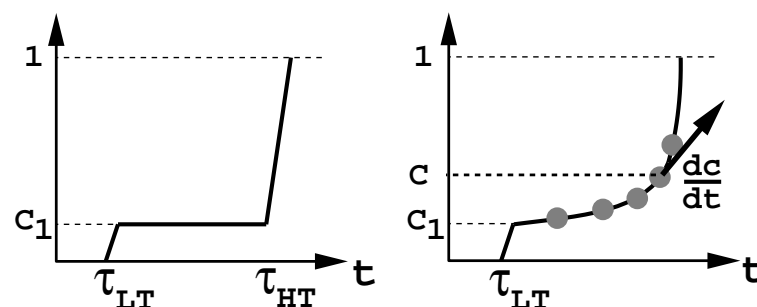


Abbildung 5.6: Skizzierter Berechnungsablauf der Energiefreisetzung des ursprünglichen IFP-Zündmodells ([83], links) und der verbesserten Version ([84], rechts) (τ_{LT} bzw. τ_{HT} : Zündverzögerzeiten für Cool-Flame- (LT) und Hot-Flame-Zündung (HT)).

Aufbauend auf dem Modell von Pires da Cruz [83] wurden von Colin [84] einige Verbesserungen am Modell vorgenommen, welche die zuvor erwähnten Schwächen beheben. Die Modifikationen beziehen sich im Wesentlichen auf die Modellierung der Energiefreisetzung während und

nach der Cool-Flame-Phase. So wird die Cool-Flame-Phase analog zu [83] durch die zeitliche Entwicklung der Progressvariable \tilde{Y}_I analog zu Gleichung (5.21) modelliert, mit Beginn der Cool-Flame-Zündung wird jedoch auf eine harte Vorgabe des freizusetzenden Energieanteils verzichtet und stattdessen auf den tabellierten Parameter C_1 zurückgegriffen, welcher dem freizusetzenden Energieanteil entspricht. Die Kraftstoffumsetzung während der Cool-Flame-Phase wird dann gemäß folgender Gleichung durchgeführt:

$$\frac{d\bar{\rho}\tilde{Y}_F}{dt} = -\bar{\rho}\frac{\tilde{Y}_F}{\tau_c} \quad (5.26)$$

Der Parameter τ_c entspricht einer charakteristischen Zeit für den Kraftstoffverbrauch, ist mit einem Wert von $2 \cdot 10^{-5} s$ fest vorgegeben und gewährleistet eine schnelle Kraftstoffumsetzung. Für die Anwendung der Gleichung (5.26) gelten folgende Bedingungen:

$$\tilde{Y}_I > \tilde{Y}_{T,Fu} \text{ und } \tilde{Y}_F > (1 - C_1)\tilde{Y}_{T,F} \quad (5.27)$$

mit dem zuvor erwähnten tabellierten Parameter C_1 .

Die Berechnung der Hauptzündung basiert nicht mehr auf einer tabellierten Reaktionszeit (siehe [83]), sondern auf einer Fortschrittsvariablen \tilde{c} . Sie gibt den Verbrennungsfortschritt an und ist definiert als

$$\tilde{c} = 1 - \frac{\tilde{Y}_F}{\tilde{Y}_{T,F}}. \quad (5.28)$$

Die Kraftstoffumsetzung (bzw. die damit korrelierende Energiefreisetzung) wird mit Hilfe der ebenfalls tabellierten Bildungsrate $\dot{\omega}_c$ der Progressvariablen \tilde{c} beschrieben (siehe Abbildung 5.6 rechts). Für die Kraftstoffumsetzung wird die Gleichung

$$\frac{d\bar{\rho}\tilde{Y}_F}{dt} = -\bar{\rho}\dot{\omega}_c\tilde{Y}_{T,F} \quad (5.29)$$

herangezogen.

Gegenüber dem ursprünglichen Modellierungsansatz wird eine erheblich verbesserte Ergebnisqualität sowohl für Diesel- als auch für HCCI-Betriebspunkte nachgewiesen.

Turbulentes Zündmodell von Streule

Ein turbulentes Zündmodell auf Basis eines Progressvariablen-Ansatzes wurde von Streule [3] für dieselmotorische Anwendungen entwickelt. Die Besonderheit der Modellierung liegt in der Ermittlung der Temperaturverteilung in einem speziell definierten Mischungsbruchraum (siehe auch Anhang A) unter Berücksichtigung der Oxidatortemperatur und der Temperatur des gesättigten Zustands. Als Progressvariable hat sich durch homogene Reaktorrechnungen CO als geeignete Indikatorspezies herauskristallisiert, da es während der Zündphase das notwendige monoton steigende Verhalten aufweist. Für die Bildung der passiv transportierten Indikatorspezies CO wird eine turbulente Reaktionsrate $\dot{\omega}_{ind,turb}$ auf Basis eines β -PDF-Ansatzes berechnet. Der Berechnungsablauf des Modells wird im Folgenden anhand des global für den Brennraum gültigen Mischungsdiagramms (Bild 5.7) erläutert. Im ersten Schritt wird die Sättigungslinie berechnet, welche die untere Begrenzung des Diagramms darstellt. Sie ergibt sich nach folgender thermodynamischer Beziehung

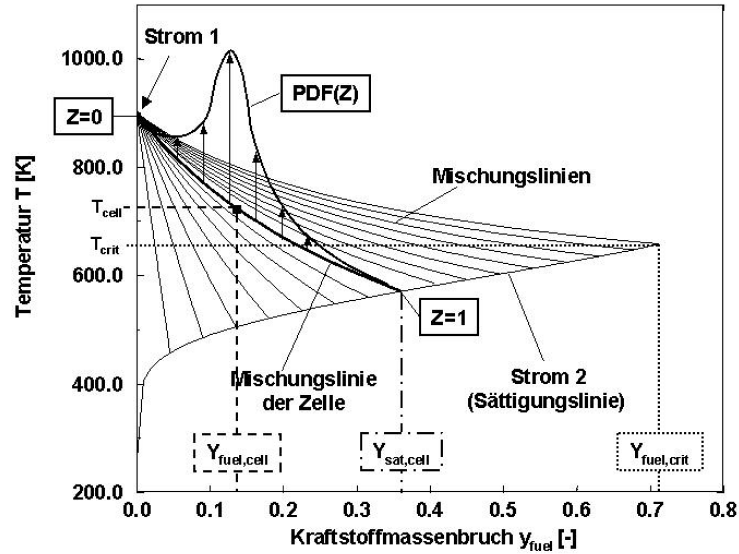


Abbildung 5.7: Ablauf der Berechnung der turbulenten Reaktionsrate $\dot{\omega}_{ind,turb}$ der Indikator-spezies CO innerhalb einer KIVA-Zelle.

$$y_{fuel}(T) = \frac{M_{fuel}}{M_{fuel} + M_{mix} \cdot \left(\frac{p_{cyl}}{p_{vap}(T)}\right)} \quad (5.30)$$

mit der molaren Masse des Kraftstoffs M_{fuel} , der molaren Masse der restlichen Gasmischung M_{mix} , dem Brennraumdruck p_{cyl} und dem von der Temperatur abhängigen Dampfdruck p_{vap} des Kraftstoffs. Der rechte Endpunkt ist durch die kritische Temperatur T_{crit} des Kraftstoffs festgelegt. Aus einer Mittelung der Temperaturen aller Zellen im Brennraum, die keinen Kraftstoff enthalten, wird die Oxidatortemperatur bestimmt. Folglich liegt die Annahme einer konstanten Oxidatortemperatur für alle Zellen zugrunde. Damit sind im Diagramm zwei Ströme definiert: Strom 1 (Oxidator-Strom) entspricht dem Zustand am linken oberen Eckpunkt, während Strom 2 durch alle Zustände repräsentiert wird, die sich auf der Sättigungslinie befinden, wo der Kraftstoff im gesättigten Zustand vorliegt. Durch einen adiabaten Entmischungsprozess [3] kann nun jeder CFD-Zelle ausgehend von der mittleren Zelltemperatur T_{cell} und dem mittleren Kraftstoffmassenbruch $y_{fuel,cell}$ zwischen Strom 1 und Strom 2 eindeutig eine Mischungslinie zugeordnet werden. Der Aufstoßpunkt der Mischungslinie auf die Sättigungslinie (Strom 2) entspricht dem gesättigten Zustand der Zelle, der unter den gegebenen Bedingungen an der Oberfläche eines verdampfenden Tropfens auftritt. Zusätzlich wird ein Mischungsbruch Z definiert, der zur Beschreibung der turbulenten Gemischverteilung mittels PDF-Ansatz benötigt wird.

$$Z = \frac{y_{fuel,cell}}{y_{sat,cell}}, \quad Z \in [0, 1] \quad (5.31)$$

Diese spezielle Definition weicht allerdings von Definition A.2 ab. Im vorliegenden Modell wird stattdessen der Kraftstoffmassenbruch $y_{fuel,cell}$ einer Zelle mit dem korrelierenden Sättigungszustand $y_{sat,cell}$ der Zelle normiert. Damit entspricht das obere Limit $Z = 1$ des Mischungsbruchraums dem gesättigten Zustand. Es ist in diesem Zusammenhang wichtig anzumerken, dass dieser Mischungsbruch aufgrund seiner speziellen Definition nicht transportiert, sondern

in jeder Zelle zu jedem Zeitschritt explizit berechnet wird. Durch die Definition des Mischungsbruchs Z in Kombination mit der Mischungslinie einer CFD-Zelle ist nun die Korrelation $T(Z)$ bekannt. Dieser Korrelation kommt aus kinetischer Sicht eine entscheidende Bedeutung zu, da chemische Reaktionen in hohem Maße von der Temperatur dominiert werden.

Da für die Berechnung der Gemischverteilung $\tilde{P}(Z, T(Z))$ eine β -PDF (siehe Anhang A) zugrunde gelegt wird, muss auch die Varianz \tilde{Z}''^2 ermittelt werden. Ihre Berechnung erfolgt - im Gegensatz zum Mischungsbruch \tilde{Z} - in klassischer Weise gemäß der Erhaltungsgleichung A.4 der Varianz des Mischungsbruchs.

Mit dem Mischungsbruch \tilde{Z} und der Varianz \tilde{Z}''^2 ist man nun in der Lage, auf Basis des β -PDF Ansatzes die turbulente Gemischverteilung $\tilde{P}(Z, T(Z))$ einer Zelle im inerten Zustand zu bestimmen.

Im finalen Berechnungsschritt wird die turbulente Reaktionsrate $\tilde{\omega}_{ind,turb}$ der Indikatorspezies CO mit folgender β -PDF-Integration bestimmt.

$$\tilde{\omega}_{ind,turb} = \int_0^1 \int_0^\infty \dot{\omega}_{ind,lam}(p, T(Z), Z, y_{co}, AGR) \tilde{P}(Z, T(Z)) dT dZ \quad (5.32)$$

Die laminaren Reaktionsraten $\dot{\omega}_{ind,lam}$ liegen dabei in Abhängigkeit vom Druck p , der Temperatur $T(Z)$, dem Mischungsbruch \tilde{Z} der Konzentration y_{co} der Indikatorspezies CO und der AGR-Rate in tabellierter Form vor.

Nach Überschreitung eines empirisch aus homogenen Reaktorrechnungen ermittelten Limits von 0.02 [3] für den Massenbruch der Indikatorspezies CO wird in der entsprechenden Zelle vom Zünd- auf das Verbrennungsmodell (z.B. Mixing-Timescale-Modell, siehe Kapitel 5.3.2) umgeschaltet.

Als genereller Nachteil des Modells ist die Annahme einer konstanten Verteilung der Indikatorspezies CO im Mischungsbruchraum innerhalb der CFD-Zellen zu nennen. Dies ist vom kinetischen Standpunkt aus gesehen nur eine sehr grobe Näherung.

Für die Simulation von HCCI-Brennverfahren mit Cool-Flame-Zündungen ist das Zündmodell nicht anwendbar, da während der Zündphase keine Energie freigesetzt wird. Auch ist CO als Indikatorspezies nicht geeignet, da das monotone Verhalten von CO insbesondere vor dem Einsetzen der Cool-Flame-Zündung wegen fehlender bzw. zu geringer Bildung nicht gegeben ist (siehe auch Abbildung 5.9). Die modelltechnische Zuweisung eines eindeutig definierten Reaktionszustands wird somit innerhalb der Zündverzugsphase erschwert bzw. unmöglich gemacht.

5.3.2 Verbrennungsmodellierung

Die folgenden Verbrennungsmodelle haben gemeinsam, dass sie ein vorgeschaltetes Zündmodell benötigen, da der Zündprozess nicht implizit im Verbrennungsmodell enthalten ist.

Eddy-Breakup-(EBU)-Modell

Eines der einfachsten turbulenten Verbrennungsmodelle ist unter dem Namen Eddy-Breakup-Modell [115] bekannt. Bei diesem Modell liegt die Vorstellung zugrunde, dass die durch Turbulenz hervorgerufenen Wirbelstrukturen für die Verbrennung maßgeblich sind. Folglich wird eine rein Mischungskontrollierte Verbrennung angenommen und somit in der Modellgleichung

für die Berechnung der Rate für die Kraftstoffumsetzung $\overline{\dot{\omega}_F}$ anstelle der chemischen Zeitskala eine turbulente Zeitskala $\tau_{turb} = k/\epsilon$ auf Basis des k - ϵ -Turbulenzmodells eingeführt:

$$\overline{\dot{\omega}_F} = -\bar{\rho}C_{EBU} \frac{1}{\tau_{turb}} \sqrt{\overline{y_F^2}} \quad (5.33)$$

Als Parameter tauchen weiterhin die Konstante C_{EBU} auf, sowie die Varianz $\overline{y_F^2}$ des Kraftstoffmassenbruchs. Die Umsetzung des Kraftstoffs erfolgt auf Basis einer Ein-Schritt-Kinetik direkt in die Produkte. Eine leicht modifizierte Variante des Modells wurde von Magnussen [79] vorgestellt und ist in der Literatur unter dem Namen Eddy-Dissipation-Modell bekannt. Durch Einführung der turbulenten Zeitskala (mischungskontrollierte Verbrennung) vernachlässigen damit diese Modelle den für homogene Brennverfahren dominierenden Aspekt der Kinetik. Zudem sind die Modelle unattraktiv, da die Konstante C_{EBU} in einem breiten Zahlenspektrum der Verbrennung angepasst werden muss.

Mixing-Timescale-Modell

Ein Modell für die konventionelle Dieselverbrennung wurde von Kong et al. [75] entwickelt. Es ist eine Erweiterung der Modellierungsvorschläge von Abraham et al. [76] und Kong et al. [77], wobei in letzterer Veröffentlichung sogar eine Modellvariante auf ein homogenes Brennverfahren appliziert wurde. Wegen der hohen Anzahl von empirischen Modellkonstanten wird auf diese spezielle Modellvariante hier jedoch nicht eingegangen.

Basis des Modells [75] ist eine einfache Differentialgleichung zur Berechnung der Änderung des Speziesmassenbruchs y_i der Spezies i .

$$\frac{d\tilde{y}_i}{dt} = \frac{\tilde{y}_i^{eq} - \tilde{y}_i}{\tau_c} \quad (5.34)$$

Diese hängt ab von der aktuellen Spezieskonzentration \tilde{y}_i und vom zu erwartenden Speziesmassenbruch \tilde{y}_i^{eq} im thermochemischen Gleichgewicht. Das thermochemische Gleichgewicht wird dabei mit einem analytischen Gleichgewichtslöser bestimmt. Für die Abbildung der Gemischzusammensetzung wird ein 7-Spezies-Modell verwendet, welches neben dem Kraftstoff die Spezies O_2 , N_2 , H_2O , CO_2 , CO und H_2 beinhaltet. Entscheidender Parameter der Modellgleichung ist die charakteristische Zeit τ_c , die wie folgt definiert ist:

$$\tau_c = \tau_{chem} + f\tau_{turb}. \quad (5.35)$$

Sie setzt sich zusammen aus einer chemischen Zeitskala τ_{chem} und einer turbulenten Zeitskala τ_{turb} . Die chemische Zeitskala τ_{chem} berechnet sich über einen Arrhenius-Ansatz

$$\tau_{chem} = A^{-1} [C_n H_m]^{0.75} [O_2]^{1.5} e^{(E/RT)} \quad (5.36)$$

mit $A = 1.54e + 10$, der Aktivierungsenergie $E = 77.3 \text{ kJ/mol}$ und der beiden Spezieskonzentrationen $[C_n H_m]$ und $[O_2]$. Die turbulente Zeitskala definiert sich über die aus dem k - ϵ -Modell bekannten Werte für die turbulente kinetische Energie k und der Dissipationsrate ϵ .

$$\tau_{turb} = C_2 k / \epsilon \quad (5.37)$$

Der Vorfaktor C_2 wird dabei mit 0.142 angenommen.

Zur Berücksichtigung der Turbulenz auf den Speziesumsatz in Abhängigkeit des Verbrennungsfortschritts dient die Variable f , die folgendem Zusammenhang gehorcht:

$$f = \frac{1 - e^{-r}}{0.632}. \quad (5.38)$$

Die darin auftretende Variable r hat die Funktion einer Progressvariablen. Sie gibt direkt den Verbrennungsfortschritt an, der sich aus entsprechenden Spezieskonzentrationen berechnet und kann folglich Zahlenwerte zwischen 0 und 1 annehmen.

$$r = \frac{y_{CO_2} + y_{H_2O} + y_{CO} + y_{H_2}}{1 - y_{N_2}} \quad (5.39)$$

Da das Verbrennungsmodell in dieser Form keine Zündung beschreibt, muss dem Modell ein geeignetes Zündmodell vorgeschaltet werden. Im Rahmen der Veröffentlichung von Kong et al. [75] wird dazu das Shell-Modell mit problemangepassten Parametern verwendet. Die Umschaltung von Zünd- auf das Verbrennungsmodell erfolgt bei einer Temperatur von $T = 1000K$. Bei der Daimler AG wird an dieser Stelle standardmäßig das turbulente Zündmodell von Streule [3] eingesetzt.

Das Mixing-Timescale-Modell ist prinzipiell auch für die Hauptverbrennung bei homogener Verbrennung geeignet, da hier vergleichbare Zustände zu einer stark vorgemischten Dieselerverbrennung vorliegen. Üblicherweise müssen dafür die Modellparameter A und C_2 angepasst werden, um ein schnelleres Durchbrennen zu gewährleisten. Das komplexe mehrstufige Zündverhalten einer Cool-Flame-Verbrennung kann jedoch nicht abgebildet werden und bleibt einem geeigneten Zündmodell vorbehalten. Das Zündmodell muss dabei den komplexen Ablauf während der Zündphase (mehrstufige Verbrennung, Cool-Flames) inklusive der Wärmefreisetzung abbilden. Hauptnachteil des Mixing-Timescale-Modells ist die Notwendigkeit des Tunings der Vormischverbrennung über die Modellparameter. Für die Abbildung der Diffusionsverbrennung ist das Modell gut geeignet.

7-Spezies-PDF-Timescale-Modell

Mit dem Mixing-Timescale-Modell als Grundlage ist von Steiner [72, 73] das von ihm als 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell benannte Verbrennungsmodell vorgeschlagen worden. Aufbauend auf dem Progressvariablenkonzept basierend auf 7 Spezies (siehe Mixing-Timescale-Modell) wird der Detaillierungsgrad des Modells erhöht um die Einführung des Mischungsbruchraums Z mit entsprechender Berücksichtigung der turbulenten Gemischverteilung auf Basis einer β -PDF (siehe Abschnitt A). Da die Abbildung von Turbulenzeffekten implizit durch die Varianz der PDF gegeben ist, entfällt die explizite Berechnung der turbulenten Zeitskala τ_{turb} . Diese kann somit in der ursprünglichen Modellgleichung zur Berechnung der charakteristischen Zeitskala τ_c (Gleichung 5.35) eliminiert werden. Damit besteht der Nenner der dem Modell zugrunde liegenden Speziesgleichung nur noch aus der chemischen Zeitskala τ_{chem} , welche weiterhin mit Hilfe eines Arrhenius-Ansatzes bestimmt wird.

$$\frac{dy_i}{dt} = \frac{\widetilde{y}_i^* - y_i}{\tau_{chem}} \quad (5.40)$$

Der Einfluss der Turbulenz auf die Gemischverteilung wird in diesem Modell durch die turbulente Berechnung der Gleichgewichts-Spezieskonzentration \widetilde{y}_i^* gemäß folgender PDF-Integration (analog A.9) berücksichtigt:

$$\widetilde{y}_i^* = \int_0^1 y_i^*(Z) \widetilde{P}(Z) dZ \quad (5.41)$$

Die Gleichgewichtskonzentrationen $y_i^*(Z)$ stammen dabei, wie auch schon beim Mixing-Timescale-Modell, von einem analytischen Gleichgewichtslöser.

Der entscheidende Vorteil des Modells liegt in der direkten Berücksichtigung der turbulenten Gemischverteilung, verbunden mit der Elimination der turbulenten Zeitskala τ_{turb} des ursprünglichen Modellierungskonzepts des Mixing-Timescale-Modells. Durch Verwendung eines semianalytischen Integrationsverfahrens für die Integration der β -PDF [72] bleiben die Rechenzeiten zudem auf einem niedrigen Niveau.

Wie auch schon das Mixing-Timescale-Modell ist auch das 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell ein reines Verbrennungsmodell, welches kombiniert mit einem geeigneten Cool-Flame-fähigen Zündmodell, auch für homogene Brennverfahren eingesetzt werden kann. Da die Berechnung der chemischen Zeitskala unverändert geblieben ist, muss auch beim 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell ein Tuning der Vormischverbrennung erfolgen.

ECFM3Z-(Extended Coherent Flame Model with 3 Zones) Modell

Basis des ECFM3Z-Modells [101] ist das ECFM-Verbrennungsmodell [102], welches ursprünglich für die Vormischverbrennung von Ottomotoren entwickelt worden ist. Durch eine erweiterte Unterteilung der CFD-Zellen in drei verschiedene Zonen ("3Z") zur zusätzlichen Abbildung der Diffusionsverbrennung ist das ECFM3Z-Modell entstanden. Dem ECFM3Z-Modell wird zugesprochen, für jegliche motorische Verbrennungstypen (vorgemischte Verbrennung, Diffusionsverbrennung, homogene Verbrennung, etc.) ohne Anpassung der einzelnen Teil-Modelle einsetzbar zu sein.

Basis für dieses breite Anwendungsspektrum ist eine Modellierungsphilosophie, die auf der Unterteilung einer CFD-Zelle in insgesamt drei Zonen beruht, die ihrerseits wieder in einen verbrannten und einen unverbrannten Bereich aufgeteilt sind. Ein entsprechendes Schema zeigt Abbildung 5.8 (links).

Die 3 horizontalen Zonen A , M und F haben folgende Funktion:

- Zone A : enthält reine Luft (inklusive Restgas)
- Zone M : enthält eine Mischung aus Kraftstoff und Luft
- Zone F : enthält reinen Kraftstoff

Aus dieser Einteilung in drei Zonen geht als erste elementare Eigenschaft des ECFM3Z-Modells die Mischungsbeschreibung hervor. Sie kann als einfache, im Mischungsbruchraum Z aufgespannte PDF interpretiert werden [101]. Die Verteilung wird dabei durch drei δ -Funktionen beschrieben:

$$P(Z) = a\delta(Z) + b\delta(Z - \bar{Z}^M) + c\delta(Z - 1) \quad (5.42)$$

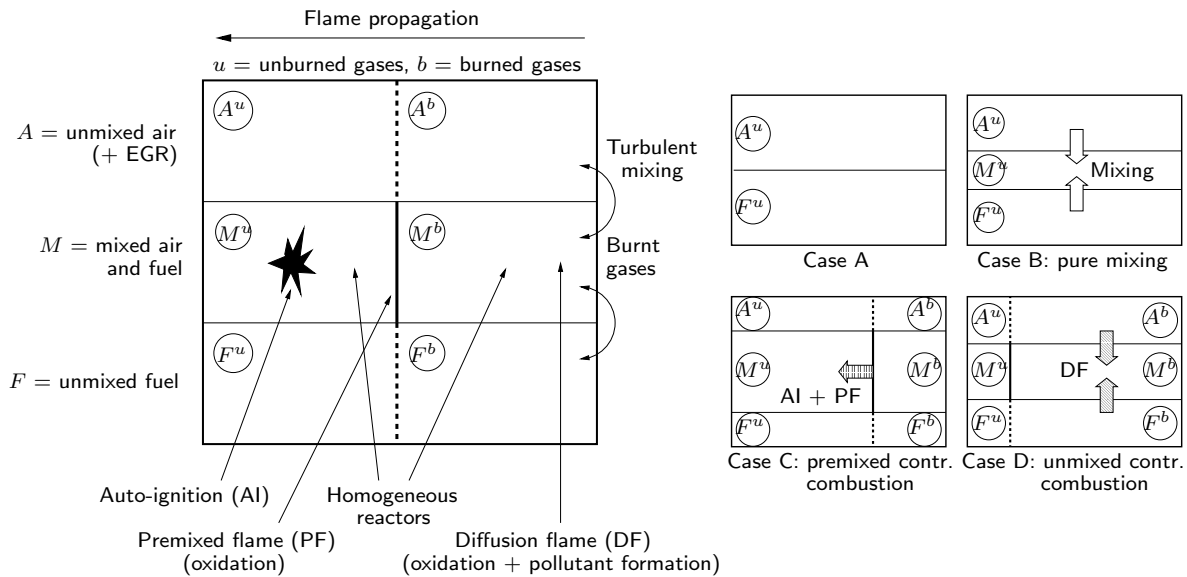


Abbildung 5.8: Links: Schema einer CFD-Zelle des ECFM3Z-Modells; Rechts: 4 beispielhafte Zustände einer CFD-Zelle: A) ungemischt, B) gemischt vor Zündung, C) vorgemischte Verbrennung, D) Diffusionsverbrennung (analog [101])

Der Parameter \bar{Z}^M entspricht in diesem Fall dem mittleren Mischungsbruch der gemischten Zone. Der Mischungsprozess von den beiden äußeren Zonen in die gemischte Zone wird auf Basis einer charakteristischen Mischungszeit τ_m abgebildet, die sich aus dem k - ϵ -Turbulenzmodell ableitet und wie folgt mit dem Faktor $\beta_m = 1$ berechnet wird [101]:

$$\tau_m = \beta_m \frac{k}{\epsilon} \quad (5.43)$$

Die zweite elementare Funktion im ECFM3Z-Modell nimmt die Progressvariable \tilde{c} ein, welche folgendermaßen definiert ist

$$\tilde{c} = 1 - \frac{\tilde{F}_{Fu}^u}{\tilde{F}_{TFu}} \quad (5.44)$$

mit \tilde{F}_{Fu}^u als noch unverbranntem Kraftstoffanteil in der Zelle und \tilde{F}_{TFu} als dem inerten Kraftstoffanteil, welcher über eine passive Transportgleichung bilanziert wird. Im Falle von Verbrennung ($\tilde{c} > 0$) werden die drei Zonen gemäß Abbildung 5.8 (links) massenmäßig aufgeteilt in einen unverbrannten Bereich ("u") mit dem Anteil $1 - \tilde{c}$ und einem verbrannten Anteil ("b") mit dem Anteil \tilde{c} .

Das Zusammenspiel von Mischung, Zündung und Verbrennung lässt sich am besten an der Bildsequenz A bis D in Abbildung 5.8 (rechts) erläutern. Im Fall A ist eine CFD-Zelle dargestellt, die nur reine Luft A^u und reinen Kraftstoff F^u enthält. Diese Situation ergibt sich zu Beginn des Verdampfungsprozesses. Durch einen gerichteten Mischungsprozess dieser beiden Zonen entsteht die Mischungszone M^u (Fall B). In dieser unverbrannten Mischungszone M^u erfolgt der Zündprozess (AI) über ein entsprechendes Zündmodell (siehe z.B. IFP-Zündmodell [84]). Nach erfolgter Zündung spaltet sich von den drei Zonen jeweils ein verbrannter Bereich ("u") ab (siehe Fall C und D). Der verbrannten Mischungszone M^b werden im weiteren Verlauf der Verbrennung alle Verbrennungsprodukte zugeschlagen. Der Verbrennungsprozess selbst

wird am besten differenziert in Vormischverbrennung und Diffusionsverbrennung betrachtet. Die Vormischverbrennung (PF) wird analog zum Zündprozess in der Zone M^u durchgeführt (siehe Fall C). Durch den hohen Vormischanteil des Gemischs haben die Zonen A und F im Vergleich zur gemischten Zone M nur einen geringen Anteil, weshalb der Mischungsprozess nur eine untergeordnete Rolle spielt. Die Diffusionsverbrennung (DF) ist in Fall D dargestellt und läuft ausschließlich in Zone M^b ab. Da der Mischungsprozess parallel zur Verbrennung abläuft, haben die Zonen A^b und F^b noch großes Gewicht und nähren durch Zumischung von unverbranntem Kraftstoff und Luft in die Zone M^b die Diffusionsverbrennung. In Zone M^b werden auch Nachverbrennungsmodelle eingesetzt.

Das ECFM3Z-Modellierungskonzept weist etliche Defizite auf. Dazu gehört, dass es sich bez. der Zündung bzw. Verbrennung um ein reines Mittelwertmodell handelt, da beide Modelle in einer vollständig gemischten Zone (M^u bzw. M^b) ablaufen. Die drei Zonen können folglich nicht als eine PDF bestehend aus drei diskreten Punkten aufgefasst werden, da weder das Zünd-, noch das Verbrennungsmodell durch den Zustand der beiden äußeren Zonen A und F direkt beeinflusst wird. Dies geht auch deshalb nicht, weil es sich bei den beiden äußeren Zonen aus Modellierungssicht um die beiden nicht reaktionsfähigen Ränder ($Z = 0$: reine Luft, $Z = 1$: reiner Kraftstoff) der PDF handelt. Folglich liegt keine Varianz im Mischungsbruchraum vor. Die ideale Durchmischung der verbrannten Zone M^b ist auch die Ursache dafür, weshalb das ECFM3Z-Modell insbesondere bei hohen Diesel-Lastpunkten mit hohem Diffusionsverbrennungsanteil zu einer zu schnellen Verbrennung neigt. Eine weitere starke Vereinfachung des Gesamtkonzepts besteht darin, dass abgesehen von der Zone M^b , welche die Verbrennungstemperatur aufweist, sämtliche anderen 5 Zonen die gleiche Temperatur besitzen. Von Colin et al [101] wird auch eingeräumt, dass der vom Brennraumdruck und dem entsprechenden Dampfdruck abhängige Sättigungszustand des Kraftstoffs mit dem beschriebenen Modellierungskonzept in den Zonen F^u und F^b beim gegenwärtigen Modellierungsstand nicht abgebildet wird. Als negativ beim ECFM3Z-Modell ist auch der nur rudimentär über die turbulente Mischungszeit berücksichtigte Turbulenzeinfluss auf die Zündung und Verbrennung zu bewerten.

In etlichen Veröffentlichungen [101, 102, 103, 104] ist das Modellkonzept auf unterschiedliche Verbrennungstypen mit gutem Erfolg angewendet worden, u.a. auch für homogene Brennverfahren [103, 104].

Insgesamt erscheint die Modellierungsphilosophie des ECFM3Z-Modells auf Basis der unterschiedlichen Zonen zu pragmatisch, um insbesondere die Chemie-Turbulenz-Interaktion wirklichkeitsnah abzubilden.

5.3.3 Kombinierte Zünd- und Verbrennungsmodellierung

Schreiber-Modell (5-Schritt-Mechanismus)

Im Unterschied zum Shell-Modell (siehe Abschnitt 5.3.1) ist das Schreiber-Modell (Schreiber et al [114]) ein Mehr-Schritt-Mechanismus, welcher auf insgesamt fünf Reaktionsgleichungen beruht. Drei dieser Gleichungen beschreiben analog zum Shell-Modell die Niedertemperatur-Kinetik und damit den Zündvorgang, während die zwei übrigen Gleichungen die Verbrennungskinetik abbilden. Das Schreiber-Modell wurde erfolgreich für n-Heptan, iso-Oktan als auch für entsprechende Mischungen appliziert [114].

Auch bei diesem Ansatz ist eine Anpassung der Koeffizienten an das Brennverfahren bzw.

an den Lastpunkt zwingend erforderlich. Wie jedoch z.B. von Bourdon et al [112] erfolgreich bewiesen werden konnte, kann durch eine numerische Optimierung der Koeffizienten eine gute Ergebnisqualität bei der 3d-Berechnung von HCCI-Betriebspunkten erreicht werden.

Hauptnachteil des Modells ist der rein laminare Charakter, da die Chemie-Turbulenz-Interaktion nicht berücksichtigt wird.

ERC-CHEMKIN-Modell

Ausgehend von dem oben bereits beschriebenen Mixing-Timescale-Modell (Abschnitt 5.3.2) ist von Kong et al. [69] eine Erweiterung des Modells speziell für homogene Brennvorgänge vorgenommen worden, die eine Kopplung von CHEMKIN [134] in den 3d-CFD-Code KIVA [87] beinhaltet. Sämtliche Spezies des verwendeten chemischen Mechanismus werden dazu transportiert. Als Ausgangsbasis dient die Gleichung des Mixing-Timescale-Modells zur Berechnung der Reaktionsrate ω_i der einzelnen Spezies. Der Übersichtlichkeit wegen wird sie an dieser Stelle noch einmal in leicht modifizierter Form wiedergegeben:

$$\omega_i = \frac{y_i^* - y_i}{\tau_{kin,i} + f\tau_{turb}} \quad (5.45)$$

Abhängig von der Spezies i geht auch die chemische Zeitskala $\tau_{kin,i}$ in die Gleichung ein, während die turbulente Zeitskala τ_{turb} für alle Spezies identisch ist. Die turbulente Zeitskala wird dann aktiviert, wenn die Progressvariable f von 0 verschiedene Werte annimmt.

Für die Herleitung einer modifizierten Modellgleichung wird zunächst angenommen, dass die turbulente Zeitskala 0 ist. Es ergibt sich damit folgende vereinfachte Gleichung:

$$\omega_{kin,i} = \frac{y_i^* - y_i}{\tau_{kin,i}} \quad (5.46)$$

Wird nicht der Gleichgewichtswert y_i^* , sondern das CHEMKIN-Ergebnis y_i' am Ende des Zeitschritts dt zur Berechnung der Reaktionsrate $\omega_{kin,i}$ verwendet, erhält man trivialerweise

$$\omega_{kin,i} = \frac{y_i' - y_i}{dt} = \frac{\Delta y_i}{dt}. \quad (5.47)$$

Durch Gleichsetzen von Gleichung 5.46 und 5.47 kann die kinetische Zeitskala wie folgt berechnet werden:

$$\tau_{kin,i} = \frac{y_i^* - y_i}{\Delta y_i} dt \quad (5.48)$$

Im Rahmen des Modells werden 2 grundlegende Annahmen getroffen: Zum einen sei die chemische Zeitskala aller Spezies identisch zu derjenigen des verwendeten Kraftstoffs ($\tau_{kin,i} = \tau_{kin,f}$), zum anderen strebe die Gleichgewichtskonzentration des Kraftstoffs gegen 0 ($y_f^* \rightarrow 0$). Folglich berechnet sich die chemische Zeitskala τ_{kin} zu

$$\tau_{kin} = (-y_f / \Delta y_f) dt \quad (5.49)$$

Ist der Kraftstoff vollständig umgesetzt, so wird an seiner Stelle die Spezies CO für die Berechnung der chemischen Zeitskala verwendet.

Ausgehend von Gleichung 5.48 lassen sich damit schließlich für eine Spezies i die beiden äquivalenten Ausdrücke

$$y_i^* - y_i = (-y_f/\Delta y_f) \Delta y_i \quad (5.50)$$

$$y_i^* - y_i = \tau_{kin} \Delta y_i / dt \quad (5.51)$$

angeben. Setzt man als finalen Schritt die Gleichung in die Ausgangsgleichung ein, ergibt sich für den Speziesmassenbruch y_i^{n+1} der Spezies i zum Zeitpunkt $n + 1$ der Ausdruck

$$y_i^{n+1} - y_i^n = \omega_i dt = \frac{\tau_{kin}}{\tau_{kin} + f\tau_{turb}} \Delta y_i, \quad (5.52)$$

wobei der Term Δy_i das Ergebnis der CHEMKIN-Berechnung [134] für den jeweiligen Zeitschritt ist.

Bei dem beschriebenen Modell handelt es sich um eine konsequente Erweiterung des Mixing-Timescale-Modells in Verbindung mit detaillierter Chemie. Insbesondere die chemische Zeitskala wird nicht mehr auf Basis eines Arrhenius-Ansatzes berechnet, dessen Vorfaktor iterativ bestimmt werden muss.

Als kritisch muss angesehen werden, dass zwar Turbulenzeffekte (turbulente Mischung) durch die Verwendung der turbulenten Zeitskala im Modell enthalten sind, die CHEMKIN-Berechnung [134] der Speziesänderung Δy_i erfolgt jedoch auf Basis der integralen Zell-Werte. Somit wird dort die turbulente Verteilung in der Zelle nicht berücksichtigt. Auch die Übertragung der chemischen Zeitskala des Kraftstoffs (bzw. von CO) auf alle Spezies stellt eine Annahme dar, deren Realitätsnähe nur schwer bewiesen werden kann. Nicht zuletzt sind die Rechenzeiten des Modells enorm, da sämtliche Spezies des Mechanismus transportiert werden müssen. Nicht umsonst wird von Kong et al. [69] u.a. eine eher unübliche Verbrennungsrechnung in einem Motor mit einem 0.5 Grad Sektor gezeigt.

Dennoch zeigt das Modell in den Beispielrechnungen [69, 70, 71] eine insgesamt akzeptable Übereinstimmung mit den Experimenten. Dabei wurde das Modell sowohl für diesel- als auch auf ottomotorische Kraftstoffe herangezogen.

Flamelet-Modelle (RIF, Multiple-RIF)

Ein auf detaillierter Reaktionskinetik beruhendes Verbrennungsmodell unter Berücksichtigung von turbulenten Effekten ist das Flamelet-Konzept. Es hat seinen Ursprung in der Abbildung laminarer Diffusionsflammen und wird deshalb bevorzugt für die klassische Dieselverbrennung mit entsprechend ausgeprägter Diffusionsverbrennung verwendet. Die Gültigkeit des eigentlich laminaren Konzepts ist darin begründet, dass man sich die Substruktur einer turbulenten Flamme aus laminaren Flammen, sogenannten "Flamelets" (Ensemble laminarer Diffusionsflammen), zusammengesetzt vorstellen kann.

Kern des Modells ist eine Separierung der turbulenten und chemischen Zeitskalen. Die Gültigkeit ist dabei auf das sogenannte Flamelet-Regime beschränkt. Der zusätzliche Charme des Modells liegt in der Tatsache, dass durch die Berücksichtigung von turbulenten Streckungseffekten auch verzögertes Zünden oder Flammenlöschen abgebildet werden kann. Die Modellierung dieser Streckungseffekte wird durch die im Modell enthaltene skalare Dissipationsrate ermöglicht. In aller Ausführlichkeit wird das Flamelet-Modell inklusive diverser Modifikationen z.B. von Peters [64] oder Steiner [72] erläutert.

Des Weiteren prägen die folgenden zwei Grundannahmen das Flamelet-Modellierungskonzept:

- schnelle Chemie ($\rightarrow Da \gg 1$)
- sehr dünne (und damit quasi-eindimensionale) Reaktionszone bzw. Flammenfront

Mit Da wird die Damköhler-Zahl bezeichnet. Sie ist definiert als das Verhältnis der turbulenten Zeitskala τ_{turb} zur chemischen Zeitskala τ_{chem} :

$$Da = \frac{\tau_{turb}}{\tau_{chem}} \quad (5.53)$$

Für sehr große Damköhler-Zahlen (d.h. $\tau_{turb} \gg \tau_{chem}$) laufen somit die chemischen Reaktionen um Größenordnungen schneller als die turbulenten Mischungsprozesse ab, weshalb der Mischungsprozess als langsamerer Prozess der dominierende ist. Diese auch als mischungskontrolliert bezeichnete Verbrennung liegt typischerweise bei Diffusionsflammen vor, wie sie im Dieselmotor vorherrschen. Die zweite wichtige Grundannahme des Flamelet-Modells ist eine dünne Flammenfront innerhalb der Diffusionsflamme, die somit eine quasi-eindimensionale und damit laminare Betrachtung der Flammenfront erlaubt.

Eine elementare Funktion im Flamelet-Modell nimmt das in Abschnitt A beschriebene Mischungsbruch-Konzept ein, in dem auf Basis des Mischungsbruchs Z (Definition A.2) ein Mischungsbruch-Raum bzw. Z -Raum aufgespannt wird. Durch eine geeignete Transformation des Z -Raums in ein lokales, senkrecht zur Flammenfront stehendes Koordinatensystem [64] können nun die Spezieserhaltungsgleichungen wie auch die Entwicklung der Temperatur im Flamelet in folgende Gleichungsform gebracht werden:

Spezies im Z -Raum:

$$\rho \frac{\partial y_i}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 y_i}{\partial Z^2} + \dot{\rho}_i^c \quad (5.54)$$

Temperatur im Z -Raum:

$$\rho \frac{\partial T}{\partial \tau} = \rho \frac{\chi_{st}}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \rho \frac{\chi_{st}}{2 c_p} \frac{\partial T}{\partial Z} \frac{\partial c_p}{\partial Z} + \rho \frac{\chi_{st} c_{p_i}}{2 c_p} \frac{\partial y_i}{\partial Z} \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{1}{c_p} \left[\frac{\partial p}{\partial t} + \dot{Q}^c + \dot{Q}^r \right] \quad (5.55)$$

Die einzelnen Parameter haben dabei folgende Bedeutung: τ ist die Zeitkoordinate im Mischungsbruchraum, χ_{st} die skalare Dissipationsrate im Falle stöchiometrischer Mischung, $\dot{\rho}_i^c$ bzw. \dot{Q}^c repräsentieren die chemischen Quellterme, c_p die spezifische Wärmekapazität der Mischung bzw. c_{p_i} die Wärmekapazität der Spezies i und \dot{Q}^r ist der Strahlungsquellterm. In diesen beiden Gleichungen tritt kein Konvektionsterm mehr auf und der Mischungsbruch Z stellt eine unabhängige Variable dar. Die skalare Dissipationsrate χ_{st} ist gemäß Gleichung A.5 definiert.

Ist die gemeinsame Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}(\chi, Z)$ der Streckungsrate χ und des Mischungsbruchs Z bekannt, so lässt sich der turbulente Massenbruch \tilde{y}_i der Spezies i wie folgt berechnen.

$$\tilde{y}_i = \int_{Z=0}^{\infty} \int_{\chi=0}^{\chi=1} y_i(\chi, Z) \tilde{P}(\chi, Z) d\chi dZ \quad (5.56)$$

Durch Transport sowohl des Mischungsbruchs \tilde{Z} als auch dessen Varianz $\widetilde{Z'^2}$ in geeigneten Transportgleichungen [64, 72] kann mit einem presumed PDF-Ansatz (in der Regel basierend auf einer β -Funktion, siehe Abschnitt A) die Verteilung $\tilde{P}(Z)$ im Mischungsbruch-Raum

bestimmt werden. Die Verteilung der Streckungsrate $\tilde{P}(\chi)$ kann z.B. über eine Log-Normal-Verteilung beschrieben werden. Mit der Annahme statistischer Unabhängigkeit dieser beiden Verteilungen vereinfacht sich damit die Berechnung des turbulenten Massenbruchs \tilde{Y}_i zu:

$$\tilde{y}_i = \int_{\chi=0}^1 \int_{Z=0}^1 y_i(\chi, Z) \tilde{P}(\chi) \tilde{P}(Z) dZ d\chi \quad (5.57)$$

Die beiden Verteilungen $\tilde{P}(Z)$ und $\tilde{P}(\chi)$ können dabei erheblich leichter auf Basis von experimentellen Daten bestimmt werden als die gemeinsame Verteilung $\tilde{P}(\chi, Z)$ von Gleichung 5.56.

Eines der gängigsten Flamelet-Konzepte für motorische Verbrennungsrechnungen stellt das Repräsentative Interaktive Flamelet (RIF) dar [135]. Bei diesem Modellierungsansatz wird die Berechnung eines einzelnen Flamelets mit einer CFD-Rechnung gekoppelt durchgeführt. Entscheidend ist, dass dieses ein Flamelet den gesamten Brennraum repräsentiert. Entsprechend wird die skalare Dissipationsrate χ_{st} (siehe Gleichung A.5) aus dem gesamten Brennraum gemittelt und dem Flamelet aufgeprägt. Die Flamelet-Lösung wiederum wird unter Berücksichtigung der lokalen β -PDF-Verteilung in jeder Zelle in den CFD-Code eingekoppelt (siehe Gleichung 5.57). Zur besseren Abbildung der zum Teil großen Inhomogenitäten hinsichtlich der skalaren Dissipationsrate im Brennraum wurde von Barths et al [105, 106] das Multiple-RIF-Konzept entwickelt. Hier werden einzelne Brennraumbereiche durch unterschiedliche Flamelets repräsentiert, wodurch z.B. die Einflüsse der kalten Brennraumwände oder von Mehrfacheinspritzungen auf die Verbrennung besser berücksichtigt werden können.

Die Bewertung des Flamelet-Modells hinsichtlich der Simulation homogener Brennverfahren soll anhand der bereits erläuterten beiden Grundannahmen der schnellen Chemie bzw. der dünnen Flammenfronten vorgenommen werden. Beide Bedingungen sind nur schwer mit einer Zündung/Verbrennung eines vorhomogenisierten Kraftstoffgemischs bei einem homogenen Brennverfahren in Einklang zu bringen. Einerseits spielt sich die Kinetik insbesondere durch die zum Teil niedrigen Temperaturen zu Spritzbeginn wie auch durch die entsprechend langen Zündverzögerungen in Kombination mit einem mehrstufigen Zündprozess (Cool Flame) in eher langen Zeitintervallen und damit großen chemischen Zeitskalen ab, weshalb die Bedingung großer Damköhler-Zahlen nicht erfüllt ist. Andererseits lassen sich bei homogener Verbrennung keine Flammenfronten nachweisen, da die Zünd- bzw. Verbrennungsprozesse gleichzeitig über größere Volumenbereiche erfolgen. Diese beiden Überlegungen lassen das Flamelet-Konzept zur Modellierung von homogenen Brennverfahren (basierend auf Selbstzündung) ungeeignet erscheinen. Des Weiteren besitzt insbesondere das bereits erwähnte RIF-Konzept den Nachteil, keine Mehrfacheinspritzungen abbilden zu können, wie sie bei homogenen Dieselmotoren üblich sind. Der Grund dafür liegt in der Tatsache, dass nur ein Flamelet den gesamten Brennraum repräsentiert. Die Berechnung dieses Flamelets startet gemeinsam mit Beginn der Einspritzung bzw. mit Beginn der Kraftstoffverdampfung im Brennraum. Spätere Einspritzungen werden somit durch ein Flamelet repräsentiert, welches zeitlich und damit auch kinetisch einen zu weit entwickelten Zustand aufweist.

PDF-Timescale-Modell

Das PDF-Timescale-Modell von Rao et al [81, 82] stellt eine Kombination des Mixing-Timescale-Modells und des Flamelet-Ansatzes dar. Die ursprüngliche Differentialgleichung des

Mixing-Timescale-Modells (Gleichung 5.34) wird dabei in zweifacher Form modifiziert:

$$\frac{d\tilde{y}_i}{dt} = \frac{\tilde{y}_i^* - \tilde{y}_i}{\tau_{chem}} \quad (5.58)$$

Zum einen wird der Term \tilde{y}_i^* basierend auf einer stationären Flamelet-Lösung bestimmt, zum anderen wird im Nenner der rechten Seite nur noch die rein chemische Zeitskala τ_{chem} berücksichtigt, da der Effekt der turbulenten Mischung bereits durch den Flamelet-Ansatz im Modell enthalten ist. Die chemische Zeitskala wird analog zum Mixing-Timescale-Modell in Form eines Arrhenius-Ansatzes empirisch bestimmt.

Durch Integration von Gleichung 5.58 beschreibt Rao [81] sehr anschaulich die Funktionsweise des PDF-Timescale-Modells in Abhängigkeit von der Damköhler Zahl.

$$\tilde{y}^{n+1} = \tilde{y}_i^* + (\tilde{y}^n - \tilde{y}_i^*) \exp(-\Delta t / \tau_{chem}) \quad (5.59)$$

Liegen kleine Damköhler-Zahlen (große chemische Zeitskalen \rightarrow langsame Chemie) vor, so hat der rechte Term der rechten Seite großen Einfluss. Rao [81] interpretiert deshalb diesen Term als Störterm, der zur rein stationären Flameletlösung \tilde{y}_i^* hinzuaddiert wird. Für sehr große Damköhler-Zahlen (kleine chemische Zeitskalen \rightarrow langsame Chemie) wird dagegen der Störterm klein, und die Lösung geht in die stationäre Flameletlösung über.

Die Gewichtung der laminaren Flameletlösungen zum Erhalt der turbulent gemittelten Lösung erfolgt analog zum Flameletansatz (s.o.) über die Gewichtung mit Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen für den Mischungsbruch $\tilde{Z}(P(Z))$ und die Streckungsrate $\tilde{\chi}(P(\chi))$ (Gleichung 5.57). Die stationären Flameletlösungen liegen dabei in tabellierter Form vor.

Da dem PDF-Timescale-Modell ein detaillierter kinetischer Mechanismus zugrunde liegt, müssen sämtliche Spezies im Strömungscode transportiert werden. Um den Rechenaufwand zu reduzieren, beschränkt sich Rao [81] in seinem Modell nur auf den Transport derjenigen Spezies, die einen bekanntermaßen hohen Massenanteil an der Gesamtmasse während der kinetischen Umsetzung haben.

Wie schon zuvor erläutert, scheint der isoliert betrachtete Flamelet-Ansatz nicht für die Modellierung homogener Brennverfahren geeignet zu sein. Allerdings versucht Rao [81] in seinem Modell den Einfluss großer chemischer Zeitskalen, wie sie insbesondere bei homogenen Brennverfahren mit gestuften Verbrennungsvorgängen (Cool-Flames) auftreten, zusätzlich zu berücksichtigen. Hier besteht jedoch die gleiche Problematik analog zum ursprünglichen Mixing-Timescale-Modell, da für die Berechnung der chemischen Zeitskala nur der stetig ansteigende Arrhenius-Ansatz verwendet wird, welcher nicht in der Lage ist, das Verhalten der chemischen Zeitskala über einen gestuften Brennvorgang hinweg sinnvoll abzubilden. An dieser Stelle hat jedoch das Mixing-Timescale-Modell den Vorteil, dass es ein reines Verbrennungsmodell ist, welches durch Vorschalten eines geeigneten Zündmodells (für die Modellierung der Cool-Flame-Phase) dennoch verwendet werden kann. Beim PDF-Timescale-Modell wirkt sich in diesem Fall die Modellierung der Zündung und Verbrennung in einem Modell nachteilig aus.

Transported-PDF-Ansatz

Der Transported-PDF-Ansatz zur Berechnung turbulenter reaktiver Strömungen wurde bereits detailliert in Kapitel 4.2 ausgehend von der PDF-Transportgleichung 4.14 beschrieben. Er gilt als einer der vollkommensten Modellierungsansätze insbesondere für einphasige Strömungen, da der Quellterm bezüglich der chemischen Reaktion keinerlei Modellierung bedarf. Allerdings

erhöht sich der Modellierungsaufwand für die Abbildung der turbulenten Mischung. Als noch nicht ausgereift erweist sich der Ansatz jedoch bei mehrphasigen Strömungen, wie sie bei der Diesel-Einspritzung auftreten. Im Unterschied z.B. zu ottomotorischen Brennvorfahren wird der zündwillige Kraftstoff bei Temperaturen eingespritzt, die nach Verdampfen des Kraftstoffs direkt zu chemischen Reaktionen führen können. Das hat zur Folge, dass parallel zur Zündung bzw. Verbrennung in der Regel eine zweiphasige Strömung im Brennraum vorliegt. Die Schwierigkeit liegt nun in der Modellierung des Sprays und der Einkopplung des verdampften Kraftstoffs in die turbulente Verteilung der Gasphase (siehe auch Kapitel 4.2). Für die Abbildung der Diffusionsverbrennung bei konventionellen Dieselmotoren ist der Transported-PDF-Ansatz ungeeignet, da die fehlenden Zweipunkt-Korrelationen (Temperatur- und Stoff-Gradienten) in der Verbrennungszone nur schwer abgebildet bzw. modelliert werden können. Dagegen ist der Ansatz für homogene Brennvorfahren wegen der geringeren Gradienten im Brennraum prinzipiell sehr gut geeignet. Allerdings wird der Transported-PDF-Ansatz mittelfristig wegen des hohen Rechenaufwands für industrielle Anwendungen keine Rolle spielen.

CMC-Modell (Conditional Moment Closure)

Das CMC-Modell ist unabhängig voneinander von Klimenko und Bilger entwickelt worden. Eine umfassende Beschreibung des Modells geben beide Autoren in [108]. Ziel des Modells ist eine verfeinerte Behandlung des Turbulenzeinflusses auf die Verbrennung. Die Basis des CMC-Modells bildet eine Konditionierung der reaktiven Skalare im Mischungsbruchraum Z . Die Idee der Konditionierung eines reaktiven Skalars ist an experimentelle Beobachtungen angelehnt, in denen sich zeigt, dass eine starke Kopplung zwischen reaktiven Skalaren und inerten Größen wie z.B. dem Mischungsbruch vorliegt [108]. Im Modell erfolgt die Konditionierung im Mischungsbruchraum an diskreten Stützstellen Z^* . An jeder dieser Stützstellen liegen konditionierte Speziesmassenbrüche in der Form $(\overline{\rho y_k} | Z^*)$ vor. Folglich muss für jeden konditionierten Massenbruch einer jeden Spezies eine Bilanzgleichung mit entsprechenden Schließungsbedingungen gelöst werden. Da auch Gradienten im Mischungsbruchraum berechnet werden müssen, ist für deren adäquate Abbildung eine ausreichende Menge an Stützstellen Z^* notwendig. Die turbulent gemittelten Werte der einzelnen Spezies werden dann auf Basis einer β -PDF-Verteilung im Mischungsbruchraum integriert [109]:

$$\bar{\rho \tilde{y}_k} = \int_0^1 (\overline{\rho y_k} | Z^*) \tilde{P}(Z^*) dZ^* \quad (5.60)$$

Peters [64] sieht in der PDF-Integration im Mischungsbruchraum eine starke Analogie zum Flamelet-Konzept. Allerdings ist die Formulierung des CMC-Ansatzes als stärker anzusehen, da neben der Berücksichtigung der lokalen turbulenten Verteilung im Mischungsbruchraum auch eine lokale Auflösung der reaktiven Skalare gegeben ist [108], während an dieser Stelle die Flamelet-Modelle einen globalen Charakter aufweisen (z.B. RIF-Modell). Auch wenn üblicherweise bei der Schließung der Modellterme nur die ersten Momente berücksichtigt und die höheren vernachlässigt werden, sorgt die Anzahl N der erforderlichen Bilanzgleichungen $N = N_s * N_z$ (mit N_s : Anzahl der Spezies; N_z : Anzahl der Stützstellen im Z -Raum) für enormen Rechenaufwand. Deshalb ist der CMC-Ansatz für industrielle Anwendungen momentan ungeeignet. Die sehr detaillierte Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion ist jedoch

grundsätzlich auch für die Simulation von HCCI-Brennverfahren sehr interessant und erstrebenswert.

5.4 Progressvariablenansatz zur Modellierung der Selbstzündung bei Diesel-HCCI-Verfahren

In der Arbeit von Streule [3] ist ein Zündmodell für die Zündphase eines konventionellen Dieselmotors vorgestellt worden (Details siehe Kapitel 5.3.1). Das Modell berücksichtigt sowohl detaillierte Chemie in Form einer Library als auch die turbulente Gemisch- und Temperatur-Verteilung. Als Progressvariable bzw. Indikatorspezies dient die Spezies CO. Für Betriebspunkte mit kurzen Zündverzugszeiten und ohne Mehrstufenzündung ist das Modell erfolgreich appliziert worden [73].

Wegen der im Modell fehlenden Wärmefreisetzung während der Zündphase, ist die Simulation von Diesel-HCCI-Brennverfahren mit den langen Zündverzugszeiten und dem komplexen mehrstufigen Zündverhalten nicht möglich. Als weitere Schwäche des Modells kommt hinzu, dass über dem modellspezifischen Mischungsbruch die turbulente Verteilung der Indikatorspezies CO nicht berücksichtigt wird. Aus kinetischer Sicht ist dies eine zu starke Vereinfachung.

Aufbauend auf dem Modell von Streule [3] ist im Rahmen dieser Arbeit ein Zündmodell mit dem Ziel entwickelt worden, auch für Diesel-HCCI-Brennverfahren mit der damit verbundenen komplexen Zündphase anwendbar zu sein. Das modifizierte Zündmodell besitzt folgende Grundeigenschaften:

- detaillierte Chemie
- Verwendung der Reaktionszeit als einzige Progressvariable inklusive geeignetem Transportverhalten
- Einkopplung der während der Zündphase turbulent freigesetzten Energie in den 3d-CFD-Code
- "Online-Berechnung" der Kinetik

Durch die Verwendung der Reaktionszeit anstelle der Indikatorspezies CO als Progressvariable konnte mit dem neuen Modellierungskonzept auch die Schwäche der Annahme einer im Z -Raum konstanten CO-Verteilung eliminiert werden. Die Berücksichtigung der turbulenten Gemischverteilung bleibt dabei unverändert erhalten. Alle Details des Modells werden im Folgenden ausführlich beschrieben.

5.4.1 Identifikation der Reaktionszeit als Progressvariable

Notwendige Grundeigenschaft einer Progressvariablen ist ein monotonen Bildungsverhalten über dem jeweiligen Fortschritt, den sie beschreiben soll. In der Arbeit von Streule [3] ist dieses Verhalten für CO als Indikatorspezies für relevante Druck- und Temperaturbereiche zur Beschreibung der Zündphase einer konventionellen Dieselverbrennung nachgewiesen worden. In Abbildung 5.9 ist das Ergebnis einer homogenen Reaktor Rechnung dargestellt. Sowohl die Starttemperatur als auch der Startdruck sind dabei so weit abgesenkt worden, dass sich HCCI-relevante Bedingungen ergeben. Die beiden oberen Diagramme von Abbildung 5.9 zeigen die Entwicklung der Temperatur, der Energiefreisetzung und diverser Speziesmassenbrüche. Deutlich ist im Temperaturverlauf wie auch im Verlauf der Energiefreisetzung die Cool-Flame-Verbrennung in der ersten Phase der Zündung mit sich anschließender Hauptverbrennung zu erkennen. In der Zündverzugszeit bis zum Start der Cool Flame ist jedoch in keinem der Verläufe der oberen beiden Diagramme eine Reaktivität bzw. ein Progress erkennbar. Zur Verdeutlichung ist dieser Bereich in allen Diagrammen grau hinterlegt. Da in diesem Zeitbereich auch insbesondere keine signifikante CO-Bildung erkennbar ist, ist folglich auch die Forderung eines monotonen Verhaltens dieser Progressvariablen nicht gegeben. An diesem einfachen Beispiel zeigt sich, dass die Indikatorspezies CO zur Beschreibung einer Cool-Flame-Zündung unbrauchbar ist. Gleiches gilt auch für die anderen aufgeführten Spezies, deren zeitlicher Verlauf insbesondere vor der Cool-Flame-Zündung eine zu vernachlässigende Reaktivität aufweist. Der Verlauf der freigesetzten Energie besitzt einen zur Temperatur qualitativ ähnlichen Trend und scheidet deshalb ebenfalls als Progressvariable aus.

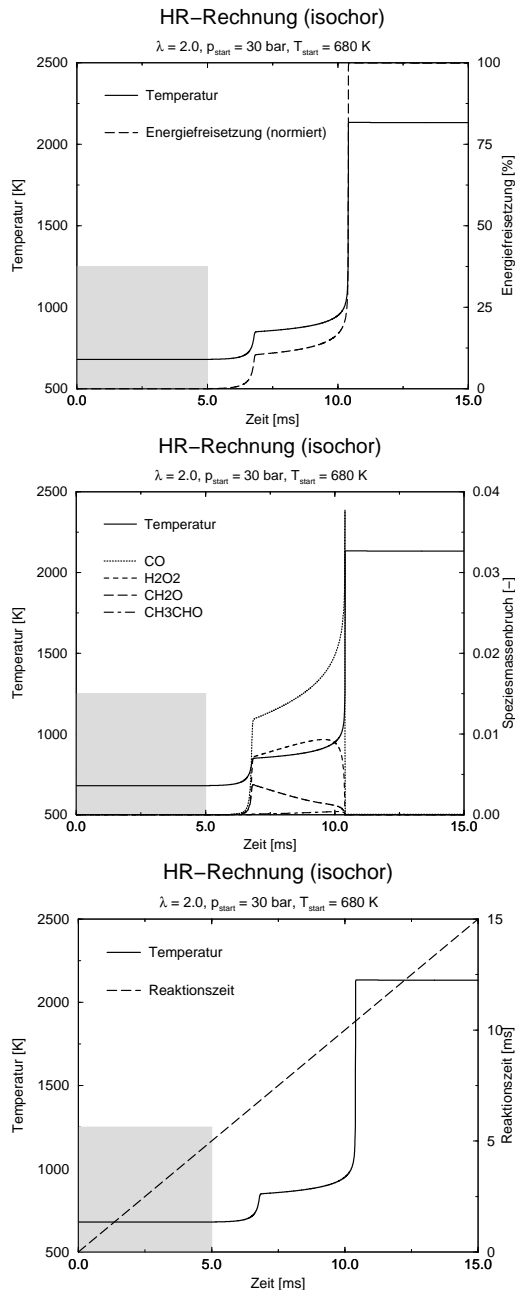


Abbildung 5.9: Zündverhalten einer *n*-Heptan/Luft-Mischung ($\lambda = 2.0$, $p_{\text{start}} = 30 \text{ bar}$, $T_{\text{start}} = 680 \text{ K}$, isochor gerechnet) bez. Temperatur (Referenzgröße in allen Diagrammen), Energiefreisetzung, Massenbruch diverser Spezies und der Reaktionszeit.

Es stellt sich direkt die Frage nach einer geeigneteren Progressvariablen zur Beschreibung einer mehrstufigen Zündung. Die einzige Variable in Abbildung 5.9, die auch innerhalb der ersten Phase ohne erkennbare Reaktivität das Monotonie-Kriterium erfüllt, ist die Reaktionszeit (unteres Diagramm). Sie stellt damit die Basis des HCCI-Zündmodells dar.

5.4.2 Umsetzung des Gesamtkonzepts unter Berücksichtigung der Chemie-Turbulenz-Interaktion

Der Berechnungsablauf des in dieser Arbeit entwickelten HCCI-Zündmodells ist schematisch in Abbildung 5.10 aufgeführt und gliedert sich im Wesentlichen in sechs Schritte:

- A:** Transport der Reaktionszeit t_{reac} im 3d-CFD-Code
- B:** Berechnung der inerten Korrelation zwischen dem Mischungsbruch Z und der Temperatur $T(Z)$
- C:** Projektion des inerten auf den reaktiven Zustand
- D:** PDF-Integration zur Berechnung der turbulent freigesetzten Energie
- E:** Einkopplung des Energiequellterms
- F:** Umschaltung vom Zündmodell auf das Verbrennungsmodell

Diese Schritte werden nun im Folgenden nacheinander beschrieben. In Abbildung 5.10 ist der Ablauf und das Zusammenspiel der Schritte A bis D zusätzlich graphisch dargestellt und die Elemente der einzelnen Schritte durch grau hinterlegte Blöcke hervorgehoben. Der Übersichtlichkeit wegen sind die Schritte E und F nicht im Diagramm enthalten und werden separat erläutert.

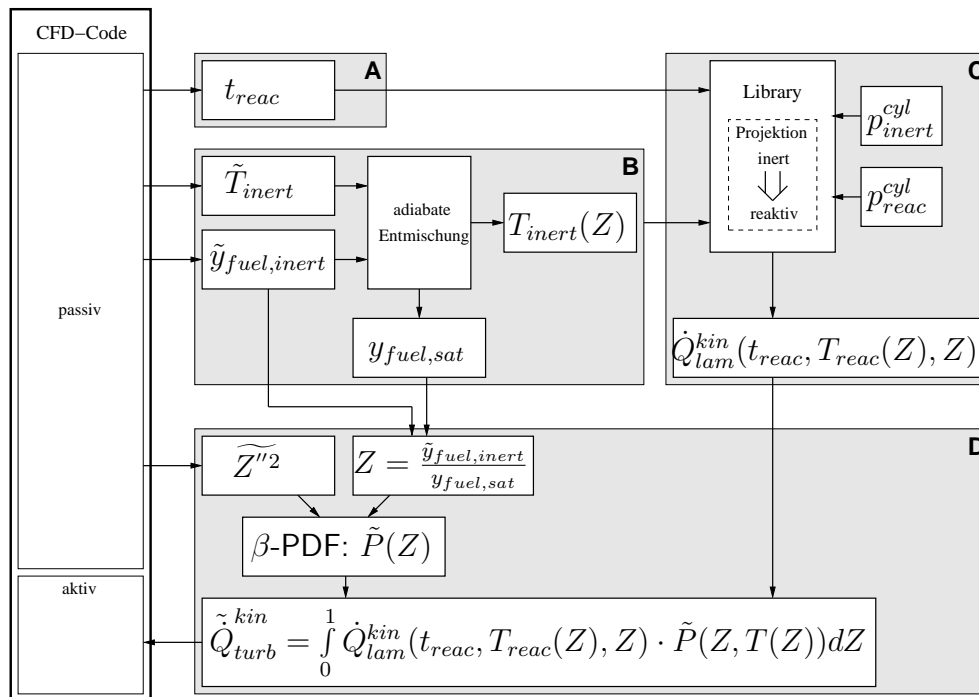


Abbildung 5.10: Ablauf der Berechnung der turbulenten Energiefreisetzungrate \tilde{Q}_{turb}^{kin} innerhalb des CFD-Codes.

A: Transport der Reaktionszeit t_{reac} im 3d-CFD-Code

Für das HCCI-Zündmodell dient die Reaktionszeit t_{reac} als Progressvariable. Für die Modellierung werden zwei wichtige Annahmen getroffen:

- der Startzeitpunkt der Reaktionszeit $t_{reac} = 0.0$ aller turbulenten Zustände im Mischungsbruch-Raum ist identisch
- die Entwicklung der Reaktionszeit t_{reac} aller turbulenten Zustände im Mischungsbruch-Raum erfolgt gleich

Aus diesen beiden Modell-Annahmen ergibt sich der entscheidende Vorteil, dass keine Verteilung der Progressvariablen t_{reac} im Mischungsbruchraum berücksichtigt werden muss. Im 3d-CFD-Code stellt die Reaktionszeit einen passiven Skalar dar. Der Transport erfolgt mit Hilfe folgender Transportgleichung:

$$\frac{\delta(\rho t_{reac})}{\delta t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u} t_{reac}) = \underbrace{\rho \dot{F}}_I + \underbrace{t_{reac} \frac{\partial \rho}{\partial t}}_{II} \quad (5.61)$$

Der Start der Berechnung der Reaktionszeit t_{reac} beginnt, wenn der Kraftstoffmassenbruch ein vorgegebenes Limit von $y_{fuel,limit} = 1 \cdot 10^{-6}$ überschreitet. Im Rahmen dieser Arbeit wird in der Transportgleichung für die Reaktionszeit t_{reac} nur die Konvektion berücksichtigt. Auf die Modellierung der Diffusion wird verzichtet, da die physikalische Grundlage für eine Diffusion der "Reaktionszeit" fehlt. In diesem Zusammenhang ist die Reaktionszeit t_{reac} als modelltechnische Hilfsgröße anzusehen. Der Verzicht auf einen Diffusionsterm in der t_{reac} -Transportgleichung kann theoretisch dazu führen, dass in Bereichen mit Kraftstoffkonzentrationen unterhalb von $y_{fuel,limit}$ der rein konvektive Transport eine Reaktionszeit von $t_{reac} = 0$ liefert, obwohl ein Diffusionsprozess eine Reaktionszeit größer als Null ergeben würde. Es wird aber davon ausgegangen, dass der klein gewählte Grenzwert $y_{fuel,limit}$ in den Brennraumzonen, in denen die Gemischbildung stattfindet, schnell überschritten wird und somit der Progress aktiviert ist. Außerdem haben Brennraumbereiche mit Kraftstoffkonzentrationen unterhalb von $y_{fuel,limit}$ keine Relevanz für die Energiefreisetzung, welche den eigentlichen Fokus des Modells darstellt. Wie in Anhang C im Detail ausgeführt, dient der Term II in Gleichung 5.61 dazu, den Einfluss der Verdampfung auf den gekoppelten Transport " ρt_{reac} " zu eliminieren. Der Einfluss der Verdampfung auf die Reaktionszeit selbst hingegen muss über die Rate \dot{F} in Term I erfolgen (siehe auch Anhang C). Diese Rate \dot{F} gilt es geeignet zu modellieren. Dazu wird zunächst folgendes Verhältnis D definiert, welches die Partialdichte des frisch verdampften Kraftstoffs $\dot{\rho}_s \Delta t$ mit der insgesamt vorhandenen Partialdichte des Kraftstoffs $\dot{\rho}_s \Delta t + \rho_{fuel}$ ins Verhältnis setzt.

$$D = \frac{\dot{\rho}_s \Delta t}{\dot{\rho}_s \Delta t + \rho_{fuel}} \quad (5.62)$$

Auf Basis der Variablen D werden die 2 extremen Szenarien betrachtet: keine bzw. sehr starke Verdampfung. Tritt keine Verdampfung auf ($\dot{\rho}_s = 0$), so erfährt die Reaktionszeit t_{reac} einen Zuwachs analog zum physikalischen Zeitfortschritt der Simulation.

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_s &= 0 & (D = 0) \\ \dot{F} &= 1 \end{aligned} \quad (5.63)$$

Im Falle von Verdampfung hingegen ist zu erwarten, dass die Zumischung von frischem Kraftstoffdampf den Reaktionsfortschritt bremst. Bei einer hinreichend großen verdampften Kraftstoffmenge ($\dot{\rho}_s \Delta t \gg \rho_{fuel}$) bezogen auf die schon vorhandene Kraftstoffmenge wird die Reaktionszeit deshalb auf 0 zurückgesetzt. In diesem Fall hat die Rate \dot{F} die Funktion einer Senke und erhält folglich ein negatives Vorzeichen.

$$\begin{aligned} \dot{\rho}_s \Delta t &\gg \rho_{fuel} \quad (D \rightarrow 1) \\ \dot{F} &= -\frac{t_{react}^n}{\Delta t} \end{aligned} \quad (5.64)$$

Dabei entspricht t_{react}^n der Reaktionszeit zum vorherigen Zeitschritt und Δt dem aktuellen Zeitschritt in der Simulation. Bei Annahme eines linearen Verhaltens zwischen den beiden Zuständen $D = 0$ und $D = 1$ ergibt sich mit den Beziehungen 5.63 und 5.64 folgende Geradengleichung:

$$\dot{F}(D) = -D \left(\frac{t_{react}^n}{\Delta t} + 1 \right) + 1 \quad (5.65)$$

In Abbildung 5.11 a) wird dieses lineare Verhalten des Quell- bzw. Senkenterms \dot{F} graphisch verdeutlicht. Den entsprechenden Einfluss auf die Reaktionszeit t_{react}^{n+1} ausgehend von der Reaktionszeit t_{react}^n zeigt Abbildung 5.11 b).

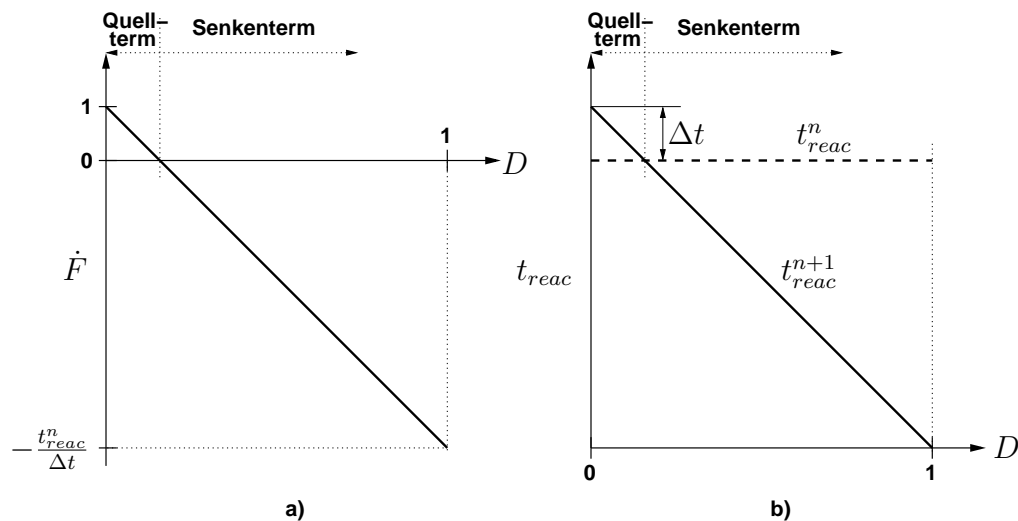


Abbildung 5.11: Einfluss des Quell- bzw. Senkenterms \dot{F} auf die Änderung der Reaktionszeit ($t_{react}^n \rightarrow t_{react}^{n+1}$) in Abhängigkeit der Kraftstoffverdampfung innerhalb eines CFD-Zeitschritts Δt : a) Abhängigkeit von \dot{F} zu Verdampfungsverhältnis D ; b) Entwicklung der Reaktionszeit in Abhängigkeit von Verdampfungsverhältnis D .

B: Berechnung der inerten Korrelation zwischen dem Mischungsbruch Z und der Temperatur $T(Z)$

Aus Sicht der Kinetik ist es von entscheidender Bedeutung, eine Korrelation zwischen den turbulenten Zuständen Z im Mischungsbruchraum und der Temperatur T zu beschaffen

($T(Z)$ -Verteilung). Das Vorgehen lehnt sich direkt an das in Kapitel 5.3.1 ausführlich beschriebene "turbulente Zündmodell von Streule" [3] inklusive der speziellen Definition des Mischungsbruchs Z (siehe 5.31) an. Dort wird für jede Zelle auf Basis der Zelltemperatur T_{cell} eine adiabate Mischungslinie bestimmt, welche eine Korrelation zwischen der turbulenten Gemischverteilung und der Temperatur zulässt (siehe Abbildung 5.7). Mit Hilfe der jeweiligen Mischungslinie kann jedoch nur die inerte $T_{inert}(Z)$ -Verteilung bestimmt werden, da der adiabate Entmischungsprozess zur Generierung der Mischungslinien nicht in der Lage ist, den turbulenten Verbrennungseinfluss auf die Temperaturverteilung zu berücksichtigen. Folglich besitzt der adiabate Entmischungsprozess keine Gültigkeit mehr im Falle von Reaktion. Dies gilt gleichermaßen für die Bestimmung der Sättigungslinie. Bei deren Berechnung wird für den Term der molaren Masse des Gemischs M_{mix} (siehe Gleichung 5.30) ebenfalls nur eine inerte bzw. unverbrannte Gemischzusammensetzung angenommen. Um den Gültigkeitsbereich des Mischungsdiagramms nicht zu verletzen, wird deshalb neben der eigentlichen Temperatur T auch die inerte Temperatur T_{inert} passiv mitberechnet und dient anstelle von T als Vorgabe für den Entmischungsprozess. Details zur Berechnung der inerten Temperatur können Anhang D entnommen werden.

Aus den angeführten Gründen erfolgt im Modell eine Separierung der Bestimmung der turbulenten Temperaturverteilung und der Bestimmung der turbulenten Energiefreisetzung. Im folgenden Abschnitt wird deshalb der Modellierungsschritt beschrieben, mit dem auf Basis der nun bekannten inerten Temperaturverteilung die korrelierende reaktive Temperaturverteilung (und damit auch die turbulente Energiefreisetzung) ermittelt wird.

C: Projektion des inerten auf den reaktiven Zustand

In diesem Abschnitt wird erläutert, wie zu den einzelnen turbulenten Zuständen im Mischungsbruch-Raum die entsprechenden laminaren Energiefreisetzungsraten \dot{Q}_{lam}^{kin} bestimmt werden, die dann mittels PDF-Integration für die Berechnung der turbulenten Energiefreisetzungsraten \tilde{Q}_{turb}^{kin} verwendet werden (siehe folgender Abschnitt).

Der Projektionsprozess von der inerten auf die reaktive Temperaturverteilung lässt sich formal in folgender Weise beschreiben:

$$T_{inert}(Z) \xrightarrow{t_{reac}} T_{reac}(Z) \quad (5.66)$$

Die Projektion wird dabei durch den Pfeil symbolisiert mit der Reaktionszeit t_{reac} als zusätzlichen Projektionsparameter zusammen mit den turbulenten Gemischzuständen Z . Mit der Kenntnis der turbulenten reaktiven Temperaturverteilung $T_{reac}(Z)$ sind implizit auch die laminaren Energiefreisetzungsraten der einzelnen turbulenten Zustände Z bekannt (siehe unten).

Die numerische Umsetzung des Projektionsprozesses soll zunächst unabhängig von einer turbulenten Verteilung anhand einer homogenen Reaktor-Rechnung erläutert werden. Damit reduziert sich die Projektion für dieses einfache Beispiel formal auf $T_{inert} \xrightarrow{t_{reac}} T_{reac}$. In Abbildung 5.12 (links) ist der rein inert berechnete Temperaturverlauf eines kompressiblen homogenen Reaktors dargestellt. Unabhängig davon wurde eine zweite homogene Reaktorrechnung mit gleichen Start- (Druck, Temperatur und Gemischzusammensetzung) und Randbedingungen (Volumenverlauf) durchgeführt, bei der jedoch Reaktion zugelassen war. Wird nun zu einem bestimmten Zeitpunkt eine inert-reaktive Projektion vorgenommen (angedeutet durch die vertikalen Pfeile *I*, *II* und *III*), so kann aus der reaktiven Rechnung die Energiefreisetzungsraten

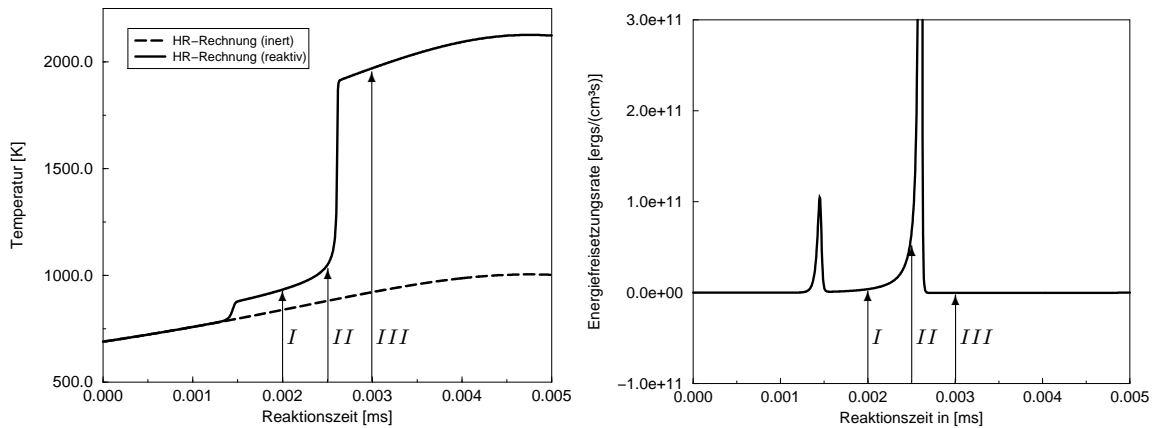


Abbildung 5.12: Links: Temperaturverläufe von zwei unabhängig voneinander durchgeführten HR-Rechnungen mit (reaktiv) und ohne Reaktion (inert) mit drei durch Pfeile angedeuteten Projektionsprozesse zu den Zeitpunkten I, II und III. Rechts: Zur reaktiven HR-Rechnung gehöriger Verlauf der Energiefreisetzungsrates mit Projektionszeitpunkten analog zu linkem Diagramm.

\dot{q} entnommen werden, welche die inerte Rechnung im Falle von Reaktion gehabt hätte (5.12, rechts).

Aufbauend auf der beschriebenen Projektionssystematik wird nun das numerische Vorgehen für den Fall turbulenter Verteilungen innerhalb einer 3d-CFD-Rechnung erläutert. Dazu werden im Verlauf einer 3d-CFD-Rechnung in vordefinierten äquidistanten Zeitabständen jeweils 2 Matrizen mit homogenen Reaktoren (HR) über den relevanten T - Z -Bereich gelegt. Die Initialisierung ($t_{reac} = 0$) und die zeitliche Entwicklung der Matrizenpaare sind in Abbildung 5.13 dargestellt. Eine der beiden Matrizen ist jeweils reaktiv, die andere ist inert. Der grau unterlegte Bereich unterhalb der kritischen Mischungslinie kennzeichnet diejenige thermodynamische Zone, für die bei der Erstellung der Bildsequenz eine kinetische Relevanz angenommen wurde. Hinsichtlich der Temperatur soll diese Zone durch die HR-Matrizen vollständig abgedeckt werden, in Bezug auf den Kraftstoffmassenbruch werden die Matrizen jedoch nur zwischen 0 und 0.5 aufgespannt, da für größere Kraftstoffmassenbrüche die Relevanz für den Zündprozess nur gering ist. Zum Initialisierungszeitpunkt liegen beide Matrizen deckungsgleich aufeinander und haben damit in den korrelierenden HR die gleiche Starttemperatur und Gemischzusammensetzung (siehe Abbildung 5.13, oben). Die Reaktionszeit der jeweiligen reaktiven HR-Matrizen (wie auch die Zeit der inerten HR-Matrizen) entwickelt sich analog zur CFD-Simulationszeit mit jedem CFD-Zeitschritt weiter. Wärmeleitung und Diffusion werden innerhalb der Matrizen nicht berücksichtigt. Die Entwicklung der beiden Typen von HR-Matrizen erfolgt jeweils adiabat. Den reaktiven Matrizen wird der gemittelte Verbrennungsbrennraumdruck p_{reac}^{cyl} bzw. dessen Änderung $\frac{dp_{reac}^{cyl}}{dt}$ aufgeprägt.

$$\rho \cdot c_p \cdot \frac{dT}{dt} = - \sum_{i=1}^{n_{spec}} h_i \cdot \dot{\omega}_i \cdot W_i + \frac{dp_{reac}^{cyl}}{dt} \quad (5.67)$$

Die inerten HR-Matrizen werden dagegen nur mit dem inerten Brennraumdruck p_{cyl}^{inert} (bzw. mit der entsprechenden inerten Druckänderung) beaufschlagt, welcher dem Druck entspricht,

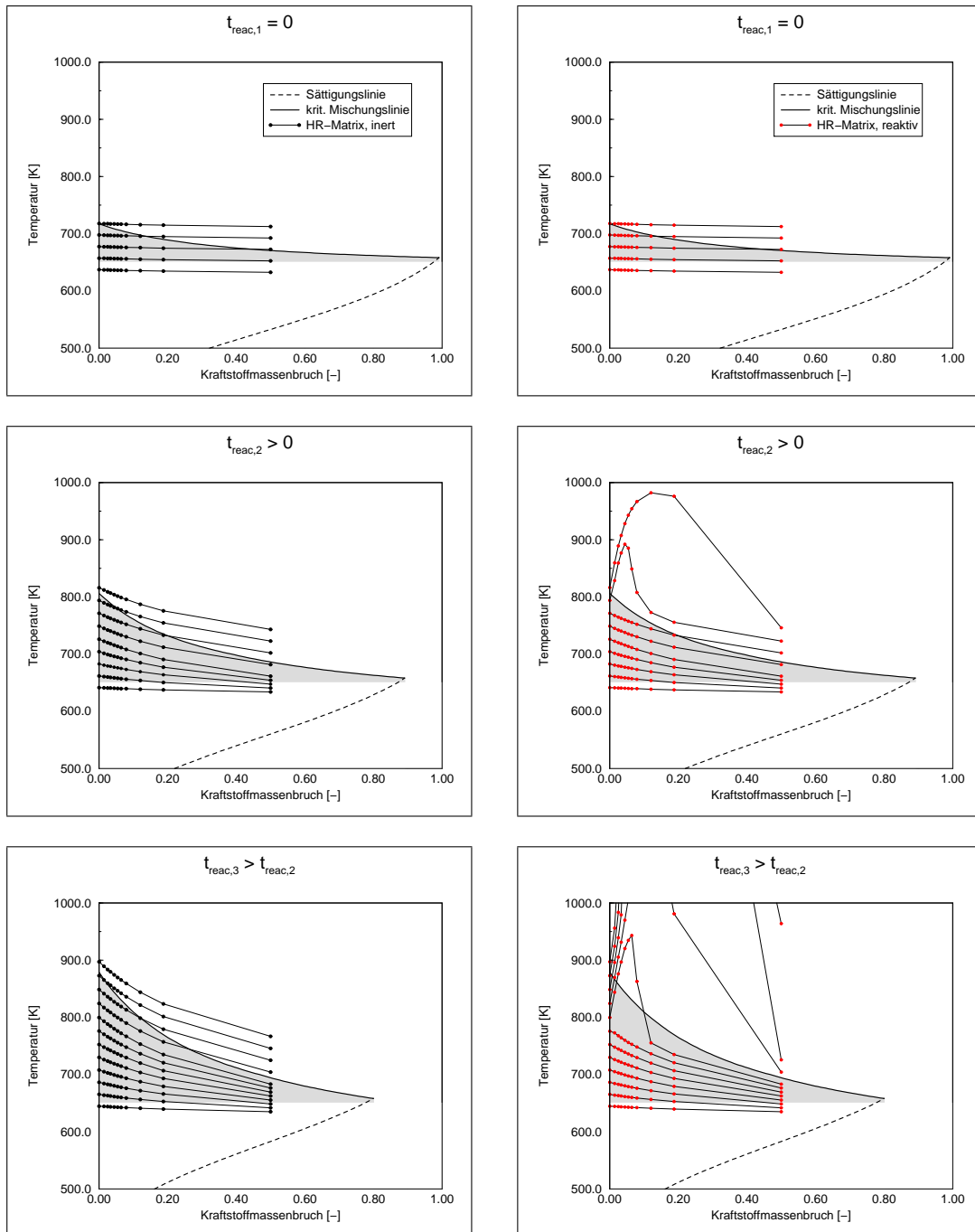


Abbildung 5.13: Zeitliche Entwicklung einer inerten HR-Matrix (linke Spalte) und der korrespondierenden reaktiven HR-Matrix (rechte Spalte).

der sich ohne die Wärmefreisetzung durch den Verbrennungsprozess einstellen würde (jedoch mit Berücksichtigung der Verdampfungsenthalpie). Da es sich um die inerten Reaktoren handelt, fehlt in dieser Energiegleichung folglich der Term für die Energiefreisetzung durch chemische Reaktion.

$$\rho \cdot c_p \cdot \frac{dT}{dt} = \frac{dp_{\text{inert}}^{\text{cyl}}}{dt} \quad (5.68)$$

Wie in der mittleren und unteren Sequenz von Bild 5.13 zu sehen ist, kommt es mit der Zeit in den reaktiven HR-Matrizen zu Reaktionen, die sich in einer entsprechenden Temperaturerhöhung äußern. Es ist von elementarer Bedeutung für das Modell, dass zu jedem Zeitpunkt jeder inerte homogene Reaktor einen korrelierenden reaktiven Partner besitzt.

Zur Bestimmung des inerten Brennraumdruckes p_{inert}^{cyl} wird in KIVA [87] passiv eine Energiegleichung mitgeführt, die keinen Quellterm für Energiefreisetzung durch Verbrennung bzw. Reaktion besitzt (siehe Anhang D). Auf Basis der Annahme einer inerten Gemischzusammensetzung, die sich leicht aus der realen Gemischzusammensetzung rückrechnen lässt, sind damit zu jedem Zeitpunkt nicht nur die realen Temperaturen T bekannt, sondern auch die inerten Temperaturen T_{inert} . Mit dieser Information ist schließlich auch der inerte Druck p_{inert} bestimmbar.

Da es sich bei der inert-reaktiven Projektion um den entscheidenden Modellierungsschritt handelt, wird das Vorgehen ausgehend von T_{inert} und t_{reac} hier noch einmal zusammenfassend anhand des Ablaufschemas in Abbildung 5.10 beschrieben: Zuerst wird auf Basis des inerten Brennraumdruckes p_{inert} ein entsprechendes Mischungsdiagramm erzeugt (Schritt B). Mit Hilfe der inerten Temperaturen T_{inert} wird die Korrelation $T_{inert}(Z)$ hergestellt. Mit anderen Worten: Die zum inerten Zustand gehörige Mischungslinie wird ermittelt. Die Reaktionszeit t_{reac} wird dazu verwendet, die zeitlich korrelierende inerte HR-Matrix zu bestimmen und dort diejenigen HR der Matrix durch Interpolation im T - t_{reac} - Z -Raum ermittelt, die auf der inerten Mischungslinie zum Liegen kommen. Der Druck p ist dabei kein Interpolationsparameter, da den Matrizen jeweils der aktuelle Druck aufgeprägt wird. Der entscheidende Schritt C ist nun die Projektion der laminaren Energiefreisetzungsraten der korrelierenden reaktiven HR-Matrix auf die inerte HR-Matrix. Damit liegen auf der inerten Mischungslinie diejenigen laminaren Energiefreisetzungsraten \dot{Q}_{lam}^{kin} vor, die im Falle von Reaktion aufgetreten wären.

Die Berechnung der turbulenten Energiefreisetzungsraten \dot{Q}_{turb}^{kin} auf Basis der nun bekannten laminaren Energiefreisetzungsraten \dot{Q}_{lam}^{kin} und der lokal bekannten PDF wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

D: PDF-Integration zur Berechnung der turbulent freigesetzten Energie

Ziel innerhalb jedes Zeitschritts ist die Berechnung der mittleren, turbulenten Energiefreisetzungsraten \tilde{Q}_{turb}^{kin} . Bei gegebener Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{P}(Z, T(Z))$ muss deshalb folgende Integration vorgenommen werden:

$$\tilde{Q}_{turb}^{kin} = \int_0^1 \dot{Q}_{lam}^{kin}(t_{reac}, T_{reac}(Z), Z) \cdot \tilde{P}(Z, T(Z)) dZ \quad (5.69)$$

Für die Integration wird, wie von Steiner [72] ausführlich beschrieben, ein semi-analytisches Integrationsverfahren der β -PDF verwendet.

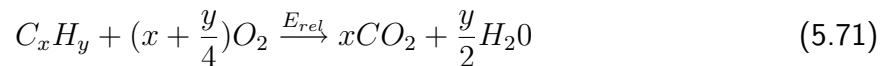
E: Einkopplung des Energiequellterms

Während der Zündphase wird gemäß Schritt D die turbulente Energiefreisetzungsraten \tilde{Q}_{turb}^{kin} berechnet. Demnach wird innerhalb des Zeitschritts $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ die Energiemenge E_{rel}

freigesetzt:

$$E_{rel} = \int_{t^n}^{t^{n+1}} \dot{Q}_{turb}^{kin} dt. \quad (5.70)$$

Zur Einkopplung in den 3d-CFD-Code muss nun sowohl die Massen- als auch die Energieerhaltung gewährleistet werden. Ein korrelierender Quellterm für die turbulente Energiefreisetzungsrates \tilde{Q}_{turb}^{kin} wird in die Energiegleichung 5.11 eingefügt. Im vorliegenden Modell wird weiterhin die Annahme zugrunde gelegt, dass die Energiemenge E_{rel} aus einer direkten Umsetzung von Kraftstoff in CO_2 und H_2O herrührt. Deshalb kann für einen allgemeinen Kraftstoff C_xH_y folgende vereinfachte, molare Bilanzgleichung aufgestellt werden:



Damit ist auch eine konservative Behandlung der Spezies gesichert. Das Symbol E_{rel} über dem Reaktionspfeil soll dabei andeuten, dass eine energieäquivalente Menge Kraftstoff und O_2 verbraucht und in die zwei idealisierten Produkte CO_2 und H_2O überführt wird.

Bei diesem Vorgehen kann natürlich nicht die komplexe Speziesumwandlung, wie sie zum Beispiel bei Cool-Flame-Reaktionen auftritt, wiedergegeben werden. Dies ist allein aufgrund der stark begrenzten Anzahl von Spezies im 3d-CFD-Code nicht möglich, da hier nur ein 7-Spezies-Modell ($C_xH_y, O_2, N_2, CO_2, H_2O, CO, H_2$) zur Abbildung der Verbrennung verwendet wird. Es sei an dieser Stelle erwähnt, dass der Fokus des hier vorgestellten Zündmodells in der Bestimmung der Wärmefreisetzung während der Zündphase liegt, nicht jedoch in der Umsetzung der Spezies.

F: Umschaltung vom Zündmodell auf das Verbrennungsmodell

Das HCCI-Zündmodell hat allein die Aufgabe, die Zündphase zu beschreiben, die im Falle homogener Brennverfahren in guter Näherung als kinetisch dominierter Prozess angenommen werden kann.

Zur Modellierung der sich anschließenden Verbrennung wird auf Basis eines geeigneten Kriteriums auf das 7-Spezies-PDF-Timescale-Modell [72] umgeschaltet. Dieses Modell kann durch geeignet gewählte Parameter alle Diesel-relevanten Verbrennungstypen zwischen reiner Vormischverbrennung und reiner Diffusionsverbrennung abbilden (siehe Kapitel 5.3.2). Letztere ist für HCCI-Brennverfahren dann von Bedeutung, wenn nach der homogenen Verbrennung noch eine weitere heterogene Einspritzung erfolgt, die wegen der durch die homogene Verbrennung erhöhten Brennraumtemperatur einen geringen Zündverzug aufweist und deshalb primär in Form einer Diffusionsverbrennung mit nur geringem vorgemischten Anteil umgesetzt wird.

Als Kriterium für das Umschalten vom Zünd- auf das Verbrennungsmodell wird im Rahmen dieser Arbeit das Erreichen einer definierten relativen Energiefreisetzung verwendet. Ein Wert von 20% wird als sinnvolles Kriterium angesehen, das heißt, die Umschaltung auf das Verbrennungsmodell erfolgt dann, wenn 20% der möglichen Energie des Kraftstoffs bereits freigesetzt wurden (siehe Abbildung 5.14). Mit diesem Wert ist gewährleistet, dass sich die Zündphase bereits in der Hauptzündung befindet (Zündverzug $t_{zv,2}$) und nicht erst in der Cool-Flame-Zündung (Zündverzug $t_{zv,1}$), da aus der Literatur [4] zu entnehmen ist, dass während der Cool-Flame-Zündung bis zu 10% der möglichen Energie freigesetzt werden können. Würde

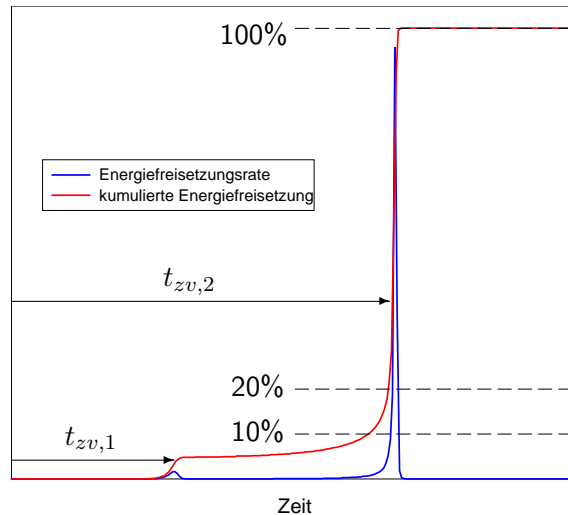


Abbildung 5.14: Verdeutlichung des Effekts des %-Limits für die Umschaltung vom Zünd- auf das Verbrennungsmodell.

auf Grund eines zu niedrig angesetzten Wertes die Umschaltung auf das Verbrennungsmodell bereits während der 1. Zündstufe (Cool-Flame) erfolgen, würde das Verbrennungsmodell die reaktionsträge Phase zwischen 1. und 2. Zündstufe überschätzen und folglich die Hauptverbrennung zu früh einsetzen.

5.4.3 Numerische Umsetzung der Kinetik-Berechnung im Modell

Mit Beginn der Einspritzung wird analog zu Abbildung 5.13 ein erstes HR-Matrix-Paar (inert/reaktiv) mit der Reaktionszeit $t_{reac} = 0$ als Startwert generiert. In zeitlich äquidistanten Abständen folgen entsprechend weitere HR-Matrix-Paare, sodass sich deren Zahl im Laufe der Rechnung stetig erhöht. Die Bestimmung der für die PDF-Integration in Schritt D benötigten laminaren Energiefreisetzungsraten \dot{Q}_{lam}^{kin} erfolgt in Abhängigkeit der Reaktionszeit t_{reac} durch einfache zeitliche Interpolation aus den entsprechenden HR-Matrix-Zeitebenen.

Folgende Auflistung zeigt die verwendeten Intervallweiten bzw. Stützstellen bei der Startinitialisierung einer HR-Matrix:

- zeitlicher Abstand zwischen den HR-Matrix-Paaren: $0.5 \text{ } ^\circ\text{KW}$
- Temperatur-Intervallweite: $\Delta T_{HR,init} = 10 \text{ K}$
- Stützstellen der Kraftstoffmassenbrüche (Klammerwert: Umrechnung in λ): $0.0(\infty)$, $0.014(5.0)$, $0.022(3.0)$, $0.033(2.0)$, $0.044(1.5)$, $0.054(1.2)$, $0.064(1.0)$, $0.079(0.8)$, $0.120(0.5)$, $0.187(0.3)$, $0.5(0.17)$

Die obere Grenztemperatur der HR-Matrizen hängt bei der Initialisierung von der maximalen Brennraumtemperatur ab und wird mit einem Sicherheitsabstand von 20 K oberhalb dieser Temperatur festgelegt. Als untere Temperaturgrenze wird im Rahmen dieser Arbeit ein Wert

von $T_{HR,min} = 500$ K verwendet. Mit diesem niedrigen Wert ist gewährleistet, dass bei der Initialisierung auch Temperaturbereiche erfasst werden, die erst im Laufe der Kompression kinetische Relevanz bekommen. Mit steigendem Brennraumdruck, hervorgerufen durch Kompression und Verbrennung, erhöht sich gemäß den Gleichungen 5.67 und 5.68 auch die Temperatur in den homogenen Reaktoren. Übersteigt dabei einer der Reaktoren der untersten Temperaturebene den Wert von $T_{HR,min}$, so wird jeweils eine neue inerte und reaktive Reihe von Reaktoren der jeweiligen HR-Matrix angefügt und mit $T_{HR,min} - \Delta T_{HR,init} = 490$ K initialisiert. Folglich erhöht sich mit der Zeit die Anzahl der Reaktoren innerhalb einer HR-Matrix.

5.4.4 Stärken und Schwächen des Modells

Der Hauptvorteil des Progressvariablenansatzes besteht in der Einkopplung der während der Zündphase freigesetzten Energie. Dabei wird sowohl die turbulente Gemisch- wie auch deren Temperaturverteilung berücksichtigt. Des Weiteren kann die Reaktionszeit als Progressvariable im Mischungsbruchraum als konstant angenommen werden. Folglich ist keine Rekonstruktion einer komplexen Verteilung notwendig. Durch die Verwendung einer Online-Library, welcher zu jedem Zeitpunkt der aktuelle Brennraumdruck aufgeprägt wird, muss im Unterschied zu a priori (isobar) generierten Libraries keine Druck-Interpolation durchgeführt werden. Ein weiterer Vorteil des Online-Library-Konzepts ist es, dass (abhängig vom verwendeten kinetischen Mechanismus) beliebige Restgaszusammensetzungen verwendet werden können.

Zu den Nachteilen des Progressvariablenansatzes zählt der wegen der Generierung der Online-Library hohe Rechenaufwand. Hinzu kommen die geringen Tuning-Möglichkeiten des Modells wie auch die Tatsache, dass es sich primär um ein Wärmeeinkopplungsmodell mit vereinfachter Speziesumsetzung während der Zündphase innerhalb des CFD-Codes handelt.

5.4.5 Modelltechnische Verbesserungsmöglichkeiten

Der Fokus bei der Optimierung des Progressvariablenansatzes liegt insbesondere in der Behandlung der Matrizen der homogenen Reaktoren. Bisher ist die einzige mehr oder weniger indirekte Interaktion zwischen den homogenen Reaktoren der global aus der CFD-Simulation aufgeprägte Brennraumdruck. Durch Berücksichtigung der Volumenänderungsarbeit und der Wärmeleitung innerhalb einer HR-Matrix könnte diese Interaktion intensiviert werden.

Kapitel 6

Validierung der Modelle

6.1 Validierungsfälle

Für die Validierung des Multi-SR-Ansatzes (Abschnitt 6.3) und des Progressvariablensatzes (Abschnitt 6.4) in Bezug auf Diesel-HCCI-Brennverfahren werden die gleichen Validierungsfälle - basierend auf Messungen an 1-Zylinder-Motoren - verwendet. Sie werden im Folgenden tabellarisch vorgestellt (Tabelle 6.1).

	Einheit	A0	B1	B2	B3	C1	C2	C3
Fahrzeug	-	Pkw	Lkw	Lkw	Lkw	Pkw	Pkw	Pkw
Drehzahl	[1/min]	2000	1550	1550	1550	1500	1500	1500
p_{me}	[bar]	3.8	10.0	10.0	10.0	3.3	3.3	3.3
λ	[-]	2.0	1.8	1.8	1.8	3.1	1.8	1.5
Verdichtungsverh. ϵ	[-]	17.1	15.3	15.3	15.3	16.5	16.5	16.5
AGR-Rate (äußere)	[%]	30.0	24.0	24.0	24.0	0.0	38.6	45.9
Spritzmenge (ges.)	[mm^3 /Zyl.]	19.0	144.6	144.6	144.6	16.0	16.0	16.0
Spritzmenge (VE)	[mm^3 /Zyl.]	9.5	60.3	60.3	60.3	16.0	16.0	16.0
Anz. Pulse (VE/HE)	[-]	3/1	3/1	3/1	3/1	1/0	1/0	1/0
Abstand VE	[°KW]	7.5	15	15	15	-	-	-
Ansteuerbeginn VE ₁	[°KW nOT]	-60	-120	-100	-80	-55	-55	-55
Ansteuerbeginn HE	[°KW nOT]	2.5	-3	-3	-3	-	-	-
HD-Wert (bei 100 bar)	[cm^3 /30s]	280	800	800	800	400	400	400
Lochzahl	[-]	8	8	8	8	7	7	7
Spritzwinkel	[°]	120	80	80	80	100	100	100
Einspritzdruck	[bar]	1000	1500	1500	1500	550	550	550

Tabelle 6.1: Motorische Daten der 3D-Validierungsfälle.

Validierungsfall A0 dient als Referenzfall, an dem auch lokale Auswertungen der Simulationsergebnisse durchgeführt werden. Alle weiteren Validierungsfälle (B1-B3, C1-C3) werden nur integral hinsichtlich Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf betrachtet.

Für die Validierung einer Spritzbeginn-Variation werden die homogenen Lkw-Betriebspunkte

B1 bis B3 herangezogen. Die Pkw-Betriebspunkte C1 bis C3 haben zum Ziel, die Modelle hinsichtlich einer AGR-Variation zu validieren.

Die zu Tabelle 6.1 zugehörigen indizierten Druckverläufe zeigt Abbildung 6.1. Im Falle der Validierungsfälle B1, B2 und B3 sind zusätzlich zu den indizierten Druckverläufen mit gestrichelten Linien modifizierte Druckverläufe ohne Berücksichtigung der Haupteinspritzung eingetragen. Für die Validierung des Multi-SR-Ansatzes werden diese Verläufe verwendet, da sich gezeigt hat, dass die diffusive Verbrennung der Haupteinspritzung nur unzureichend durch das Modell abgebildet werden kann. Da der Fokus dieser Arbeit jedoch auch homogenen Diesel-Brennverfahren liegt, stellt für die Modellvalidierung dieser Teil der Verbrennung keinen Mehrwert dar. Die Expansionsphase der Validierungsfälle B1, B2 und B3 ohne Haupteinspritzung wurde dabei mittels einer Druckverlaufsanalyse angepasst.

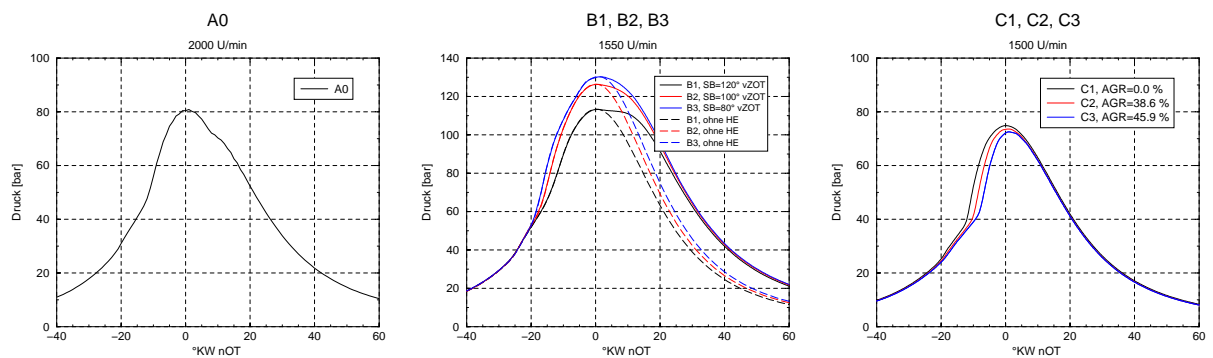


Abbildung 6.1: Indizierte Druckverläufe der Validierungsfälle.

In Abbildung 6.2 werden die separat an einem Einspritzprüfstand gemessenen Einspritzverläufe der einzelnen Validierungsfälle skizziert. Während es sich bei den Fällen A0 und B1-B3 um teilhomogene Brennverfahren mit einer frühen homogenen Einspritzphase und einer heterogenen Haupteinspritzung Bereich des OT handelt, werden die rein homogen ausgerichteten Validierungsfälle C1-C3 mit einer einzelnen Blockeinspritzung umgesetzt.

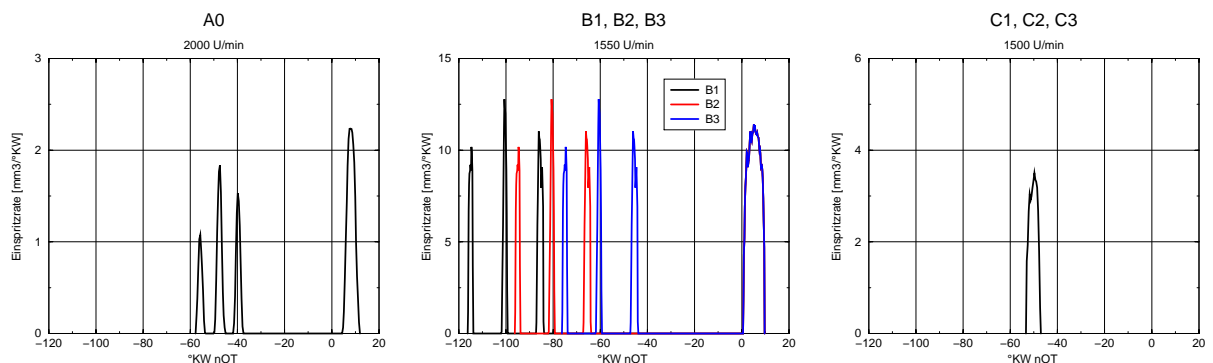


Abbildung 6.2: Einspritzverläufe der Validierungsfälle.

Für die anfängliche Validierung der Energie-Einkopplung der Modelle in den 3d-CFD-Code dient ein simpler 0-dimensionaler HR-Testfall (siehe Tabelle 6.2). Auf dieser Basis wird bewertet, ob insbesondere die vereinfachte Spezies-einkopplung in den 3d-CFD-Code zu

signifikanten Unterschieden in der Verbrennungsthermodynamik führt.

T_{start} [K]	p_{start} [bar]	λ [-]	ϵ [-]	Wandwärme
690.0	12.5	3.0	16.0	adiabat

Tabelle 6.2: HR-Validierungsfall.

6.2 Kinetischer Mechanismus

Für alle folgenden Validierungsrechnungen des Multi-SR-Ansatzes wie auch des Progressvariablenansatzes wird der etablierte n-Heptan-Mechanismus von Golovitchev [100] verwendet. Dabei handelt es sich um einen reduzierten Mechanismus mit 57 Spezies und 290 Reaktionsgleichungen, welcher auch in der Lage ist, mehrstufige Zündvorgänge abzubilden.

6.3 Multi-SR-Ansatz

6.3.1 0D-Validierung

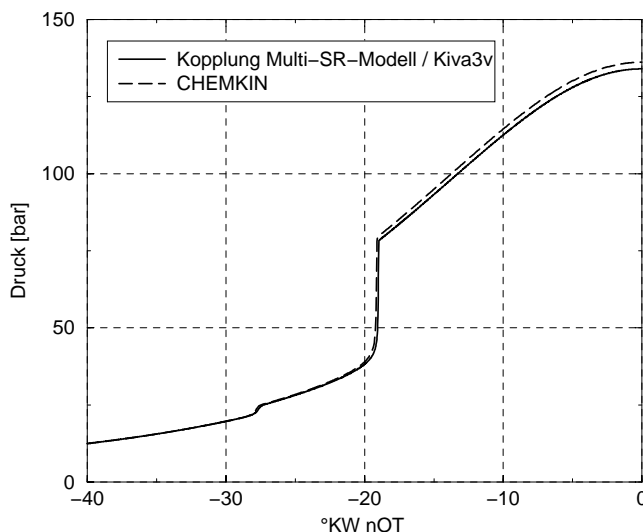


Abbildung 6.3: 0D-Vergleich (kompressible HR-Rechnung): Kopplung Multi-SR-Code/3d-CFD-Code, separate CHEMKIN-Rechnung [134].

CFD-Code dient in erster Linie der realistischeren Abbildung der Verdampfung und des Wandwärmeübergangs. Deshalb sind die Abweichungen in Abbildung 6.3 als unkritisch anzusehen.

Für die 0D-Validierung der Kopplung zwischen dem Multi-SR-Code und dem 3d-CFD-Code KIVA [87] dient der kompressible HR-Validierungsfall aus Tabelle 6.2. Die 3d-CFD-Rechnung wird lediglich mit 2 identisch initialisierten Zellen durchgeführt. Der Vergleich zwischen dem Druckverlauf des 3d-CFD-Codes mit der separat durchgeführten CHEMKIN-Rechnung [134] ergibt nur geringe Differenzen (Abbildung 6.3). Diese sind erklärbar mit der vereinfachten Einkopplung der im Multi-SR-Modell kinetisch freigesetzten Energie in das 7-Spezies Modell. Wie in Abschnitt 4.4 erläutert, erfolgt beim Multi-SR-Modell die Bewertung der Zündung und Verbrennung primär über das System der stochastischen Reaktoren. Die sekundäre Einkopplung der freigesetzten Energie in den 3d-

6.3.2 3d-Validierung des Referenzfalls A0

Multi-SR Initialisierung

Für diese wie für alle folgenden Validierungsrechnungen wurde eine Zahl von 200 SR verwendet. Jeder SR wurde durch je 10 HR repräsentiert. Die verwendeten Werte für die 11 Stützstellen zur Begrenzung der λ -Bereiche der einzelnen HR sind in Tabelle 6.3 angegeben.

Stützstelle	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
λ -Wert	∞	5.0	3.0	2.0	1.5	1.2	1.0	0.8	0.5	0.3	0.0

Tabelle 6.3: λ -Stützstellen der HR im Multi-SR-Modell.

Zur Verdeutlichung des Zusammenspiels zwischen Multi-SR-Modell und dem 3d-CFD-Code ist in Abbildung 6.4 der Referenzfall A0 zum Zeitpunkt der Partikelinitialisierung (Spritzbeginn) dargestellt. Das linke Bild zeigt die räumliche Verteilung der Partikel im Brennraum und ihre farblich hervorgehobene Masse. Jedes einzelne Partikel repräsentiert einen SR. Der hohe Grünanteil beweist die Homogenität der Massenverteilung, welche direkt aus der homogenen Verteilung der Partikel herrührt. Lediglich im Bereich der Zylinderachse generiert der Algorithmus für die Verteilung der Partikel relativ kleine SR-Massen bedingt durch die spitz zulaufende Geometrie des Sektor-Netzes. Einige wenige SR-Partikel im Quetschspalt erhalten eine überdurchschnittlich große Masse. Jedem SR-Partikel werden die zum aktuellen Zeitpunkt räumlich nächsten CFD-Zellen als Nachbarzellen (rechtes Bild) zugeordnet. Die Summe der Massen der Nachbarzellen eines SR soll dabei möglichst genau die Masse des SR selbst widerspiegeln.

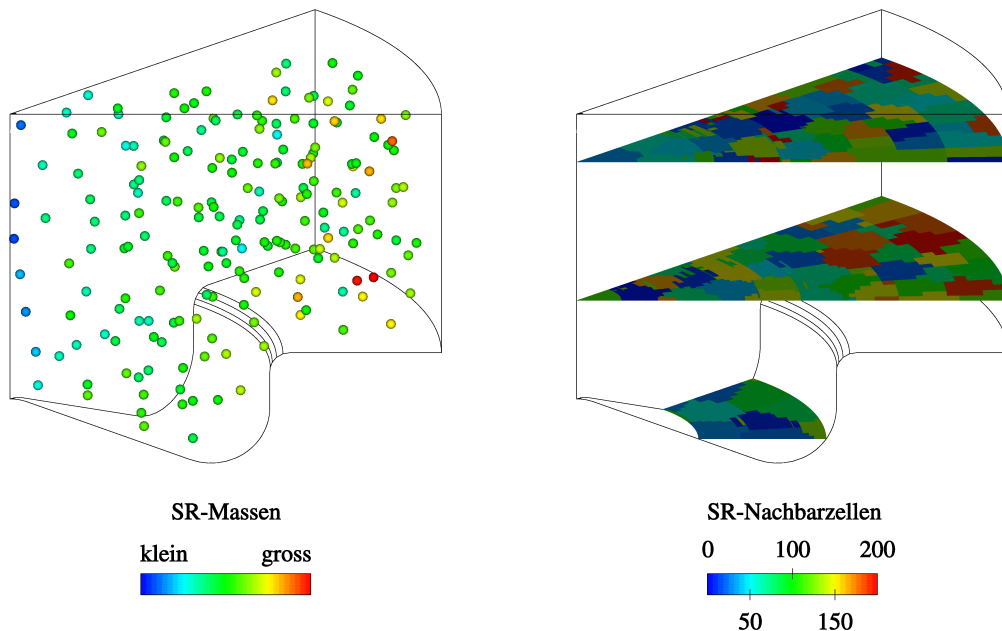


Abbildung 6.4: Massenverteilung zu Beginn der Partikelinitialisierung (linkes Bild), Schnittdarstellung der Nachbarzellen im CFD-Code (rechtes Bild).

Konsistenz von CFD- und Multi-SR-Berechnung (global)

Da es sich beim Multi-SR-Ansatz um die Kopplung zweier Berechnungssysteme handelt, muss die Konsistenz beider Systeme gewährleistet sein. In Abbildung 6.5 (links) ist ein Vergleich der Massen der Gasphase dargestellt. Die Identität beweist die Konsistenz der beiden Systeme.

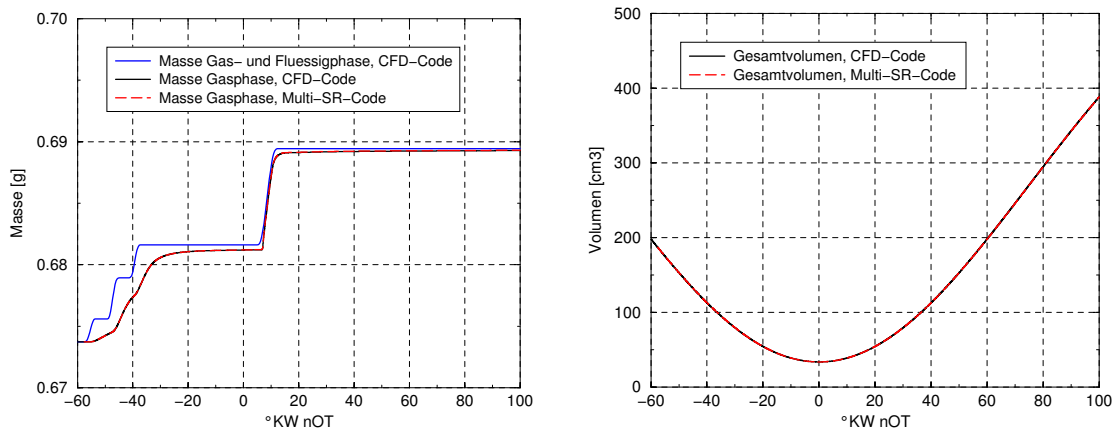


Abbildung 6.5: Vergleich CFD-Code / Multi-SR-Code: Gesamtmasse (links), Gesamtvolumen (rechts)

Dies gilt insbesondere auch für die Massenzunahme durch Kraftstoffverdampfung während der Einspritzung. Zusätzlich ist in das Diagramm auch die Masse des CFD-Codes inklusive der Flüssigphase eingetragen. Die Massenzunahme der reinen Gasphase reagiert verzögert. Grund dafür sind einerseits die wegen der frühen Einspritzung geringen Brennraumtemperaturen, welche den Verdampfungsprozess verlangsamen. Andererseits führen die frühen Einspritzungen auch zur Wandfilmbildung. Auch hier ist eine Verzögerung der Verdampfung die Folge. Ein Indiz für eine geringe Wandfilmbildung sind die Differenzen der Gesamtmassen im CFD-Code mit und ohne Berücksichtigung der Flüssigphase. Diese bleiben auch nach Beendigung der einzelnen Einspritzpulse noch bestehen und gleichen sich nur langsam einander an. Wie Abbildung 6.5 (rechts) beweist, ist die Identität des Gesamtvolumens beider Berechnungssysteme ebenfalls erfüllt.

Zur Bewertung des integralen Gemischbildungsverhaltens beider Berechnungssysteme wurde ein Vergleich der potentiell fetten Kraftstoffmassenanteile durchgeführt (siehe Abbildung 6.6). Als fetter Kraftstoffmassenanteil wird dabei derjenige Anteil ermittelt, der bei stöchiometrischer Umsetzung der verfügbaren Kraftstoffmasse mit der gegebenen Sauerstoffmasse nicht umgesetzt werden kann.

Bei der Bestimmung dieses Anteils wurde jeweils die turbulente Kraftstoff- bzw. Gemischverteilung berücksichtigt. Dazu wurde im CFD-Code auf Basis des Mischungsbruchkonzepts (siehe Anhang A) durch stückweise Integration der β -PDF die inerten Kraftstoff- und Sauerstoffmassen in den jeweiligen Mischungsbruchintervallen berechnet. Innerhalb des Multi-SR-Codes wurde die turbulente Verteilung berücksichtigt, indem die fetten Kraftstoffmassenanteile aller HR des Gesamtsystems aufintegriert wurden. Dabei wurde der fette Kraftstoffmassenanteil durch Auswertung der Elementmassen C und O unter Berücksichtigung der Zusammensetzung von n-Heptan (C_7H_{16}) bestimmt.

Der Anstieg der fetten Kraftstoffmasse während der homogenen Einspritzungen wird in beiden Berechnungssystemen bis zu 30°KW vOT qualitativ ähnlich abgebildet. Der Maximalwert liegt

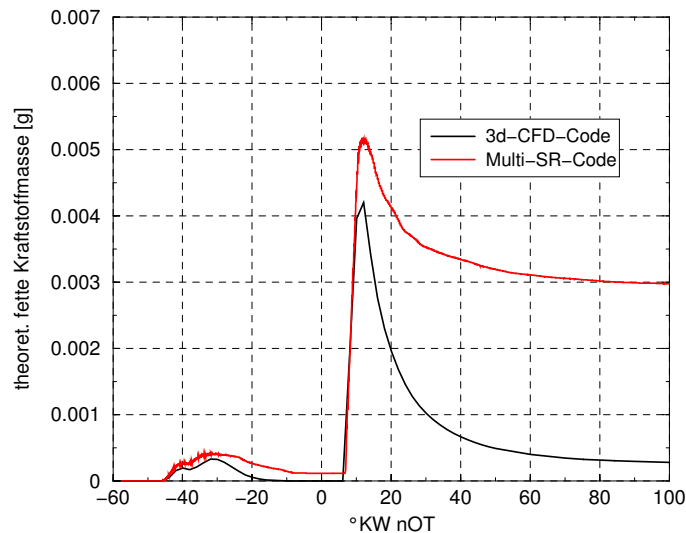


Abbildung 6.6: Vergleich CFD-Code / Multi-SR-Code: Potentiell fette Kraftstoffanteile

beim Multi-SR-Modell geringfügig höher. Die Abnahme der fetten Kraftstoffmasse nach den Voreinspritzungen durch allmähliche Ausmagerung des Gemischs findet jedoch im 3d-CFD-Code ausgeprägter statt. Ab etwa 15°KW vOT liegen dort keine fetten Kraftstoffanteile mehr vor. Im Multi-SR-Code dagegen läuft dieser Prozess der Ausmagerung verlangsamt ab und etwa 10°KW vOT ist ein nahezu konstantes Niveau des fetten Kraftstoffmassenanteils erreicht. Mit der Haupteinspritzung steigt etwa 5°KW nOT der fette Kraftstoffmassenanteil in beiden Berechnungssystemen sprunghaft an. Der im Multi-SR-Modell erreichte Höchstwert liegt dabei etwa 20% oberhalb dem des 3d-CFD-Codes. Die sich anschließende Ausmagerung weist im 3d-CFD-Codes einen deutlich stärkeren Gradienten als im Multi-SR-Code auf. Als direkte Folge daraus ergibt sich, dass im Multi-SR-Code das Endniveau im Vergleich zum 3d-CFD-Code deutlich überschätzt wird. Die Ursache dafür liegt an der derzeitigen Modellierung des Stoffaustauschs zwischen den SR (siehe Abschnitt 4.4.8). Die dazu gebildeten SR-Paarungen mit kleinstmöglichem Abstand können während der konvektiven Bewegung lange erhalten bleiben, so dass sich der Stoffaustausch über einen längeren Zeitraum auf einzelne SR-Paare beschränken kann. Im Falle global fetter Bedingungen eines solchen SR-Paars findet folglich nach vollständiger Durchmischung keine Reduzierung des fetten Kraftstoffanteils mehr statt. Eine Verbesserung des Ausmagerungsverhaltens innerhalb des Multi-SR-Codes könnte durch eine räumliche Ausweitung des Stoffaustauschprozesses auf mehrere SR erzielt werden.

Konsistenz von CFD- und Multi-SR-Berechnung (lokal)

Die zeitliche Entwicklung der SR-Partikel verdeutlichen die Bildsequenzen in den Abbildungen 6.7 und 6.8. Im jeweils linken Bild ist die konvektive Bewegung der Partikel in Form von Geschwindigkeitsvektoren dargestellt. Die rote Färbung der SR-Partikel dient dabei lediglich dem besseren Kontrast zu den schwarzen Vektoren.

Die mittleren Bilder zeigen die SR-Temperaturen, welche sich aus der Mittelung aller HR ergeben. In der rechten Bildspalte ist die $\lambda=3$ -Isofläche dargestellt, die sich innerhalb des 3d-CFD-Codes während der Simulation ergibt. Sie dient in dieser Bildsequenz primär als optischer Anhaltspunkt für die Lage der Einspritzstrahlen und für die Ausbreitung des gasförmigen Kraftstoffs.

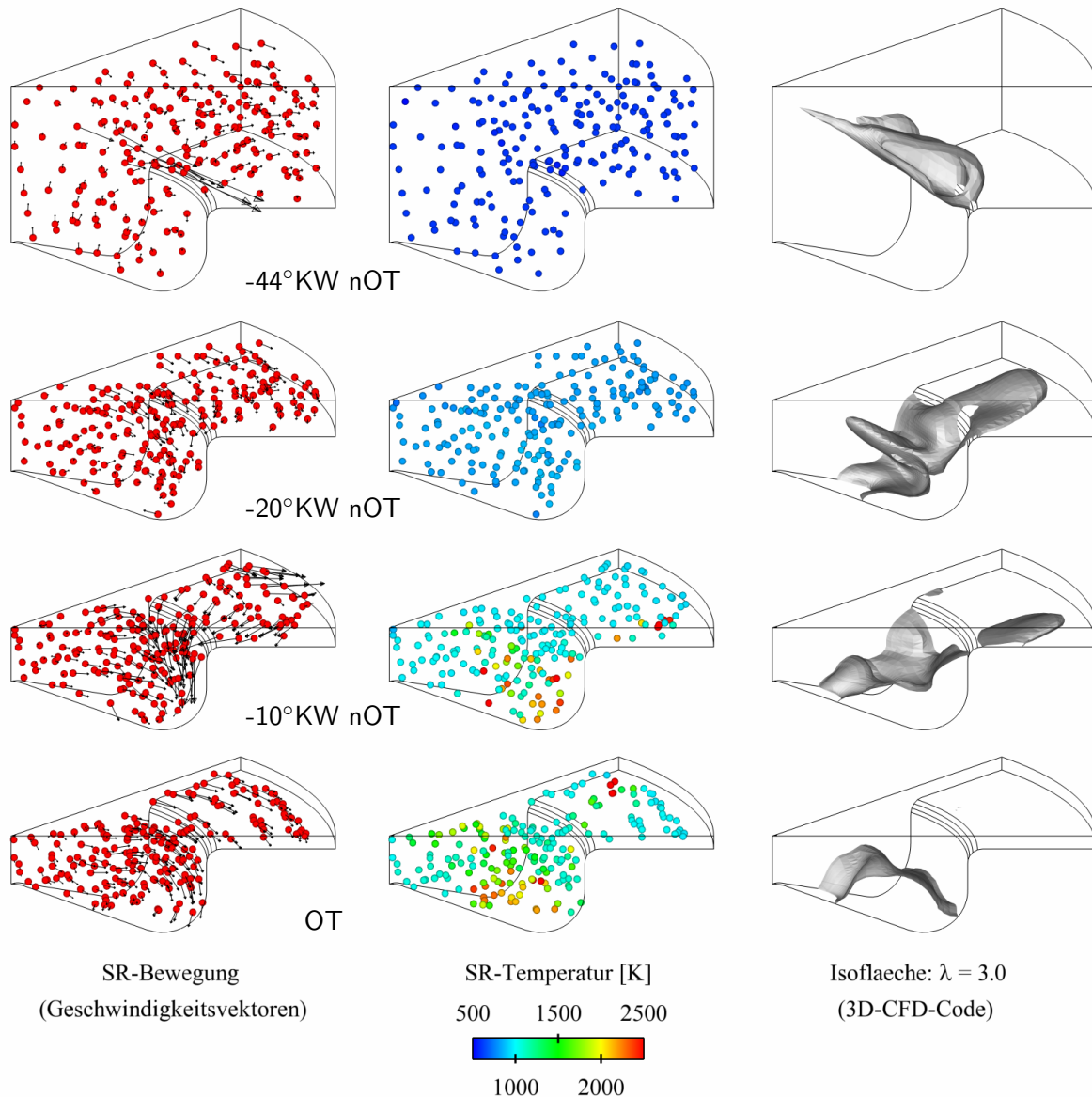


Abbildung 6.7: Validierungsfall A0: Lokale Verteilung der SR-Partikel mit Geschwindigkeitsvektoren (links), SR-Temperaturen (Mitte), $\lambda=3$ -Isfläche im 3d-CFD-Code (rechts), (Sequenz -44°KW nOT bis OT).

Da der Ansteuerbeginn der ersten der insgesamt drei Voreinspritzungen von Referenzfall A0 bereits bei -60°nOT erfolgt ist, liegt der Zeitpunkt -44°KW nOT in Abbildung 6.7 mitten in der Voreinspritzphase. Dies ist deutlich an der gerade erst an der Muldenkante angelangten und noch keulenförmigen Gemischwolke im rechten Bild wie auch an den hohen SR-Partikelgeschwindigkeiten in Strahlnähe im linken Bild zu sehen. Zu diesem Zeitpunkt sind noch keine Reaktionen erkennbar (mittleres Bild). Eine Bildsequenz später (-20°KW nOT) sind die Voreinspritzungen bereits abgeschlossen und die Gemischwolke hat sich, begünstigt durch das Auftreffen auf der Muldenkante, in die Mulde und den Quetschspalt aufgeteilt. Im Bereich der Mulde ist in vereinzelt SR ein leichter Temperaturanstieg auszumachen als Zeichen der beginnenden Vorreaktionen. Zum nächsten dargestellten Zeitpunkt (-10°KW nOT) haben einige SR bereits vollständig durchgezündet. Bemerkenswert ist in dieser

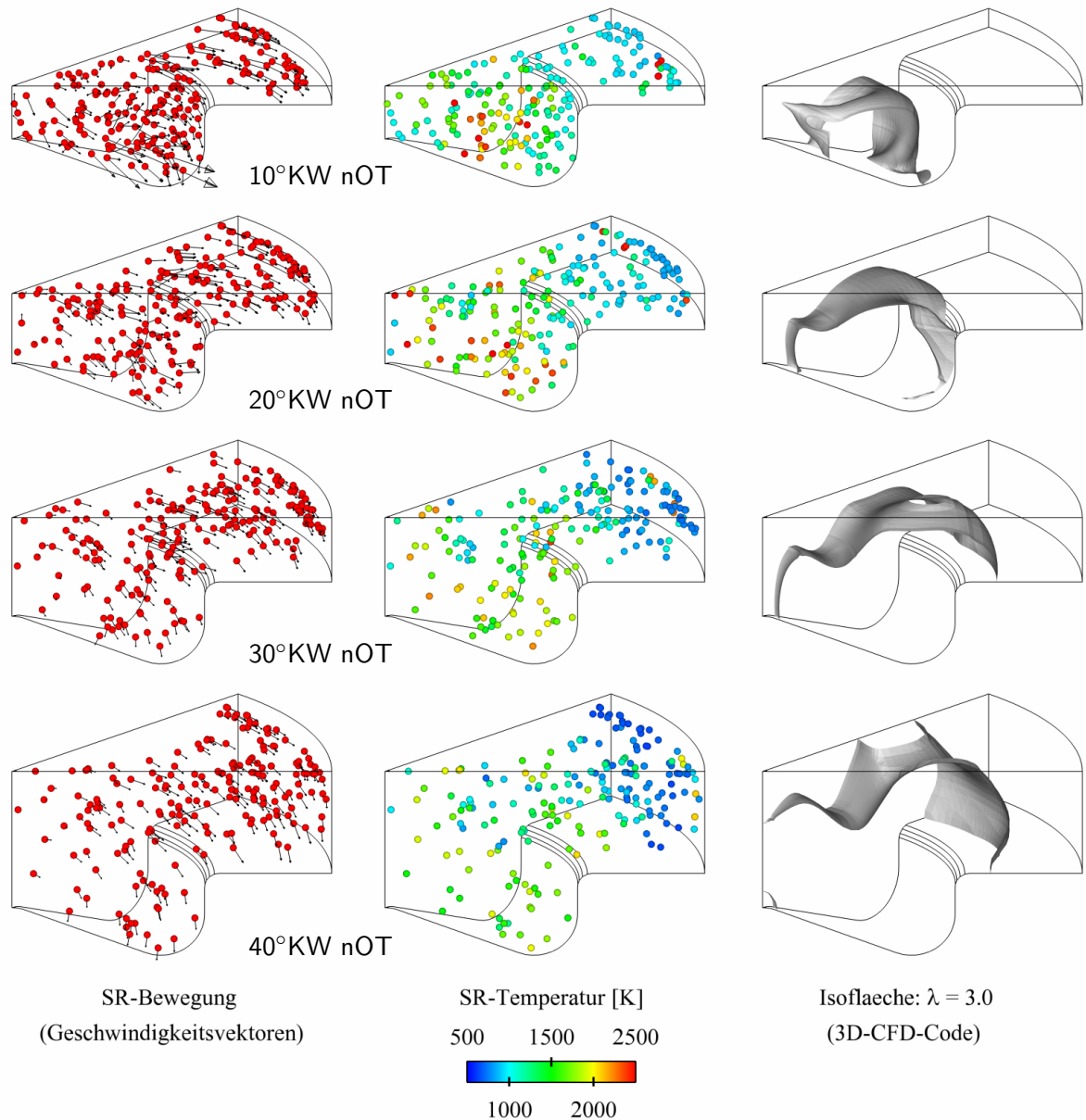


Abbildung 6.8: Validierungsfall A0: Lokale Verteilung der SR-Partikel mit Geschwindigkeitsvektoren (links), SR-Temperaturen (Mitte), $\lambda=3$ -Isosfläche im 3d-CFD-Code (rechts), (Sequenz 10° KW nOT bis 40° KW nOT).

Bildsequenz die gute örtliche Übereinstimmung der gezündeten SR im Quetschspalt mit der Lage der dortigen $\lambda=3$ -Isosfläche. Gleiches gilt auch für die SR-Partikel in der Mulde. Dies kann als Beweis angesehen werden, dass die konvektive Bewegung der SR-Partikel gut die Gemischverteilung im 3d-CFD-Code repräsentiert. Im oberen Totpunkt (OT) weisen viele SR in der Mulde wie auch im Quetschspalt eine mittlere bis hohe Temperatur auf. Wie sowohl am Vektorbild als auch an der λ -Isosfläche zu sehen ist, erfolgt zum Zeitpunkt 10°KW nOT die Haupteinspritzung. Wegen der einsetzenden Expansionsphase sinken im Zeitraum 20-40°KW nOT die SR-Temperaturen. Korrelierend zur sich aufweitenden Gemischwolke, induziert durch den Strahlimpuls der Haupteinspritzung und durch das Ansaugen des Quetschspaltbereichs, findet bei den reaktiven SR eine zunehmende Verteilung im Brennraum statt. Die nicht

reaktiven SR dagegen konzentrieren sich konform zur Gemischwolke im 3D-CFD-Code in der Nähe der Zylinderwand und im Bereich der Brennraummittelachse (40°KW nOT).

Detaillierte Validierung der Multi-SR-Berechnung

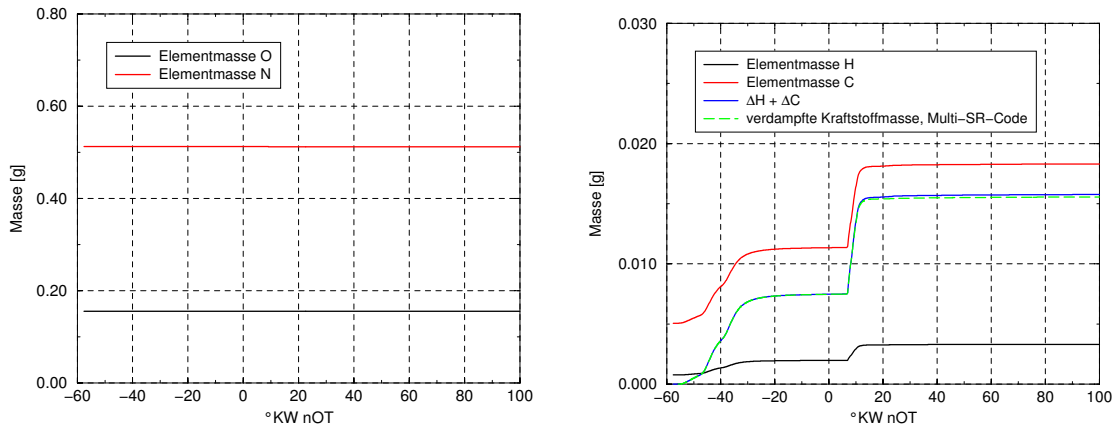


Abbildung 6.9: Entwicklung der Elementmassen während der Multi-SR-Berechnung: O- und N-Masse (links), H- und C-Masse (rechts)

Für die Validierung der korrekten Abbildung der Einspritzung und Reaktion ist in Abbildung 6.9 der globale Verlauf der Elementmassen von O, N, H und C innerhalb des SR-Systems aufgetragen. Da der verwendete Modellkraftstoff n-Heptan (C_7H_{16}) lediglich aus H- und C-Atomen besteht, ändern sich korrekter Weise die Elementmassen von O und N weder durch Einspritzung noch durch Reaktion (linkes Diagramm). Dagegen erfahren während der Einspritzung die Elementmassen von H- und C-Atomen einen Massenanstieg, der jedoch ebenfalls durch die einsetzenden Reaktionen nicht beeinflusst wird (rechtes Diagramm). Ebenfalls stimmig zeigt sich der Verlauf des Massenanstiegs der aufsummierten H- und C-Atomen mit dem Massenverlauf des dampfförmig eingekoppelten Kraftstoffs in das Multi-SR-Modell.

Zur Veranschaulichung der Funktionsweise und zur Prüfung der Plausibilität des Multi-SR-Modells auf SR- bzw. HR-Ebene werden im Folgenden zwei der 200 verwendeten SR im Detail analysiert. Der erste SR (Abbildung 6.10) steht repräsentativ für all diejenigen SR, die während der homogenen Voreinspritzungen eine Kraftstoffdampfeinkopplung erfahren. Der zweite SR (Abbildung 6.11) ist ein Beispiel für einen SR, der nur in geringem Maße Kraftstoffdampf während der homogenen Phase einkoppelt, jedoch einen sehr starken Kraftstoffdampfzunahme während der heterogenen Haupteinspritzung erfährt.

Betrachtet werden Temperatur, Masse, Kraftstoffmassenbruch, charakteristische turbulente Zeitskala, fetter Kraftstoffmassenanteil und das Massenverhältnis der C- und O-Atome. Für die Temperatur und Kraftstoffmassenbruch ist in den jeweiligen Diagrammen schwarz gestrichelt der über den SR gemittelte Verlauf mit aufgetragen. Im Diagramm der HR-Massen ist ebenfalls schwarz gestrichelt die Gesamtmasse des SR gekennzeichnet.

Beim nur von den Voreinspritzungen erfassten SR (Abbildung 6.10) ist deutlich an den Massenverläufen erkennbar, dass beginnend mit etwa -50°KW nOT der Kraftstoffdampf in den SR

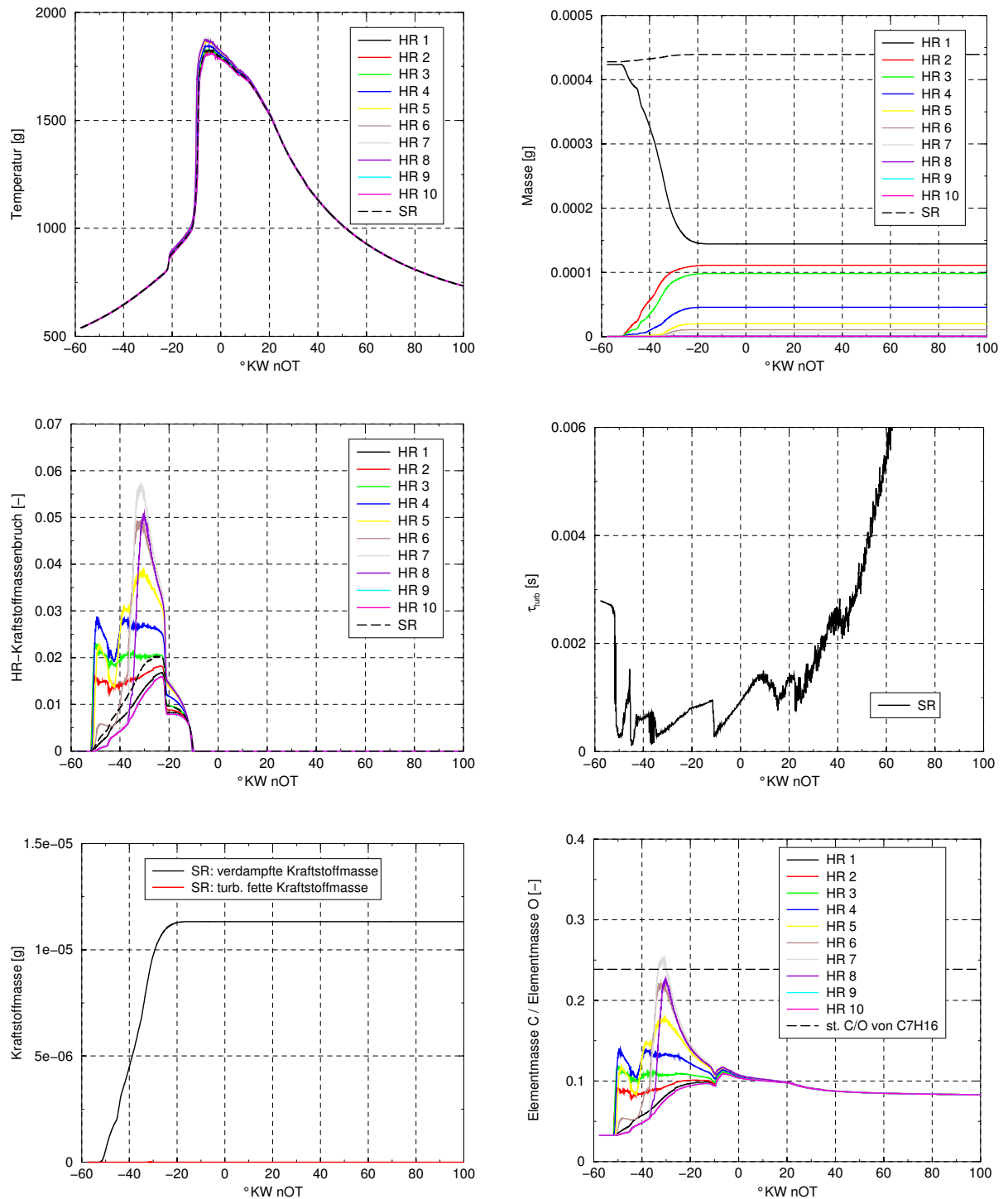


Abbildung 6.10: Entwicklung eines SR (bzw. seiner HR) mit Kraftstoffdampfeinkopplung während der homogenen Voreinspritzungen: Temperatur (oben links), Masse (oben rechts), Kraftstoffmassenbruch (Mitte links), charakteristische turbulente Zeitskala für Mischungsprozess (Mitte rechts), potentiell fette Kraftstoffanteile (unten links), C/O-Verhältnis (unten rechts)

eingekoppelt wird, was wiederum in einer Zunahme der Gesamtmasse des SR resultiert (Diagramm oben rechts). Gleichzeitig nimmt die Masse des HR_1 über den Verdampfungsprozess hinweg ab. Grund dafür ist die turbulente Dampfeinkopplung in die einzelnen HR, die entsprechend dem λ -Intervall, welches sie repräsentieren, einen äquivalenten Luft-AGR-Massenanteil aus dem HR_1 erhalten (siehe Abschnitt 4.4.5). Von der Haupteinspritzung, welche nach OT erfolgt, wird der hier exemplarisch dargestellte SR räumlich nicht erfasst und erfährt folglich auch keine weitere Massenzunahme. Die Tatsache, dass der HR_1 bis zum Ende der Rechnung ausreichend Masse aufweist, ist eine Beleg dafür, dass in allen λ -Intervallen während der Kraftstoffdampfeinkopplung immer auch die jeweils korrelierende Luft-AGR-Menge mit eingekoppelt werden konnte (Details siehe Abschnitt 4.4.5). An dieser Stelle sei angemerkt, dass die Massen der HR nicht durch Mischungsprozesse verändert werden (siehe Abschnitt 4.4.7). Folglich bleiben die Massen nach Beendigung der Kraftstoffdampfeinkopplung konstant.

Betrachtet man die Temperaturverläufe (Diagramm oben links), so ist bis zum Einsetzen der Cool-Flame-Verbrennung (ab ca. -22°KW nOT) das bei allen HR nahezu gleiche Temperaturniveau zu erkennen. Dies resultiert aus dem turbulenten Mischungsprozess, der auch die Temperaturunterschiede durch Kraftstoffverdampfung zwischen den HR schnell ausgleicht. Erst nach der Cool-Flame-Verbrennung treten signifikante Temperaturunterschiede auf, die nach Abschluss der Hauptverbrennung (ca. -10°KW nOT) bei einem Temperaturniveau von etwa 1800K ihr Maximum erreichen. Doch auch hier sorgt der turbulente Mischungsprozess für einen schnellen Ausgleich der Temperaturen bis etwa 20°KW nOT .

Auch im Verlauf der Kraftstoffmassenbrüche der HR (Diagramm Mitte links) ist deutlich der turbulente Mischungseffekt in Form einer starken Einschnürung der Kurvenverläufe hin zu ihrem gemeinsamen Mittelwert zu erkennen. Verantwortlich für den schnellen Mischungsprozess der Kraftstoffmassenbrüche sind - wie auch schon im Falle der Temperaturverläufe - die in dieser Phase sehr kleinen Werte der turbulenten charakteristischen Zeitskala τ (Diagramm Mitte rechts). Mit Einsetzen der Cool-Flame-Verbrennung werden bedingt durch die Umsetzung des Kraftstoffs in Zwischenprodukte die Kraftstoffmassenbrüche stark reduziert und gehen mit Beginn der Hauptverbrennung auf 0 zurück.

Der hier dargestellte SR weist keine signifikante Menge an fettem Kraftstoff auf, wie der Vergleich mit der insgesamt in den SR eingekoppelten Kraftstoffmenge zeigt (Diagramm unten links). Sowohl für die Bewertung des Fettverhaltens einzelner HR als auch für die Bewertung des Mischungsgrades ist die Auftragung des C/O-Verhältnisses der einzelnen HR für die Validierung sehr hilfreich (Diagramm unten rechts). Wird dabei das stöchiometrische C/O-Verhältnis von n-Heptan (C_7H_{16}) mit einem Wert von 0.2386 überschritten, so ist dies ein Beleg für ein fettes Luft-Kraftstoff-Gemisch. Im Falle des in Abbildung 6.10 dargestellten SR liegt für den HR_7 zwischen -34°KW nOT und -30°KW nOT kurzzeitig ein fettes Gemisch vor. Des Weiteren zeigt sich, dass sich die C/O-Verhältnisse aller HR etwa bei OT angeglichen haben. Dies zeigt, dass auf Gemisebene der Mischungsprozess abgeschlossen ist. Da das C/O-Verhältnis aller HR dann unterhalb der Fettgrenze von 0.2386 liegt, weist dieser SR auch global ein mageres Verhalten auf. Das weitere gleichmäßige Absinken des C/O-Verhältnisses der einzelnen HR ist auf den Mischungsprozess mit dem jeweils nächstliegenden SR zurückzuführen (siehe auch Abschnitt 4.4.8).

Primär von der Haupteinspritzung wird hingegen der SR in Abbildung 6.10 erfasst. Die Kraftstoffdampfeinkopplung während der homogenen Phase beginnend etwa -38°nOT und endend ca. -20°nOT ist nur sehr gering (Diagramm oben rechts). Deutlich größer ist Dampfmasse, die während der heterogenen Einspritzung kurz nach OT eingekoppelt wird. Dabei ist diese Menge

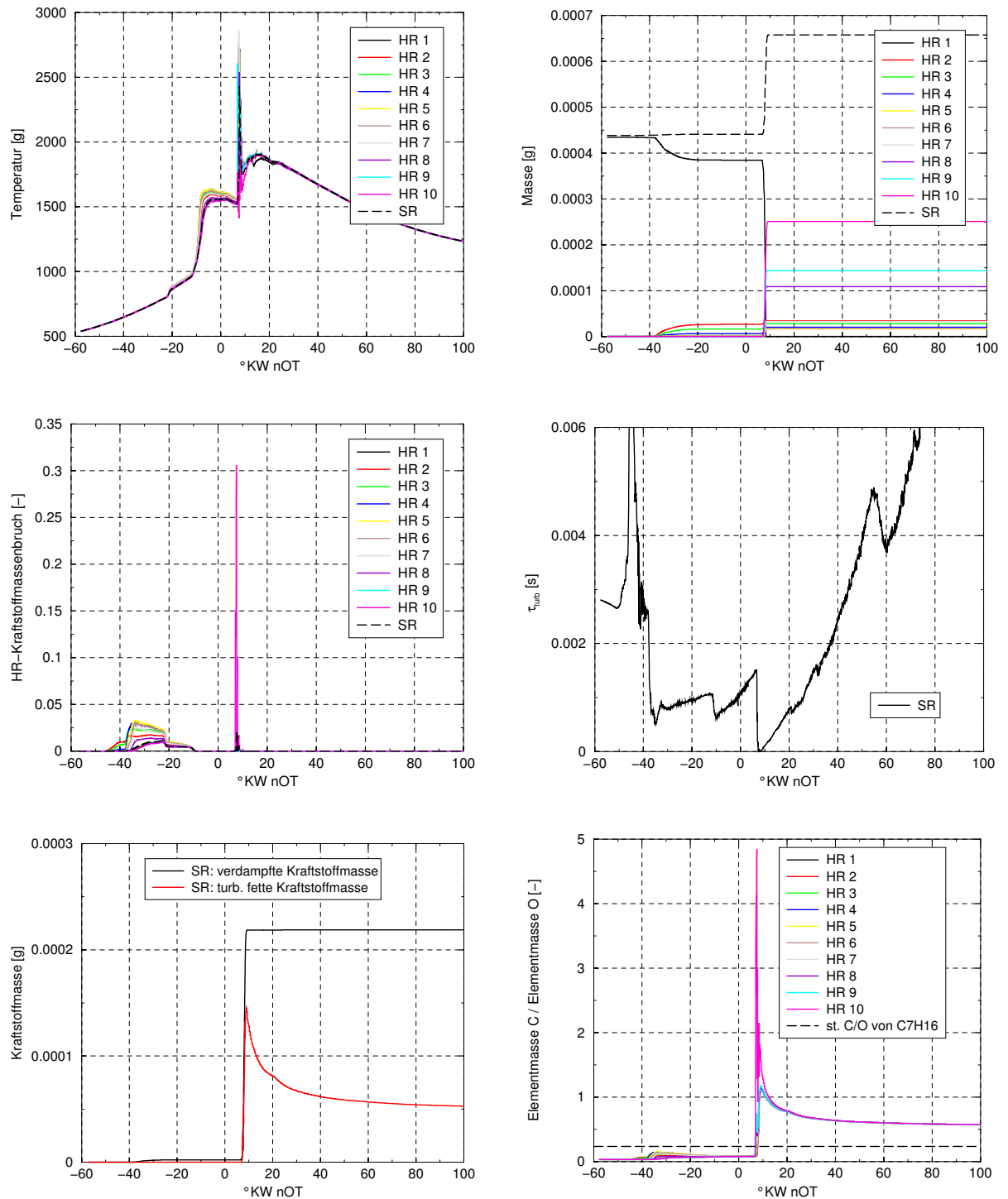


Abbildung 6.11: Entwicklung eines SR (bzw. seiner HR) mit Kraftstoffdampfeinkopplung primär während der heterogenen Haupteinspritzung: Temperatur (oben links), Masse (oben rechts), Kraftstoffmassenbruch (Mitte links), charakteristische turbulente Zeitskala für Mischungsprozess (Mitte rechts), potentiell fette Kraftstoffanteile (unten links), C/O-Verhältnis (unten rechts)

so groß, dass bei der turbulenten Zumischung des Luft-AGR-Anteils aus HR₁ in die einzelnen HR die Masse des HR₁ vollständig aufgebraucht wird. Auffällig ist auch, dass bei der turbulenten Dampfeinkopplung der HR₁₀ als Repräsentant des fettesten λ -Bereichs (siehe Tabelle 6.3) auch die größte Gesamtmasse aufweist. Dies ist ein Beleg für die sehr fetten Bedingungen während der heterogenen Dampfeinkopplung. Der daraus resultierende ausgeprägte Luftmangel wirkt sich auch auf die Temperaturverläufe aus (Diagramm oben links). Lediglich zu Beginn der Dampfeinkopplung in der heterogenen Phase bei ca. 8° nOT treten kurzzeitig Temperaturspitzen mit Werten größer als 2500 K auf. Die drastische Absenkung der turbulenten Zeitskala in dieser Phase (Diagramm Mitte rechts) und die folglich sehr intensive Mischung zwischen den HR führt jedoch zu einer schnellen Absenkung des Temperaturniveaus unter 2000 K. Trotz der großen eingekoppelten Kraftstoffdampfmenge wird der gesamte Kraftstoff zumindest in die Zwischenprodukte umgesetzt, wie aus dem Verschwinden der Kraftstoffmassenbrüche in allen HR geschlossen werden kann (Diagramm Mitte links). Auch wenn durch den Mischungsprozess zwischen den HR (wie auch durch den zusätzlichen Mischungsprozess mit dem nächstliegenden SR) der fette Kraftstoffmassenanteil im gesamten SR abnimmt (Diagramm unten links), so bleibt doch etwa 25% des eingekoppelten Kraftstoffs final in fetter Form erhalten. Dieser Effekt zeigt sich auch im Verlauf des C/O-Verhältnisses der HR (Diagramm unten rechts): Während in der Phase der homogenen Kraftstoffdampfeinkopplung die C/O-Verhältnisse aller HR unterhalb des stöchiometrischen Werts liegen, weisen nach der heterogenen Phase alle HR ein fettes Verhalten auf.

Integrale Validierung der Verbrennung (Vergleich Messung/Rechnung)

Eine integrale Bewertung des Referenzfalls A0 hinsichtlich Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf (siehe Abbildung 6.12) zeigt in Bezug auf den Beginn der Cool-Flame-Zündung (ca. -22°KW nOT) und den Beginn der homogenen Verbrennung (ca. -17°KW nOT) eine gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation. Die Wärmefreisetzung der homogenen Verbrennungsphase erfolgt jedoch im Vergleich zur Messung etwas zu schnell, was auch zu einer geringen Überschätzung des Spitzendrucks führt. Das Niveau des Summenbrennverlaufs liegt in ZOT exakt auf der Messung. Auch beim Beginn der heterogenen Phase der Verbrennung (3. Spitze der Wärmefreisetzungsrates im Brennverlauf, ca. 10°KW nOT) zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Messung und Simulation. Lediglich das Ausbrandverhalten wird seitens der Simulation leicht unterschätzt. Die Ursache dafür liegt mit großer Wahrscheinlichkeit an der etwas zu schwachen Mischung in dieser heterogenen Phase der Verbrennung mit hohem Diffusionsanteil. Diese Mischungsproblematik hat sich schon in Abbildung 6.6 manifestiert. Es sei an dieser Stelle aber noch einmal ausdrücklich darauf hingewiesen, dass es nicht Ziel dieser Arbeit ist, diffusionsdominierte Verbrennungsprozesse abzubilden. Nichts desto trotz ist das primär für die homogene Verbrennung konzipierte Multi-SR-Modell in Grenzen in der Lage, auch Verbrennungsprozesse mit diffusivem Charakter zu beschreiben.

6.3.3 3d-Validierung von B1-B3, C1-C3

Im Folgenden wird der Multi-SR-Ansatz anhand einer Spritzbeginn-Variation (B1 bis B3) sowie durch eine AGR-Variation (C1 bis C3) validiert. Die Validierung erfolgt integral durch eine Druckverlaufsanalyse mit dem Brenn- und Summenbrennverlauf als Ergebnis. Als Bewertungskriterien dienen der Beginn und die Ausprägung der Cool-Flame, Beginn der Hauptverbrennung,

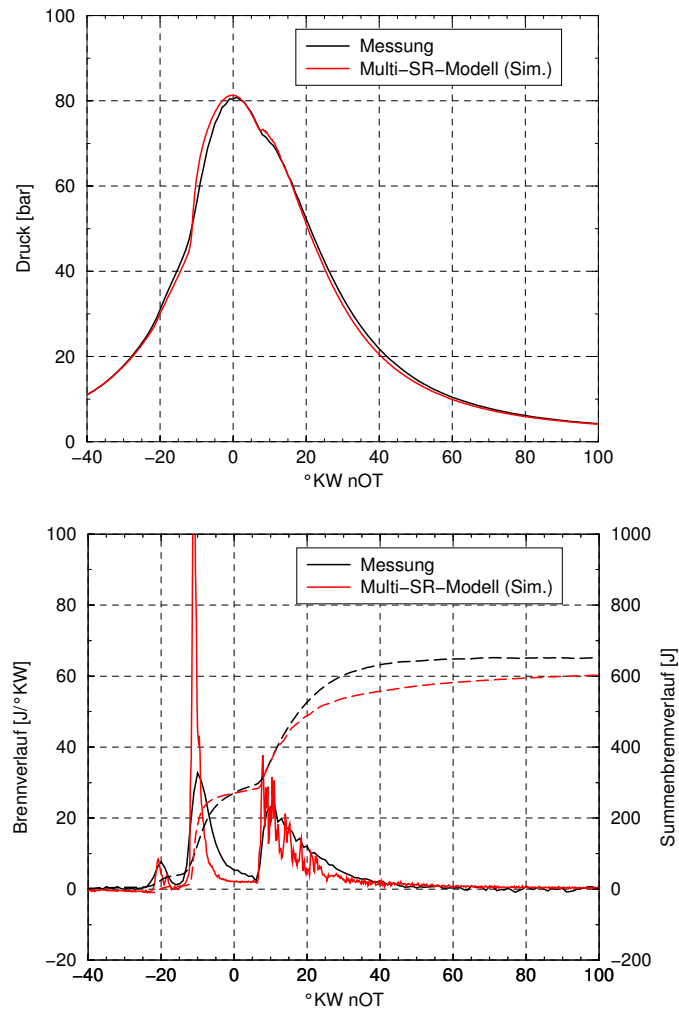


Abbildung 6.12: Validierungsfall A0 (2000 U/min, $p_{me}=4$ bar, teilhomogen): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf

Spitzendruck und Ausbrand. Zudem wird eine generelle Trendbewertung der vorliegenden Variation vorgenommen.

Der Vergleich zwischen Messung und Rechnung der teilhomogenen Validierungsfälle B1 bis B3 ist in Abbildung 6.13 dargestellt. Als Referenzergebnisse wurden bei den genannten Validierungsfällen die Haupteinspritzung und deren Einfluss auf den Druckverlauf eliminiert (siehe auch Abschnitt 6.1), da der Fokus des Multi-SR-Modells auf der Abbildung homogener Brennvorgänge liegt. Der Beginn der Cool-Flame-Verbrennung wie auch der Beginn der Hauptverbrennung wird trotz der sehr langen Zündverzugszeiten von allen simulierten Spritzbeginnvarianten im Vergleich zur Messung sehr gut getroffen. Dabei wird die Cool-Flame-Wärme freisetzung unterschätzt. Der Druckanstieg während der Hauptverbrennung stimmt jedoch wieder gut mit den Messergebnissen überein. Der Spitzendruck wird insbesondere für die Varianten $SB=80^\circ$ und $SB=100^\circ$ nur gering unterschätzt. Das Ausbrandverhalten wird ebenfalls gut wiedergegeben. Deutlich überschätzt wird dagegen das Spitzendruckniveau und auch das Ausbrandverhalten der Variante $SB=120^\circ$ mit dem wegen des frühesten Voreinspritzbeginns höchsten Homogenisierungsgrad. Insgesamt werden vom Multi-SR-Modell die Trends in Bezug auf Beginn der Hauptverbrennung, Spitzendruckniveau und Ausbrandverhalten korrekt

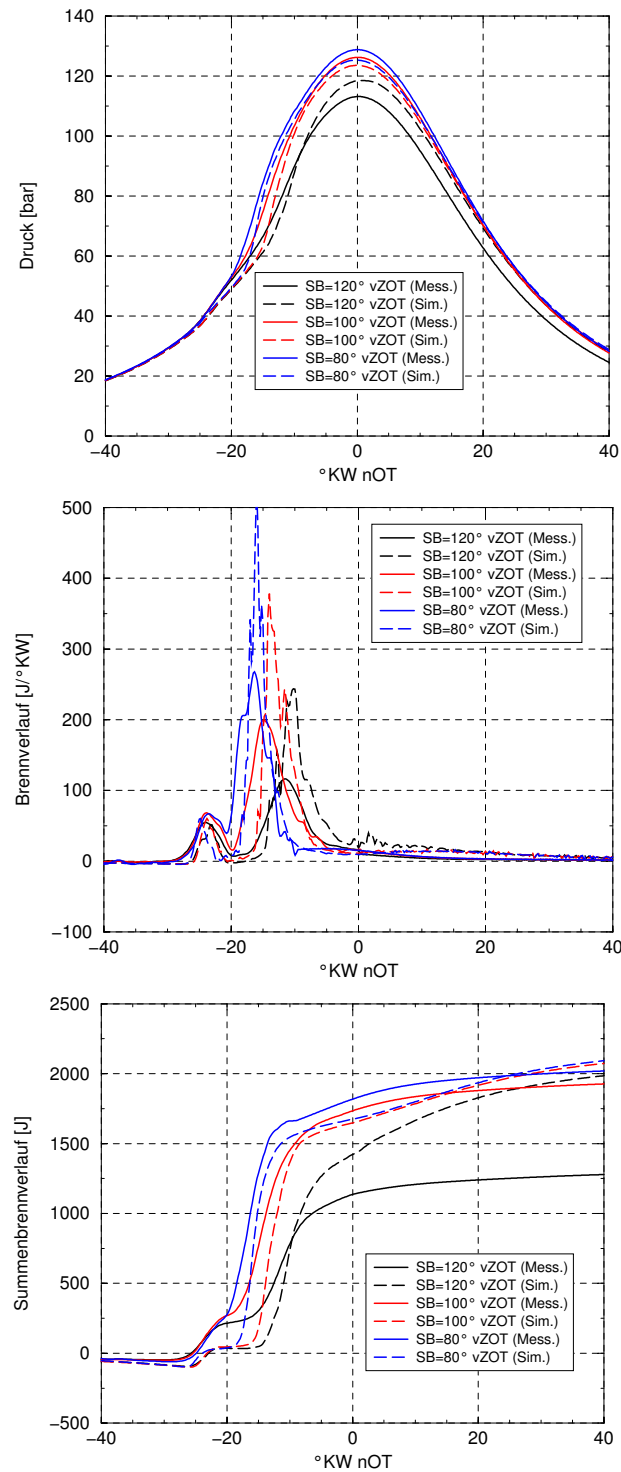


Abbildung 6.13: Validierungsfälle B1, B2 und B3 (1550 U/min, $p_{me}=10$ bar, teilhomogen): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf

beschrieben.

Die AGR-Variation auf Basis der homogenen Validierungsfälle C1 bis C3 zeigt Abbildung 6.14. Die Cool-Flame-Verbrennung beginnt in der Simulation in den Betriebspunkten mit höherer AGR etwas früher. Generell wird die Wärmefreisetzung während der Cool-Flame-Phase unterschätzt. Auffällig ist, dass der mit höherer AGR-Rate verzögerte Beginn der Hauptverbren-

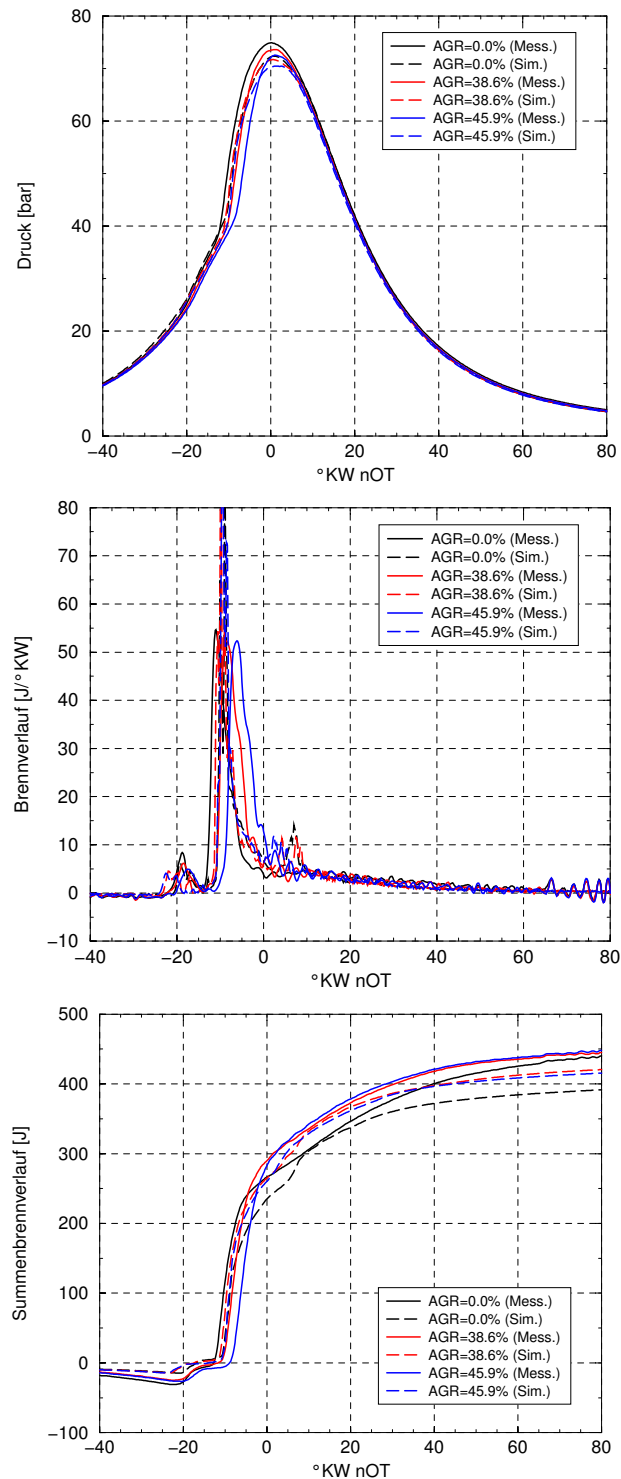


Abbildung 6.14: Validierungsfalle C1, C2 und C3 (1500 U/min, $p_{me}=3.3$ bar, homogen): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf

nung der Messung in der Simulation nur schwach abgebildet werden kann. Folglich beginnt die Hauptverbrennung in der Simulation in allen drei Betriebspunkten fast zeitgleich. Die Differenzierung bez. der Spitzendruckniveaus ist jedoch gegeben, wenn auch insgesamt das Spitzendruckniveau der Messung leicht unterschätzt wird. Der Trend im Ausbrandverhalten wird im Wesentlichen korrekt wiedergegeben. Die Niveaus der Summenbrennverläufe liegen jedoch

geringfügig unterhalb der Messung.

6.3.4 Bewertung des Multi-SR-Ansatzes bez. der Anwendung auf motorische Brennverfahren

Die Validierungsrechnungen zeigen das Potential des Multi-SR-Ansatzes für die Abbildung homogener Zünd- und Verbrennungsprozesse von Diesel-HCCI-Brennverfahren. Die Lage des Beginns der mehrstufigen Zündung wie auch der Hauptverbrennung stimmt gut mit den Messergebnissen überein, wenn auch die Wärmefreisetzung während der Cool-Flame-Verbrennung generell unterschätzt wird. Auch bei den Spitzendruckniveaus liegt eine gute Übereinstimmung mit den Messungen vor. Das Ausbrandverhalten wird in der Simulation in geringem Maße unterschätzt.

Wie sich beim homogen-heterogenen Validierungsfall gezeigt hat, besitzt das Multi-SR-Modell auch das Potential zur Abbildung von Verbrennungsprozessen mit hohem Diffusionsanteil. Hier sind jedoch weitere Untersuchungen erforderlich, die insbesondere eine Verbesserung des Mischungsprozesses zum Ziel haben sollten.

Das Multi-SR-Modell ist mit dem Fokus der Simulation von Diesel-HCCI-Brennverfahren entwickelt worden. Eine Ausweitung der Anwendung des Modells auch auf Otto-HCCI-Brennverfahren sollte bei Verwendung eines geeigneten Mechanismus problemlos möglich sein. Validierungsrechnungen sind jedoch bisher nicht vorgenommen worden.

6.4 Progressvariablenansatz zur Modellierung der Selbstzündung bei Diesel-HCCI-Verfahren

6.4.1 0D-Validierung

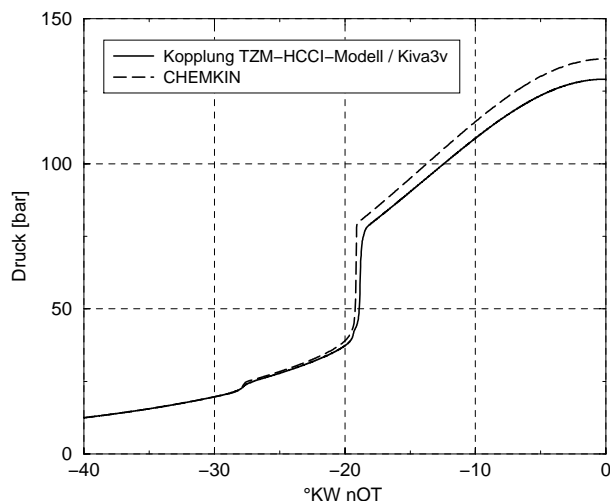


Abbildung 6.15: 0D-Vergleich (kompressible HR-Rechnung): Kopplung TQM-HCCI-Code/3d-CFD-Code, separate CHEMKIN-Rechnung [134].

Abbildung 6.15 zeigt den 0D-Druckvergleich zwischen der Einkopplung der Energiefreisetzung aus dem Progressvariablen-Modell in den 3d-CFD-Code mit einer äquivalenten CHEMKIN-Rechnung [134] auf Basis des HR-Validierungsfalls (siehe Tabelle 6.2). CFD-seitig wurde ein simples Netz bestehend aus 2 Zellen verwendet mit entsprechenden Anfangs- und Randbedingungen. Die Cool-Flame-Verbrennung wie auch der Zündbeginn der Hauptverbrennung zeigen eine gute Übereinstimmung. Gegen Ende der Hauptverbrennung treten jedoch größere Unterschiede auf, die durch die lineare Interpolation aus der Library bedingt sind. Dieser Teil der Verbrennung spielt jedoch im Zündmodell eine untergeordnete Rolle,

da gemäß Abschnitt 5.4.2 bei einer Umsetzung von 20% des Kraftstoffs einer CFD-Zelle die Umschaltung auf das Verbrennungsmodell erfolgt. Deshalb ist es ausreichend, wenn der Beginn des Druckanstiegs und der anfängliche Gradient des Verbrennungsdruckanstiegs gut korrelieren, was gemäß Abbildung 6.15 der Fall ist.

6.4.2 3d-Validierung des Referenzfalls A0

Eine Bildsequenz des Referenzfalls A0, beginnend bei -50°KW nOT während des ersten Voreinspritzpulses und endend in der Expansionsphase bei 40°KW nOT , ist in den Abbildungen 6.16 und 6.17 dargestellt. In den drei Schnitten sind die lokalen Verteilungen des Mischungsbruchs (links), der Reaktionszeit bzw. der Progressvariablen (Mitte) und der Temperatur (rechts) aufgetragen. Für einen besseren Bezug zur Hubbewegung wurde für diese Auswertung die Reaktionszeit aus der Simulation in $^{\circ}\text{KW}$ umgerechnet.

Bei Eindringen des ersten Voreinspritzpulses (-50°KW nOT) ist in der näheren Strahlumgebung bereits ein schwacher Anstieg der Reaktionszeit erkennbar. Im Strahlkern ist hingegen wegen des Verdampfungsenkenterms in der Transportgleichung praktisch kein Anstieg der Reaktionszeit zu verzeichnen. Während des dritten Voreinspritzpulses (-36°KW nOT) spritzt der Strahl in ein bereits ausgedehntes Gebiet mit Reaktionszeit > 0 ein. Im Strahlkern bis zum Bereich des Strahlrands wird durch die Verdampfung die Reaktionszeit wieder stark herabgesetzt. Die Wirkung des Senkenterms auf die Reaktionszeit kann am besten durch einen direkten lokalen Vergleich mit einer Entwicklung der Reaktionszeit ohne Senkenterm veranschaulicht

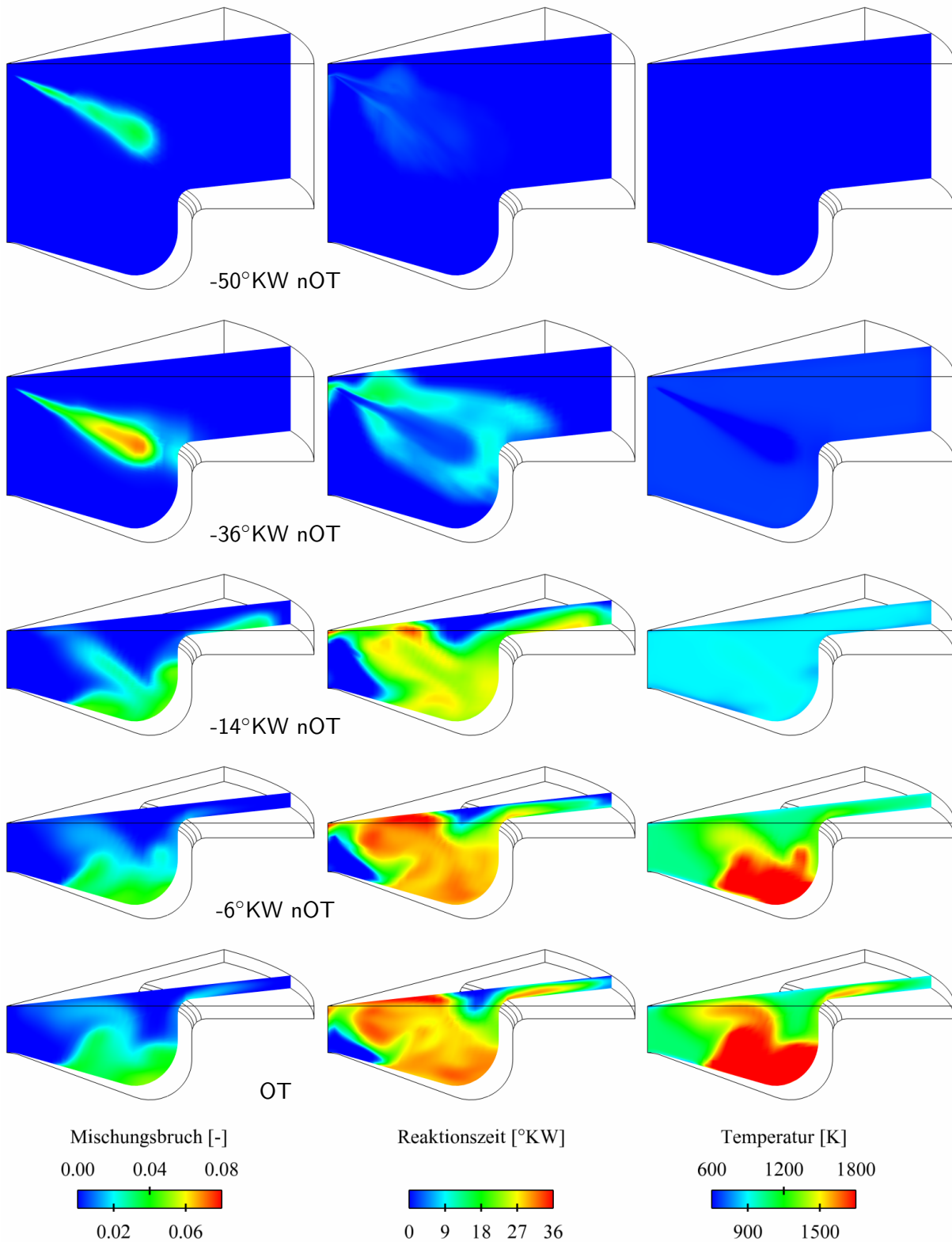


Abbildung 6.16: Validierungsfall A0: Lokale Verteilung des Mischungsbruchs (links), der Reaktionszeit (Progressvariable) (Mitte) und der Temperatur (rechts), (Sequenz -50°KW nOT bis OT).

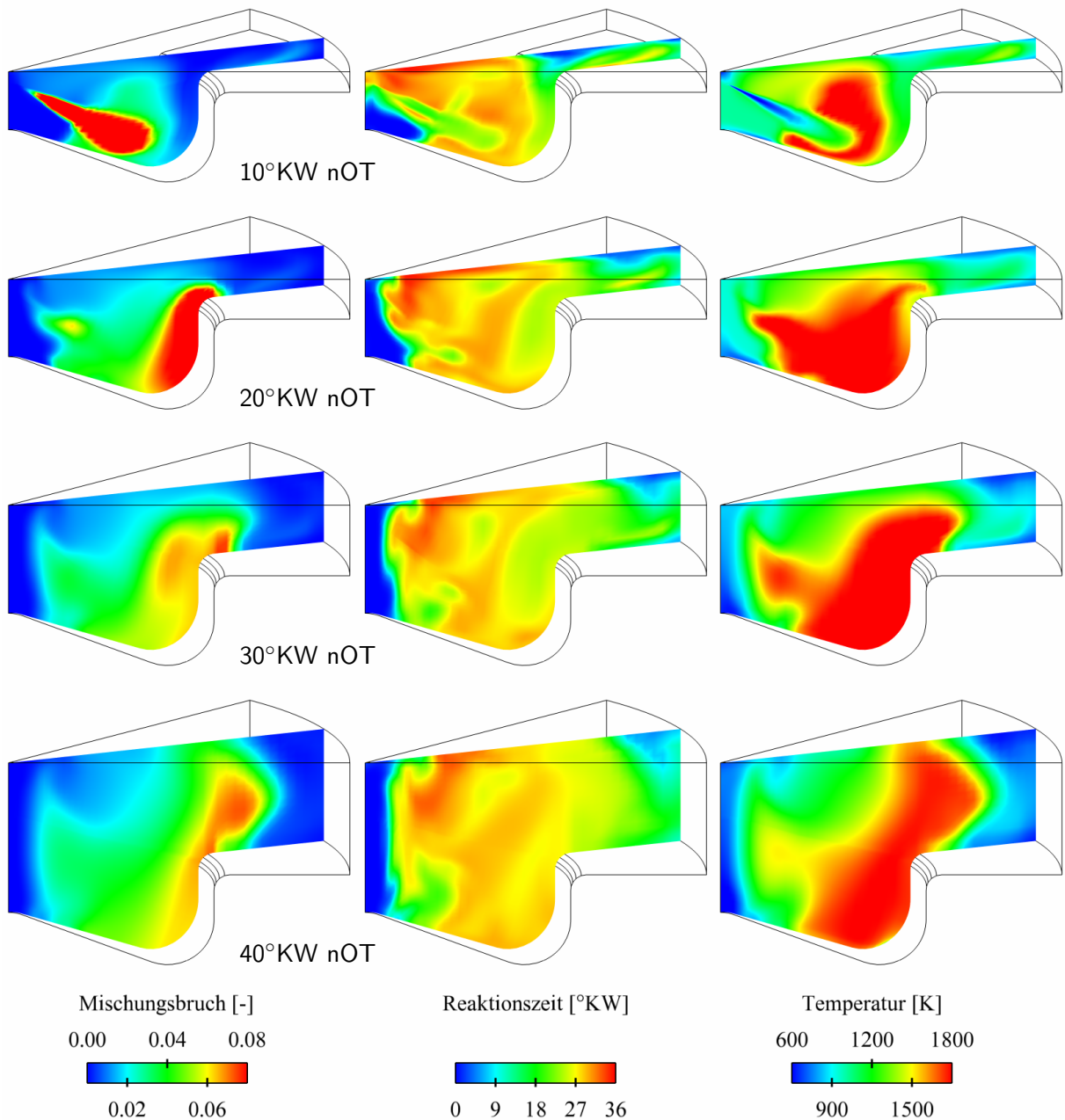


Abbildung 6.17: Validierungsfall A0: Lokale Verteilung des Mischungsbruchs (links), der Reaktionszeit (Progressvariable) (Mitte) und der Temperatur (rechts), (Sequenz 10° KW nOT bis 40° KW nOT).

werden. Einen solchen Vergleich zum Zeitpunkt -36°KW nOT zeigt Abbildung 6.18, wobei bei fehlendem Senkenterm das Gebiet erhöhter Reaktionszeit durch die Verdampfung des eingespritzten Kraftstoffs praktisch unbeeinflusst bleibt. Daraus resultiert zwangsläufig auch das insgesamt höhere Niveau der Reaktionszeit bei fehlendem Senkenterm. Kurz vor Beginn der Hauptzündung (Abbildung 6.16, -14°KW nOT) hat sich das Gebiet mit erhöhter Reaktionszeit bis in den Quetschspalt ausgedehnt. Die am längsten im Brennraum existierenden Randbereiche des Gebiets weisen inzwischen sehr hohe Reaktionszeiten auf. Zu diesem Zeitpunkt ist auch deutlich die Korrelation zwischen der Reaktionszeit und dem Mischungsbruch zu erken-

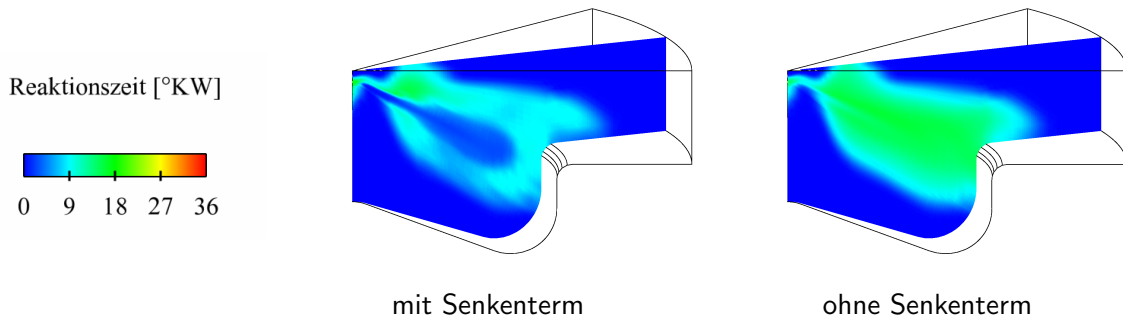


Abbildung 6.18: Lokale Verteilung der Reaktionszeit zum Zeitpunkt -36°KW nOT mit (links) und ohne Verdampfungsenkenterm (rechts)

nen, da die Reaktionszeit nur dort einen Quellterm erhält, wo auch der Mischungsbruch einen Minimalwert überschreitet. Zum Zeitpunkt -6°KW nOT hat bereits die Verbrennung der 3 Voreinspritzungen eingesetzt. Diese hat in OT auch den Quetschspalt erreicht, wie sowohl an der lokal hohen Reaktionszeit als auch am Anstieg der Temperatur erkennbar ist. 10°KW nOT findet die Haupteinspritzung statt, wie deutlich an der Keulenform des Einspritzstrahls zu erkennen ist. Da zu diesem Zeitpunkt bereits in den meisten Zellen das Kriterium für den Übergang von Zünd- auf das PDF-Timescale-Verbrennungsmodell erreicht ist, findet auch kein Anstieg der Reaktionszeit mehr statt. Die Verbrennung wird folglich weitestgehend durch das Verbrennungsmodell bestimmt.

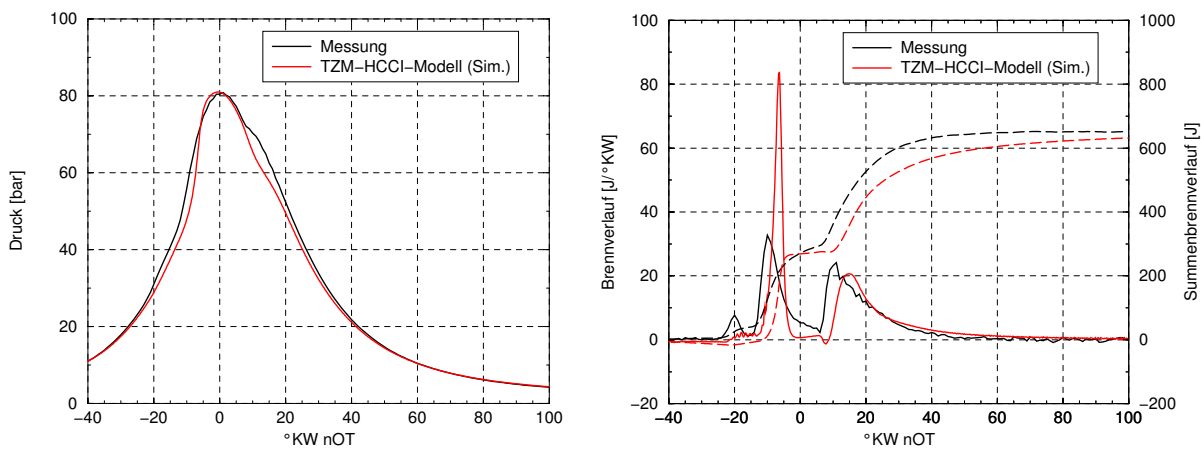


Abbildung 6.19: Validierungsfall A0 (2000 U/min, $p_{me}=4$ bar, teilhomogen): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf

Den integralen Vergleich zwischen Messung und Rechnung zeigt Abbildung 6.19. Die Cool-Flame-Phase wird hinsichtlich der Wärmefreisetzung deutlich unterschätzt. Infolgedessen startet in der Simulation auch der homogene Teil der Verbrennung etwas verzögert, welcher modellbedingt bereits durch das 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodell abgebildet wird (siehe 5.3.2 und 5.4.2). Dennoch wird der Spitzendruck gut getroffen, wenn auch die Wärmefreisetzung in dieser Phase zu schnell erfolgt. Die letzte heterogene und folglich diffusive Phase der Verbrennung nach OT wird, wenn auch leicht verzögert, gut vom 7-

Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodell wiedergegeben. Wie am Summenbrennverlauf zu erkennen ist, unterschätzt die Simulation die Gesamtwärmefreisetzung geringfügig gegenüber der Messung.

6.4.3 Validierung des Kriteriums für die Umschaltung vom Zünd- auf das Verbrennungsmodell

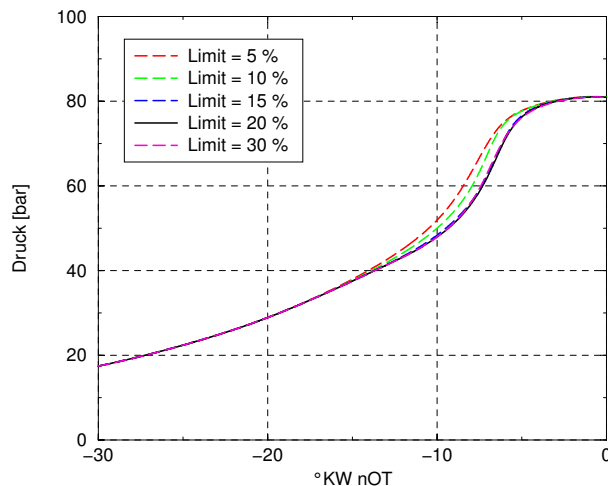


Abbildung 6.20: Validierung des prozentualen Limits der Energiefreisetzung des Progressvariablenmodells bis zur Umschaltung auf das Verbrennungsmodell (dargestellt: Druckverläufe des Referenzfalls A0).

Ziel des Zündmodells ist es, über die Cool-Flame-Verbrennung hinweg die Energiefreisetzung bis zum Einsetzen der Hauptverbrennung zu beschreiben. Erst wenn der Zündverzögerung der Hauptverbrennung (siehe $t_{zv,2}$ in Abbildung 5.14) erreicht ist, erfolgt die Umschaltung auf das Verbrennungsmodell. Wie in Abschnitt 5.4.2 beschrieben, wird als Umschaltkriterium ein fester prozentualer Anteil der maximal möglichen Energiefreisetzung des vorliegenden Gemischs verwendet. Für die Validierung zeigt Abbildung 6.20 eine Variation des %-Limits. Wird dieser Wert zu klein gewählt ($\leq 10\%$) so erfolgt die Umschaltung auf das Verbrennungsmodell noch während der ersten Zündstufe und die Hauptverbrennung setzt mit weiter verkleinertem Limit immer früher ein. Erst bei einem Wert $\geq 15\%$ tritt eine Stabilisierung des Beginns der Hauptverbrennung ein. Dieses Verhalten ist damit erklärbar, dass für diese %-Werte-Bereich die Umschaltung erst erfolgt, wenn im Zündmodell der Beginn der Hauptverbrennungsphase bereits erreicht ist. Als Wert für das Umschaltkriterium wurde deshalb konsistent zu kinetischen Erkenntnissen (siehe Abschnitt 5.4.2) in dieser Arbeit ein Limit von 20% verwendet.

6.4.4 3d-Validierung von B1-B3, C1-C3

Im Folgenden wird der Progressvariablenansatz anhand einer Spritzbeginn-Variation (B1 bis B3) sowie durch eine AGR-Variation (C1 bis C3) validiert. Die Validierung erfolgt integral durch eine Druckverlaufsanalyse mit dem Brenn- und Summenbrennverlauf als Ergebnis.

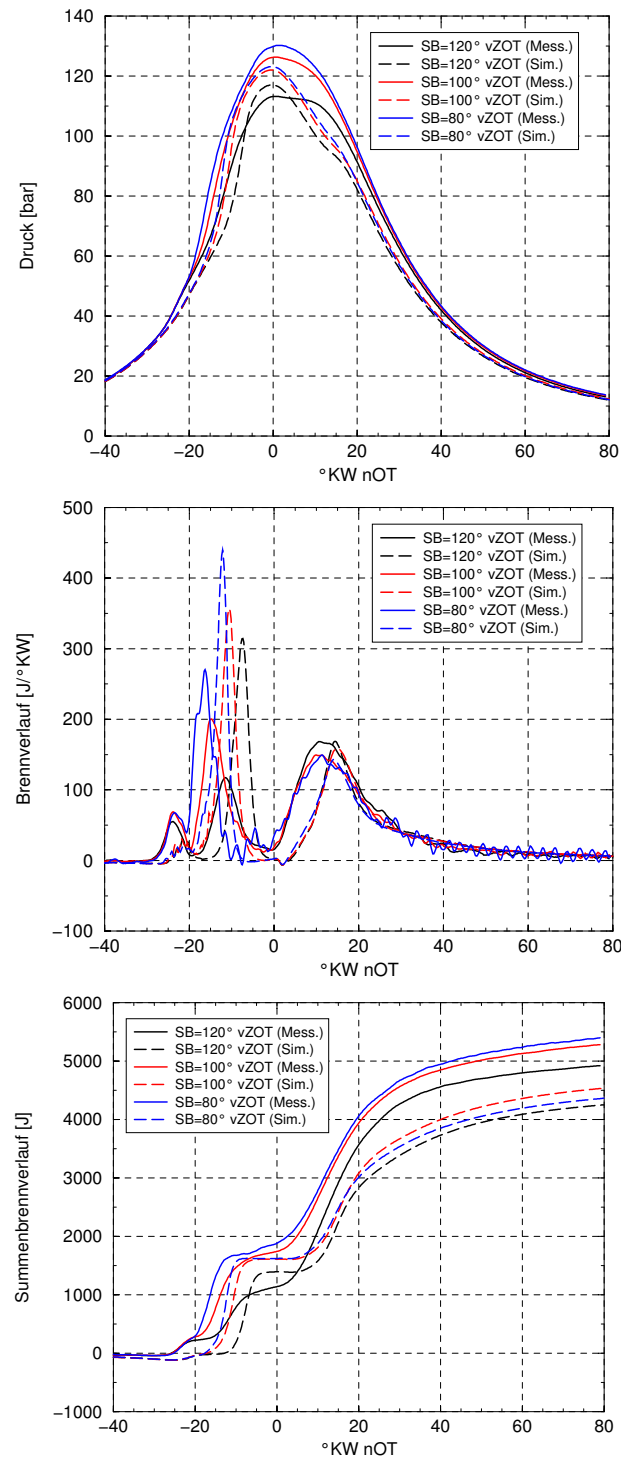


Abbildung 6.21: Validierungsfälle B1, B2 und B3 (1550 U/min, $p_{me}=10$ bar, teilhomogen): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf

Als Bewertungskriterien dienen der Beginn und die Ausprägung der Cool-Flame, Beginn der Hauptverbrennung, Spitzendruck und Ausbrand. Zudem wird eine generelle Trendbewertung der vorliegenden Variation vorgenommen. In den beiden Variationen ist der präexponentielle Vorfaktor der mittleren chemischen Zeitskala des nachgeschalteten 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodells (siehe 5.3.2) jeweils mit dem mittleren Variationspunkt (B2 bzw. C2)

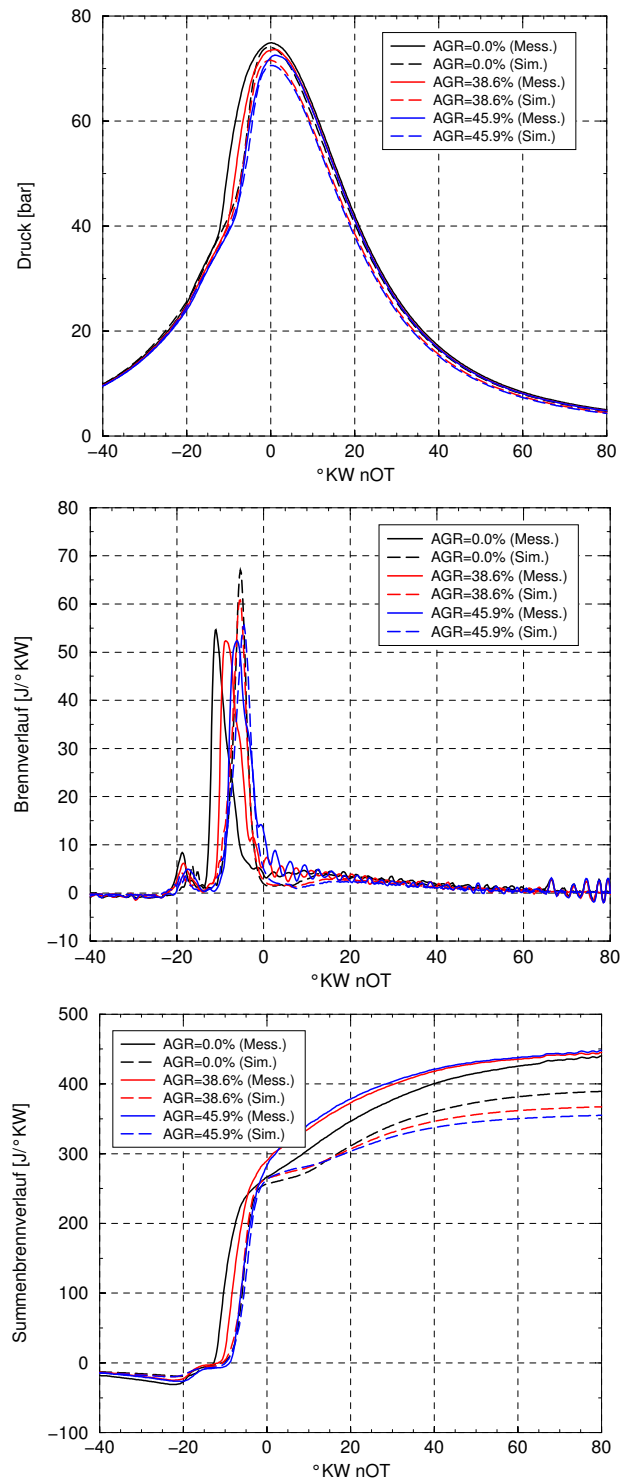


Abbildung 6.22: Validierungsfälle C1, C2 und C3 (1500 U/min, $p_{me}=3.3$ bar, homogen): Gegenüberstellung Messung und Rechnung für Druck-, Brenn- und Summenbrennverlauf

iterativ abgestimmt worden. Die Auswahl des geeignetsten Vorfaktors erfolgte dabei in Hinblick auf eine möglichst gute Übereinstimmung des Beginns der Hauptverbrennung im Vergleich zur Messung bei gleichzeitig möglichst ähnlichem Druckanstieg der Hauptverbrennung. In der Spritzbeginn-Variation (Abbildung 6.21) wird sowohl der Beginn der Cool-Flame als auch der Beginn der homogenen Hauptverbrennung durch den Progressvariablenansatz

etwas verzögert berechnet. Dies führt auch zu Spitzendrücken, die unterhalb denen der entsprechenden Messergebnisse liegen. Die heterogene Hauptverbrennung erfolgt zu spät und wird hinsichtlich der Wärmefreisetzung deutlich unterschätzt. Der Ausbrand, welcher modellbedingt durch das 7-Spezies-PDF-Timescale abgebildet wird, zeigt hingegen eine gute Übereinstimmung mit dem Messergebnis. Die generellen Trends bezüglich der Zündabfolge werden vom Modell korrekt wiedergegeben.

Den Messungs-Rechnungs-Vergleich, basierend auf dem Validierungsfall mit AGR-Variation, zeigt Abbildung 6.22. Beginn und Quantität der Cool-Flame-Verbrennung stimmen gut mit der Messung überein. Jedoch erfolgt der Beginn der Hauptverbrennung im Unterschied zur Messung unabhängig von der AGR-Rate nahezu zum gleichen Zeitpunkt. Dennoch wird das Spitzendruckniveau der korrelierenden Messungen mit ausreichender Genauigkeit erreicht. Kurz nach dem oberen Totpunkt weist der Summenbrennverlauf der Simulationen gegenüber den Messungen einen Einbruch auf, welcher dazu führt, dass die Summenbrennverläufe deutlich unterhalb denen der Messungen liegen. Der AGR-Trend ist insbesondere im Spitzendruckniveau der Simulationsrechnungen gut zu erkennen.

6.4.5 Bewertung des Progressvariablenansatzes bez. der Anwendung auf motorische Brennverfahren

Aus den Validierungsrechnungen B1-B3 und C1-C3 kann als generelles Fazit abgeleitet werden, dass mit dem Progressvariablenansatz die Cool-Flame-Wärmefreisetzung deutlich unterschätzt wird und der Beginn der Hauptverbrennung in praktisch allen Fällen etwas zu spät erfolgt. Auch das Endniveau im Summenbrennverlauf wird durchgehend in der Simulation etwas unterschätzt. Die Sensitivität des Progressvariablenansatzes bei Variation der AGR-Rate ist insbesondere in Bezug auf die Lage des Beginns der homogenen Verbrennung nur sehr gering.

Bedingt durch die Verwendung des 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodells ist eine Abstimmung des Modellparameters zur Steuerung der Vormischverbrennung erforderlich. Durch die Tatsache, dass mit diesem Verbrennungsmodell die Vormisch- und Diffusionsverbrennung abgebildet werden kann, ergibt sich jedoch auch der Vorteil, homogen-heterogene Diesel-Brennverfahren berechnen zu können.

Grundsätzlich kann bei Wahl eines geeigneten Mechanismus mit dem Progressvariablenansatz auch die Zündphase eines Otto-HCCI-Brennverfahrens abgebildet werden. Dies ist im Rahmen dieser Arbeit jedoch nicht untersucht worden.

Kapitel 7

Schlussfolgerung und Ausblick

7.1 Schlussfolgerung

Multi-SR-Ansatz

Ziel des Multi-SR-Ansatzes ist es, den Zünd- und Verbrennungsprozess von homogenen Diesel-Brennverfahren zu beschreiben. Dazu wurde der bereits bekannte Ansatz des stochastischen Reaktors weiterentwickelt. Der Multi-SR-Ansatz zeichnet sich insgesamt dadurch aus, dass neben der Chemie auch alle physikalisch relevanten Prozesse wie Konvektion, Gemischbildung, Wandwärmeübergang, turbulente Mischung und makroskopischer Stoffaustausch berücksichtigt werden.

Zu den drei methodischen Innovationen des Modellierungskonzepts gehören die Auflösung des Brennraums durch ein System von stochastischen Reaktoren, deren direkte Kopplung mit einem 3d-CFD-Code und die turbulente Kraftstoffdampfeinkopplung in die stochastischen Reaktoren.

Durch die Auflösung des Brennraums durch ein System von stochastischen Reaktoren konnte das räumliche Defizit des Modellierungskonzepts eines einzelnen stochastischen Reaktors, welcher als 0-dimensional angesehen werden kann, eliminiert werden. Die direkte Kopplung zwischen den stochastischen Reaktoren (Multi-SR-Code, CHEMKIN [134]) und einem 3d-CFD-Code (KIVA [87]) gewährleistet, dass die stochastischen Reaktoren mit allen für den Zünd- und Verbrennungsprozess relevanten Informationen versorgt werden. Die dritte wesentliche Innovation stellt die turbulente Kraftstoffverdampfung in die stochastischen Reaktoren dar. Erklärtes Ziel ist es dabei, die aus dem 3d-CFD-Code bekannte turbulente Gemischverteilung möglichst adäquat durch das System der stochastischen Reaktoren wiederzugeben. Dies konnte dadurch erreicht werden, indem die bekannte Information der turbulenten Gemischverteilung innerhalb des 3d-CFD-Codes - basierend auf einem β -PDF-Ansatz - auf den Multi-SR-Code übertragen wurde. Durch eine zusätzliche Umverteilung des Gemischs innerhalb der stochastischen Reaktoren während der Kraftstoffdampfeinkopplung konnte die turbulente Luft-Kraftstoff-Verteilung gut an diejenige des 3d-CFD-Codes angenähert werden.

Die Validierung des Modells zeigt im Vergleich zu experimentellen Ergebnissen eine gute Übereinstimmung sowohl im Beginn der Cool-Flame-Verbrennung als auch im Beginn der Hauptverbrennung. Leicht unterschätzt wird die Wärmefreisetzung während der Cool-Flame-Phase. Das Spitzendruckniveau wird gut erreicht. Auch die Trends bez. einer AGR-Variation und eine Spritzbeginnvariation wurden im Wesentlichen gut wiedergegeben.

Das Modell ist somit in der Lage, das Verhalten von homogenen Diesel-Brennverfahren in guter Genauigkeit zu beschreiben. Dies kann als Beleg für die adäquate Modellierung der chemisch-physikalischen Prozesse angesehen werden. Ein weiterer Vorteil des Modellierungskonzepts liegt dabei in der impliziten Beschreibung von Zündung und Verbrennung durch ein einziges Modellierungskonzept. Somit ist eine Umschaltung zwischen mehreren Modellen nicht erforderlich. Weiteres Potential ergibt sich durch die durchgängige Beschreibung der Kinetik, die grundsätzlich auch eine Bewertung des Schadstoffverhaltens möglich macht.

Progressvariablenansatz zur Modellierung des Zündprozesses

Hinter dem Progressvariablenansatz steckt die Idee, ein bereits bestehendes turbulentes Zündmodell [3] für Diesel-Brennverfahren mit kurzen Zündverzugszeiten auch für die Anwendung auf homogene Diesel-Brennverfahren mit entsprechend längeren Zündverzugszeiten weiterzuentwickeln. Die wesentlichen Neuerungen bestehen in der Verwendung der Reaktionszeit als Progressvariable und in der Ermittlung der Energiefreisetzungsraten während der Zündphase auf Basis eines speziellen Library-Konzepts.

Der entscheidende Vorteil der Reaktionszeit als Progressvariable ist in dem Verhalten begründet, auch den Fortschritt von Zündprozessen eindeutig beschreiben zu können, die Phasen sehr schwacher Reaktivität aufweisen. Dieses Phänomen tritt insbesondere während der Zündverzugsphase bei homogenen Diesel-Brennverfahren auf. Dem Einfluss der Verdampfung auf das Zündverhalten wurde durch einen geeigneten Senkenterm in der Transportgleichung der Reaktionszeit Rechnung getragen.

Die kinetische Grundlage für das Modell stellt eine online-generierte Library auf Basis von CHEMKIN [134] dar. Hierzu werden mit Beginn der Einspritzung in zeitlich äquidistanten Abständen Matrizen mit homogenen Reaktoren angelegt. Die 2d-Matrizen haben als Dimension die Temperatur und die Gemischzusammensetzung. Elementarer Bestandteil des Modellierungskonzepts ist eine zunächst inerte Betrachtung des lokalen turbulenten Zustands und dessen Temperaturverteilung. Für die Ermittlung der Temperaturverteilung wird - wie auch schon im Basis-Modell [3] - ein speziell definierter Mischungsbruchraum verwendet. In Verbindung mit einer β -PDF-Verteilung und der in Form einer Library bereitgestellten laminaren Energiefreisetzungsraten wird auf diese Weise ein Quellterm für die turbulente Energiefreisetzung während der Zündphase ermittelt. Die Projektion vom inerten auf den reaktiven Zustand und dessen Energiefreisetzungsraten erfolgt dabei innerhalb der Library. Die freigesetzte Energie wird im verwendeten 3d-CFD-Code KIVA [87] durch eine vereinfachte Speziesumsetzung abgebildet.

Hauptnachteil des Modellierungskonzepts ist die Notwendigkeit der Umschaltung vom Zündmodell auf das zusätzlich verwendete 7-Spezies-PDF-Timescale-Verbrennungsmodell, nachdem ein entsprechendes Umschaltkriterium erreicht ist.

Wie sich bei der Validierung des Modells gezeigt hat, weist die generelle Abbildung von homogenen und homogen-heterogenen Verbrennungsvorgängen mit dem Progressvariablenansatz Defizite bezüglich der Genauigkeit auf. Der Beginn der Cool-Flame-Phase stimmt zwar gut mit den Messungen überein, jedoch wird die Cool-Flame-Wärmefreisetzung stark unterschätzt. Bei Betriebspunkten sowohl mit homogener als auch mit heterogener Verbrennungsphase setzt insbesondere der Beginn der heterogenen Verbrennung verzögert ein. Als Ursache hierfür kann der präexponentielle Vorfaktor des Verbrennungsmodells angesehen werden, der im Rahmen dieser Arbeit auf die homogene Verbrennung abgestimmt worden ist und folglich nicht gleichzeitig

auch ein Optimum für die heterogene Verbrennung sein kann.

Auch wenn grundsätzlich das Funktionieren der Reaktionszeit als Progressvariable dargestellt werden konnte, so sprechen doch die oben angeführten Gründe gegen einen operativen Einsatz des Modells zur Simulation von homogenen und homogen-heterogenen Diesel-Brennverfahren.

Vergleich der beiden Ansätze

Ein Vergleich der beiden Ansätze soll anhand von vier Kriterien durchgeführt werden: generelle Beschreibung des Reaktionsfortschritts, Modellierung des chemischen Quellterms, Durchgängigkeit der Beschreibung von Zündung und Verbrennung, Rechenaufwand.

Beim Multi-SR-Ansatz erfolgt die Beschreibung des Reaktionsfortschritts direkt über die chemische Umsetzung aller Spezies. Dagegen wird dieser beim Progressvariablenansatz indirekt über die Reaktionszeit als Progressvariable ermittelt. Die chemische Umsetzung beruht dann auf einer stark vereinfachten Reaktionsgleichung. In Bezug auf die Berechnung des chemischen Quellterms liegt der Vorteil eindeutig beim Multi-SR-Ansatz, da hier der Quellterm in geschlossener Form vorliegt und folglich nicht modelliert werden muss. Beim Progressvariablenansatz muss der turbulente Quellterm durch eine mit der turbulenten Verteilung gewichteten Integration der laminaren Reaktionsraten bestimmt werden. Auch in Bezug auf die Durchgängigkeit der Beschreibung von Zündung und Verbrennung liegt der Vorteil beim Multi-SR-Ansatz, da hier Zündung und Verbrennung durch ein und denselben Ansatz beschrieben werden. Eine Umschaltung vom Zünd- auf ein Verbrennungsmodell mit entsprechendem Umschaltkriterium ist hingegen beim Progressvariablenansatz notwendig. Der Rechenaufwand ist bei beiden Ansätzen vergleichbar. Bei sehr frühen Einspritzzeitpunkten mit entsprechend langen Zündverzugszeiten steigt die Rechenzeit beim Progressvariablenansatz wegen der sukzessive zunehmenden Zahl an Reaktoren zur Generierung der Library allerdings drastisch an. Beim Multi-SR-Ansatz ist die Zahl der Reaktoren dagegen fest vorgegeben. Hier erhöhen sich die Rechenzeiten primär während der kleinen Zeitschritte in der Verbrennungsphase, da für jeden Zeitschritt das gesamte System von Reaktoren berechnet wird.

Insgesamt liegen die Vorteile beim Multi-SR-Ansatz. Dafür spricht nicht zuletzt auch die insgesamt bessere Ergebnisqualität.

7.2 Ausblick

Bei der zukünftigen Entwicklung von motorischen Brennverfahren wird es zweifellos zwei Entwicklungsschwerpunkte geben: zum einen die Verbrauchsreduzierung, zum anderen die innermotorische Schadstoffminimierung. Beide Entwicklungsziele werden schon heute intensiv durch die Simulation unterstützt. Die 1d-Simulation liefert dabei einen großen Beitrag zur thermodynamischen Bewertung und Optimierung des gesamtheitlich betrachteten Verbrennungsmotors inklusive aller peripheren Systeme. Auf diese Weise lassen sich insbesondere Verbrauchsvorteile ermitteln. Für die detaillierte Bewertung von lokalen Effekten im Brennraum, die sich durch die Brennraumform oder durch die vielfältigen Einspritzstrategien ergeben, kommt die 3d-CFD-Simulation zum Einsatz. Mit geeigneten Spray-, Zünd- und Verbrennungsmodellen werden alle physikalisch und chemisch relevanten Vorgänge kombiniert mit der Strömungsrechnung erfasst. Eine große Rolle spielt in diesem Zusammenhang die Berücksichtigung der Chemie-Turbulenz-Interaktion.

Im Falle homogener Diesel-Brennverfahren sind in den vergangenen Jahren bereits bekannte Zünd- und Verbrennungsmodelle modifiziert bzw. komplett neue Zünd- und Verbrennungsmodelle entwickelt worden, die sowohl den kinetisch dominierten Zündprozess als auch die homogene Verbrennung abbilden können. Einen Beitrag dazu leistet diese Arbeit insbesondere mit der Weiterentwicklung des stochastischen Reaktor Modells zum Multi-SR-Modell.

Schwierigkeiten bei der Simulation homogener Diesel-Brennverfahren bereitet jedoch nach wie vor die Vorhersage der Emissionen der Schadstoffe Ruß, NO_x , CO und unverbrannter Kohlenwasserstoffe (HC). Da Ruß und NO_x verfahrensbedingt bei Diesel-Brennverfahren dieser Art eine untergeordnete Rolle spielen, müssen sich zukünftig die Bemühungen auf die Modellierung von CO und HC konzentrieren. Bei der getrennten Modellierung von Zündung und Verbrennung sind dabei üblicherweise weitere in der Regel passive Submodelle für die Schadstoffmodellierung notwendig. Von Vorteil sind hier implizite Zünd- und Verbrennungsmodelle auf Basis detaillierter Kinetik, zu denen auch der Multi-SR-Ansatz zählt. Bei Modellen dieser Art, zu denen sämtliche reaktorbasierte Modelle gehören, ist implizit in der Lösung auch die Konzentration der einzelnen Spezies des verwendeten Mechanismus enthalten. Die weitere Validierung des Multi-SR-Modells sollte sich folglich auf die Analyse des Speziesverhaltens von CO und HC im Vergleich zur Messung konzentrieren.

Die zukünftigen Herausforderungen der motorischen Verbrennungssimulation ergeben sich aus dem aktuellen Trend in der Brennverfahrensentwicklung, die Vorteile verschiedener Brennverfahren zu kombinieren. Folglich sind Modellierungsansätze erforderlich, die sowohl die Vormischverbrennung als auch die Diffusionsverbrennung in all ihren Facetten in sich vereinen. Erste Entwicklungen solcher Modellpakete zielen auf eine geeignete Kombination von bereits etablierten Vormisch- und Diffusionsverbrennungsmodellen ab. Als eigenständiges Modellierungskonzept zur Abbildung aller Verbrennungsregimes werden dem Transported-PDF-Ansatz größere Chancen eingeräumt. Allerdings zeigt dieser Ansatz noch Defizite bei der Abbildung von mehrphasigen diffusionsdominierten Verbrennungsvorgängen, weshalb auch hier weiterer Forschungs- und Entwicklungsbedarf besteht.

Anhang A

Mischungsbruch-Konzept und “Presumed PDF“-Ansatz

Weit verbreitet zur Berücksichtigung der Chemie-Turbulenz-Interaktion ist das sogenannte Mischungsbruch-Konzept [64] kombiniert mit dem “Presumed PDF“-Ansatz. Eine Einführung soll im Folgenden gegeben werden (angelehnt an [72]).

Hintergrund des Mischungsbruch-Konzepts ist der Wunsch, die Gemischverteilung in einer nicht-vorgemischten Flamme beschreiben zu können. Dazu wird zunächst als neue Bezugsgröße der sogenannte Elementmassenbruch Z_j eingeführt, welcher - analog zum Massenbruch einer Spezies - den Massenanteil eines Elements an der Gesamtmasse beschreibt:

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

N_s steht für die Anzahl der Stoffe und N_{el} für die Anzahl der Elemente. Die Koeffizienten a_{ij} geben die Zahl der Atome des Elements j in einem Mol der Spezies i an. Die jeweiligen Molekulargewichte sind mit M bezeichnet.

Angelehnt an das Zweistrom-Problem einer Gegenstrom-Diffusionsflamme mit einem Kraftstoffstrom (Index 1) und einem Oxidatorstrom (Index 2) kann durch Verhältnissbildung der Elementmassenbrüche Z_j , $Z_{j,1}$ und $Z_{j,2}$ der Mischungsbruch Z in folgender Weise definiert werden:

$$Z = \frac{Z_j - Z_{j,2}}{Z_{j,1} - Z_{j,2}} \quad , \quad Z \in [0, 1] \quad (\text{A.2})$$

Er beschreibt somit auf Basis der Elementmassenbrüche Z_j den Mischungszustand zwischen einem Kraftstoffstrom (Index 1) und einem Oxidatorstrom (Index 2). Da die Elementmassenbrüche im Unterschied zu Speziesmassenbrüchen chemieinvariant sind, bleibt der Mischungsbruch Z und somit auch die Beschreibung des Mischungs Zustands von der Verbrennung unbeeinflusst, was den entscheidenden Vorteil der Definition A.2 darstellt. Definitionsgemäß liegen die Mischungsbrüche in einem Intervall zwischen 0 und 1. Der so aufgespannte Raum wird auch als Mischungsbruch-Raum bzw. Z -Raum bezeichnet.

Erklärtes Ziel ist es jedoch, auf Basis des Mischungsbruch-Konzepts turbulent gemittelte Größen unter Berücksichtigung der Chemie-Turbulenz-Interaktion abzuleiten. Dazu wird das

Prinzip der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P(Z)$ eingeführt. So wird jedem Gemischzustand im Z -Raum eine Wahrscheinlichkeit seines Auftretens zugeordnet. $P(Z)$ beschreibt folglich die Verteilung des Gemischs im Z -Raum.

Die Form der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P(Z)$ wird durch eine geeignete mathematische Funktion abgebildet. Man spricht in diesem Zusammenhang von einem "Presumed PDF"-Ansatz. Fest etabliert hat sich die β -Funktion, die mit nur zwei Parametern bzw. Momenten die auftretenden Formen der Wahrscheinlichkeitsdichte einer nicht-vorgemischten Flamme im Z -Raum ausreichend genau abbilden kann. Als Parameter werden der Favre-gemittelte Mischungsbruch \tilde{Z} und dessen Varianz $\widetilde{Z''^2}$ verwendet. Dazu werden 2 entsprechende Favre-gemittelte Erhaltungsgleichungen eingeführt:

Mischungsbruch \tilde{Z} :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{Z}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \tilde{Z} \right] + \tilde{\rho}_i^s \quad (\text{A.3})$$

Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{Z''^2}$:

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{\rho} \widetilde{Z''^2}}{\partial t}}_{\text{zeitl. \u00c4nd.}} + \underbrace{\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \widetilde{Z''^2})}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot \left[\frac{\mu}{Sc_t} \nabla \widetilde{Z''^2} \right]}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{2 \frac{\mu}{Sc_t} (\nabla \tilde{Z})^2}_{\text{Produktion}} - \underbrace{\bar{\rho} \tilde{\chi}}_{\text{Dissipation}} \quad (\text{A.4})$$

Darin sind μ die dynamische Viskosit\u00e4t, Sc_t die turbulente Schmidt-Zahl und $\tilde{\chi}$ die mittlere skalare Dissipationsrate. Letztere repr\u00e4sentiert die turbulenten Streckungseffekte in der Diffusionsflamme. Die Definition f\u00fcr $\tilde{\chi}$ erfolgt nach einem Ansatz von Jones [132]:

$$\tilde{\chi} = c_\chi \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} \widetilde{Z''^2} \quad (\text{A.5})$$

Die Konstante c_χ wird \u00fcblicherweise mit 2 angenommen, w\u00e4hrend die turbulente Dissipationsrate ϵ und die turbulente kinetische Energie k direkt der k - ϵ -Turbulenzmodellierung entnommen werden.

Die normierte, Favre-gemittelte β -Funktion ist definiert als [72]:

$$\tilde{P}_Z(Z; \vec{x}, t) = \frac{Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1}}{\int_{Z=0}^{Z=1} Z^{\alpha-1} \cdot (1-Z)^{\beta-1} dZ}, \quad P_Z \in [0, 1] \quad (\text{A.6})$$

Die Exponenten α und β ergeben sich aus \tilde{Z} und $\widetilde{Z''^2}$:

$$\alpha = \tilde{Z} \cdot \gamma, \quad \beta = (1 - \tilde{Z}) \cdot \gamma, \quad (\text{A.7})$$

$$\text{mit} \quad \gamma = \alpha + \beta = \frac{\tilde{Z} \cdot (1 - \tilde{Z})}{\widetilde{Z''^2}} - 1 \geq 0. \quad (\text{A.8})$$

Das Formenspektrum der β -Funktion ist in Abbildung A.1 erkennbar. Sehr gro\u00dfe Varianzen f\u00fchren zu einem ungemischten Zustand. Werden die Varianzen kleiner, so findet eine allm\u00e4hliche Vermischung statt, welche im Extremfall zu einer vollst\u00e4ndigen Mischung (Delta-Funktion) f\u00fchrt.

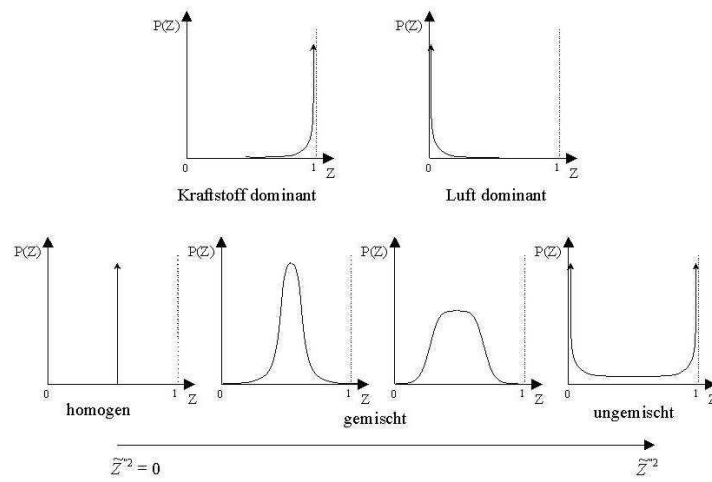


Abbildung A.1: Beispiele möglicher β -PDF Formen [72].

Durch die Gewichtung einer im gesamten Z -Raum bekannten Verteilung eines beliebigen Skalars $\psi(Z)$ mit der β -PDF kann der turbulente Mittelwert $\tilde{\psi}(\vec{x}, t)$ (gleichbedeutend mit dem 1. Moment) dieses Skalars bestimmt werden.

$$\tilde{\psi}(\vec{x}, t) = \int_{Z=0}^{Z=1} \psi(Z) \tilde{P}_Z(Z; \tilde{Z}(\vec{x}, t), \tilde{Z}''^2(\vec{x}, t)) dZ \quad (\text{A.9})$$

Anhang B

Qualitative Fehlerabschätzung für die turbulente Einkopplung des Kraftstoffdampfs im Multi-SR-Modell

Zur Verdeutlichung des Vorgehens ist beispielhaft in Abbildung B.1 die β -PDF-basierte Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zweier Mischungsbrüche $\tilde{Z}^n = 0.2$ und $\tilde{Z}^{n+1} = 0.21$ bei gleichbleibender Varianz $\tilde{Z}''^2 = 0.01$ dargestellt.

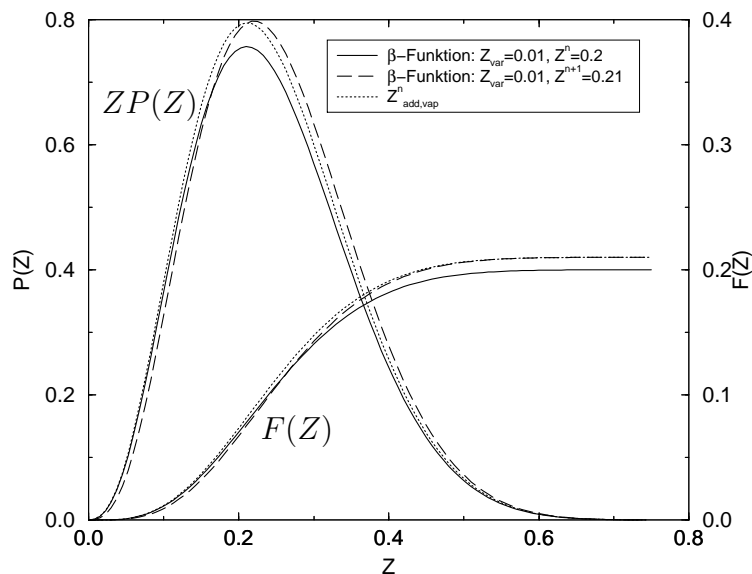


Abbildung B.1: *Multi-SR-Verdampfung*

Die Differenz der beiden Mischungsbrüche soll einen stark überzeichneten Verdampfungsprozess innerhalb eines Zeitschritts repräsentieren. Deutlich ist nach dem Verdampfungsprozess durch die Erhöhung des Mischungsbruchs von \tilde{Z}^n auf \tilde{Z}^{n+1} auch eine entsprechende Verschiebung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion nach rechts zu erkennen. Werden beide Funktionen gemäß Gleichung 4.30 integriert, so erhält man die korrelierenden Verteilungsfunktionen $F(Z)$ (siehe Abbildung B.1). Vergleicht man die Verläufe der beiden Verteilungsfunktionen

miteinander, so ergibt sich ein Schnittpunkt. Daraus kann gefolgert werden, dass eine durch einen Verdampfungsprozess veränderte Verteilung im Mischungsbruchraum nicht durch intervallweise Aufaddierung von Teilmengen der verdampften Kraftstoffmenge generiert werden kann. Dies würde nur für den Bereich nach dem Schnittpunkt gelten. Vor dem Schnittpunkt müsste jedoch eine Umverteilung der schon vorhandenen Massenanteile im Z -Raum hin zu höheren Z -Werten erfolgen. Um diesen komplexen Umverteilungsprozess zu vermeiden, wird im Rahmen dieser Arbeit stattdessen folgende Strategie gewählt: Der innerhalb eines Zeitschritts verdampfte Kraftstoff wird gemäß der auf 1 normierten Verteilungsfunktion von \tilde{Z}^{n+1} im Mischungsbruchraum verteilt und anschließend auf die Verteilungsfunktion von \tilde{Z}^n aufgeschlagen. Dies führt zu den ebenfalls in Abbildung B.1 eingetragenen Funktionen der Wahrscheinlichkeitsdichte bzw. der Verteilung von $\tilde{Z}_{add,vap}^n = \tilde{Z}^n + \Delta m_{vap}$. Im Vergleich mit den Funktionen, basierend auf \tilde{Z}^{n+1} , weisen die entsprechenden Verläufe eine ausreichende qualitative Ähnlichkeit auf. Daraus wird die Annahme abgeleitet, dass die Verteilung des in einer CFD-Zelle verdampften Kraftstoffs gemäß der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (bzw. Verteilungsfunktion) erfolgen kann. Der so entstehende Fehler wird wegen der Ähnlichkeit der Verläufe als gering eingestuft.

Anhang C

Herleitung der Transportgleichung der Reaktionszeit t_{reac}

Konform zu anderen Transportgrößen soll die Reaktionszeit t_{reac} gekoppelt mit der Dichte ρ transportiert werden. Im Folgenden soll der Schwerpunkt auf der Herleitung der Quell- bzw. Senkenterme liegen. Es wird davon ausgegangen, dass die konvektiven und diffusiven Teile der Transportgleichung sich analog zu denen der anderen Transportgrößen verhalten. Zunächst soll die mathematische Form der Quellterme geklärt werden. Ausgangsbasis dafür ist die zeitliche Ableitung der Transportgröße ρt_{reac} und deren Zerlegung auf Basis der Produktregel:

$$\frac{\partial \rho t_{reac}}{\partial t} = \underbrace{\rho \frac{\partial t_{reac}}{\partial t}}_I + \underbrace{t_{reac} \frac{\partial \rho}{\partial t}}_{II} \quad (C.1)$$

Die Wirkungsweise der beiden rechten Terme I und II soll nun untersucht werden. Die Dichteänderung $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ von Term II kann in einem abgeschlossenen System und folglich ohne Flüsse über die Systemgrenzen hinweg nur auf Verdampfung zurückzuführen sein

$$\dot{\rho}_s = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (C.2)$$

mit der Verdampfungsrate $\dot{\rho}_s$. Zunächst soll angenommen werden, dass die Reaktionszeit t_{reac} sich konstant verhalte und deshalb

$$\frac{\partial t_{reac}}{\partial t} = 0 \quad (C.3)$$

gelte. Somit wird Term I zu Null. Ersetzt man die auf den Term II reduzierte Differentialgleichung

$$\frac{\partial \rho t_{reac}}{\partial t} = t_{reac} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (C.4)$$

durch entsprechende Differenzenquotienten, so ergibt sich mir der angenommenen Dichteänderung $\Delta \rho = \rho^{n+1} - \rho^n$ innerhalb des Zeitintervalls $\Delta t = t^{n+1} - t^n$ folgende Differenzendarstellung:

$$\frac{\rho^{n+1}t_{reac}^{n+1} - \rho^n t_{reac}^n}{\Delta t} = t_{reac}^n \frac{\Delta \rho}{\Delta t} \quad (C.5)$$

Ausmultiplikation führt über

$$\rho^{n+1}t_{reac}^{n+1} - \rho^n t_{reac}^n = t_{reac}^n (\rho^{n+1} - \rho^n) \quad (C.6)$$

zum finalen Ergebnis

$$t_{reac}^{n+1} = t_{reac}^n = const. \quad (C.7)$$

Folglich hat der Term *II* die Funktion, die Reaktionszeit t_{reac} invariant gegenüber Dichteänderungen durch Verdampfung zu machen.

Zur Klärung des Effekts von Term *I* wird angenommen, dass sich die Reaktionszeit gemäß der physikalischen Zeit entwickelt und folglich die Rate

$$\frac{\partial t_{reac}}{\partial t} = 1 \quad (C.8)$$

gilt. Diese Annahme wiederum in die Ausgangsgleichung C.1 eingesetzt ergibt:

$$\frac{\partial \rho t_{reac}}{\partial t} = \rho + t_{reac} \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (C.9)$$

In Differenzenform mit bekannter Dichte ρ^{n+1} zum Zeitpunkt $n + 1$ erhält man folgende Gleichung:

$$\frac{\rho^{n+1}t_{reac}^{n+1} - \rho^n t_{reac}^n}{\Delta t} = \rho^{n+1} + t_{reac}^n \frac{\Delta \rho}{\Delta t} \quad (C.10)$$

Nach diversen Umformungen

$$\begin{aligned} \rho^{n+1}t_{reac}^{n+1} - \rho^n t_{reac}^n &= \rho^{n+1}\Delta t + t_{reac}^n \Delta \rho \\ \rho^{n+1}t_{reac}^{n+1} - \rho^n t_{reac}^n &= \rho^{n+1}\Delta t + t_{reac}^n (\rho^{n+1} - \rho^n) \\ \rho^{n+1}t_{reac}^{n+1} - \rho^n t_{reac}^n &= \rho^{n+1}\Delta t + t_{reac}^n \rho^{n+1} - t_{reac}^n \rho^n \\ \rho^{n+1}t_{reac}^{n+1} &= \rho^{n+1}\Delta t + t_{reac}^n \rho^{n+1} \end{aligned} \quad (C.11)$$

ergibt sich als Endergebnis:

$$t_{reac}^{n+1} = \Delta t + t_{reac}^n \quad (C.12)$$

Daraus kann abgeleitet werden, dass Term *I* für die Entwicklung der Reaktionszeit verantwortlich ist. Soll die Entwicklung der Reaktionszeit t_{reac} von der Verdampfung abhängig gemacht werden, so muss das Differential $\frac{\partial t_{reac}}{\partial t}$ von Term *I* entsprechend modelliert werden.

Anhang D

Passive Berechnung der lokalen inerten Temperatur T_{inert} und des lokalen inerten Druckes p_{inert} bei einer CFD-Rechnung mit Verbrennung

Ziel ist es, zeitgleich zu einer CFD-Rechnung mit Verbrennung und damit verbundenem Druck- und Temperaturanstieg, die Entwicklung der lokalen inerten Temperaturen T_{inert} und des lokalen inerten Druckes p_{inert} zu bestimmen. Deren Berechnung erfolgt passiv und hat damit keinerlei Einfluss auf die Verbrennungsrechnung. Basis für diese inerte Berechnung ist die Transportgleichung Gl. D.1 für die inerte Enthalpie \tilde{h}_{inert} . Im Unterschied zu dieser Gleichung wird in KIVA [87] die thermische innere Energie \tilde{i}_{th} (Gl. 5.11) transportiert. Damit ergibt sich dennoch eine zu Gl. 5.11 sehr ähnliche Transportgleichung,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_{inert}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{u} \tilde{h}_{inert}) = \bar{\rho} \tilde{\epsilon} + \tilde{Q}^s + \tilde{Q}^w + \tilde{S}^{comp} \quad (D.1)$$

die sich im Wesentlichen durch die vernachlässigten Terme für Wärmeleitung und Enthalpiediffusion (Gl. 5.12) und den nicht benötigten Verbrennungsquellterm unterscheidet. Stattdessen ist der Kompressionsquellterm \tilde{S}^{comp} hinzugekommen. Die einzelnen Terme der Transportgleichung besitzen die Einheit $[J/(cm^3s)]$. Es wird nun die Modellierung der einzelnen Quellterme beschrieben.

Der erste Quellterm der rechten Seite ist der Dissipationsquellterm $\bar{\rho} \tilde{\epsilon}$, welcher den Energieeintrag durch dissipierende Turbulenzwirbel beschreibt. Im Rahmen dieser Arbeit wird auf eine inerte Berechnung der turbulenten Dissipationsrate verzichtet und stattdessen auf die Dissipationsrate des k - ϵ -Modells zurückgegriffen, welche von der Verbrennung beeinflusst wird.

Gleiches gilt für den Verdampfungsquellterm \tilde{Q}^s . Auch hier wird zur Vereinfachung auf Größen zurückgegriffen, die von der Verbrennung beeinflusst werden. Damit hat der Quellterm die Form

$$\tilde{Q}^s = \frac{\Delta h_{evap}}{\bar{\rho} dt} \quad (D.2)$$

mit der spezifischen Verdampfungsenthalpie Δh_{evap} und der Verbrennungsdichte $\bar{\rho}$. Die Berechnung von \tilde{Q}^s ist damit direkt an den in KIVA [87] verwendeten Verdampfungsquellterm

angelehnt. Der hierbei entstehende Fehler durch die von der Verbrennung beschleunigte Verdampfung wird ebenfalls in Kauf genommen, um den numerischen Aufwand, der bei einer inerten Berechnung der Verdampfung entstehen würde, zu umgehen.

Der erste Quellterm, der rein inerte Größen beinhaltet, ist der Quellterm \tilde{Q}^{wall} für den Wandwärmeübergang.

$$\tilde{Q}^{wall} = \alpha(T_{inert} - T_{wall})A_{cell} \frac{1}{V_{cell}} \quad (D.3)$$

Der Wärmeübergangskoeffizient α wird mit dem Woschni-Modell, wie von Heywood [39] beschrieben, berechnet. Als weitere Größen werden zur Berechnung die lokale Wandtemperatur T_{wall} , die an der Wand angrenzende Zellfläche A_{cell} und deren Volumen V_{cell} benötigt.

Im Vergleich zu den drei bisher beschriebenen Quelltermen leistet der Kompressionsquellterm \tilde{S}^{comp} während der Kompressionsphase (Expansionsphase) den beitragsmäßig höchsten Anteil in Bezug auf die zeitliche Änderung der inerten Enthalpie h_{inert} . Durch die Verwendung der Enthalpie als Prozessgröße nimmt der Quellterm dabei eine sehr einfache Form an. Denn nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik gilt für differentielle Änderungen der Enthalpie H die Beziehung

$$dH = dQ + V dp \quad (D.4)$$

bzw. in spezifischer Form

$$dh = dq + \frac{V}{m} dp = dq + \frac{dp}{\rho} \quad (D.5)$$

mit dQ bzw. dq als Wärmeeintrag, dem Volumen V und der Druckänderung dp . Folglich hat der Kompressionsquellterm \tilde{S}^{comp} die Gestalt

$$\tilde{S}^{comp} = \frac{dp_{inert}}{dt} \quad (D.6)$$

mit dp_{inert} als Änderung des inerten Druckes.

Im finalen Schritt muss der inerte Druck p_{inert} selbst bestimmt werden. Dazu wird zunächst mit der kalorischen Zustandsgleichung Gl. D.7 und der inerten Gemischzusammensetzung die inerte Temperatur T_{inert} iteriert (analog zur Berechnung der Temperatur aus der thermischen inneren Energie i_{th} in KIVA [87])

$$H(T_{inert}) = \sum_i y_i H_i(T_{inert}) \quad (D.7)$$

mit den inerten Massenbrüchen y_i der Spezies i des Systems. Die inerte Gemischzusammensetzung kann dabei aus dem lokalen Mischungsbruch und der globalen Restgaszusammensetzung des Brennraums nach dem Schließen der Einlass-Ventile leicht rückgerechnet werden. Über die ideale Gasgleichung mit der idealen Gaskonstanten \Re und den Partialdichten ρ_i wie auch der molaren Massen M_i der Spezies i

$$p_{inert} = \Re T_{inert} \sum_i \left(\frac{\rho_i}{M_i} \right) \quad (D.8)$$

läßt sich schließlich der inerte Druck p_{inert} und damit auch dp_{inert} leicht ermitteln.

Literaturverzeichnis

- [1] http://de.wikipedia.org/wiki/Erd%C3%B6l#Weltreserven_und_Bevorratung
- [2] Warnatz, J.; Maas, U.; Dibble, R. W.: Verbrennung, Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung. Springer-Verlag. Berlin Heidelberg, 1997.
- [3] Streule, T.: Dreidimensionale Simulation von Selbstzündung, Verbrennung und Schadstoffbildung in DE-Dieselmotoren. Universität Karlsruhe. Dissertation, 2000.
- [4] Zhao, F.; Asmus, T.; Assanis, D.; Dec, J.; Eng, J.; Najt, P.: Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Engines: Key Research and Development Issues. Society of Automotive Engineers. 2003.
- [5] Westbrook, C.: Chemical Kinetics of Hydrocarbon Ignition in Practical Combustion Systems. Proceedings of the Combustion Institute. 2000, Vol 28, S. 1563-1577.
- [6] Curran, H.J.; Gaffuri, P.; Pitz, W.J.; Westbrook, C.K.: A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation. Combustion and Flame, 114:149-177, 1998.
- [7] Curran, H.J.; Gaffuri, P.; Pitz, W.J.; Westbrook, C.K.: A Comprehensive Modeling Study of iso-Octane Oxidation. Combustion and Flame, 129:253-280, 2002.
- [8] Griffiths, J.F.; Barnard, J.A.: Flame and Combustion. Blackie Academic & Professional. London, 1995.
- [9] Pfau, M.: Untersuchung und Bewertung der Raumzündverbrennung an einem Motor mit mechanischer Ventilsteuerung. Westsächsische Hochschule Zwickau. Diplomarbeit, 2002.
- [10] Schäflein, J.: Beitrag zur Steuerung der Kompressionszündung in Ottomotoren. Universität Rostock. Dissertation, 2004.
- [11] Thring, R.H.: Homogeneous-Charge Compression-Ignition (HCCI) Engines. SAE 892068, 1989.
- [12] Najt, P.M.; Foster, D.E.: Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion. SAE 830264, 1983.
- [13] Onishi, S.; Hong Jo, S.; Shoda, K.; Do Jo, P.; Kato, S.: Active Thermo-Atmosphere Combustion (ATAC) - A New Combustion Process for Internal Combustion Engines. SAE 790501, 1979.

- [14] Ishibashi, Y.; Masahiko, A.: Improving the Exhaust Emissions of Two-Stroke Engines by Applying the Activated Radical Combustion. SAE 960742, 1996.
- [15] Yamaguchi, J.: Hondas readies Activated Radical Combustion two-stroke engine for production motorcycle. *Automotive Engineering*, Jan. 1997.
- [16] Gentili, R.; Tognotti, L.; Habert, P.; Lavy, J.: Experimental Study on ATAC (Active Thermo-Atmosphere Combustion) in a Two-Stroke Gasoline Engine. SAE 970363, 1997.
- [17] Lavy, J.; Dabadie, J.-C.; Angelberger, C.; Duret, P.; Willand, J.; Juretzka, A.; Schäflein, J.; Ma, T.; Lendresse, Y.; Satre, A.; Schulz, C.; Krämer, H.; Zhao, H.; Damiano, L.: Innovative Ultra-low NO_x Controlled Auto-Ignition Combustion Process for Gasoline Engines: the 4-SPACE Project. SAE 2000-01-1873, 2000.
- [18] Lavy, J.; Dabadie, J.-C.; Duret, P.; Angelberger, C.; Le Croz, J.-F.; Cherel, J.: Controlled Anti-Ignition (CAI): A new Highly Efficient and Near-Zero NO_x Emissions Combustion Process for Gasoline Engine Application. IFP-Kongress: A New Generation of Engine Combustion Processes for the Future?, Paris, 2001.
- [19] Allen, J.; Law, D.: Variable Valve Actuated Controlled Auto-Ignition: Speed Load Maps and Strategic Regimes of Operation. SAE 2002-01-0422, 2002.
- [20] Suzuki, H.; Koike, N.; Ishii, H.; Odaka, M.: Exhaust Purification of Diesel Engines by Homogeneous Charge with Compression Ignition Part 1: Experimental Investigation of Combustion and Exhaust Emission Behaviour Under Pre-Mixed Homogeneous Charge Compression Ignition Method. SAE 970313, 1997.
- [21] Ishii, H.; Koike, N.; Suzuki, H.; Odaka, M.: Exhaust Purification of Diesel Engines by Homogeneous Charge with Compression Ignition Part 2: Analysis of Combustion Phenomena and NO_x Formation by Numerical Simulation with Experiment. SAE 970315, 1997.
- [22] Odaka, M.; Suzuki, H.; Koike, N.; Ishii, H.: Search for Optimizing Control Method of Homogeneous Charge Diesel Combustion. SAE 1999-01-0184, 1999.
- [23] Yokota, H.; Kudo, Y.; Kakajima, H.; Kekegawa, T.; Suzuki, T.: A New Concept for Low Emission Diesel Combustion. SAE 970891, 1997.
- [24] Kimura, S.; Aoki, O.; Kitahara, Y.; Aiyoshizawa, E.: Ultra-Clean Combustion Technology Combining a Low-Temperature and Premixed Combustion Concept for Meeting Future Emission Standards. SAE 2001-02-0200, 2001.
- [25] Kimura, S.; Aoki, O.; Ogawa, H.; Muranaka, S.; Enomoto, Y.: New Combustion Concept for Ultra-Clean and High-Efficiency Small DI Diesel Engines. SAE 1999-01-3681, 1999.
- [26] Hashizume, T.; Miyamoto, T.; Akagawa, H.; Tsujimura, K.: Combustion and Emission Characteristics of Multiple Stage Diesel Combustion. SAE 980505, 1998.
- [27] Gatellier, B.; Walter, B.; Miche, M.: New Diesel Combustion Process to Achieve Near Zero NO_x and Particulates Emissions. IFP-Kongress: A New Generation of Engine Combustion Processes for the Future?, Paris, 2001.

- [28] Walter, B.; Gatellier, B.: Development of the High Power NADITM Concept Using Dual Mode Diesel Combustion to Achieve Zero NO_x and Particulate Emissions. SAE 2002-01-1744, 2002.
- [29] Aoyama, T.; Yoshiaki, H.; Mizuta, J.; Sato, Y.: An Experimental Study on Premixed-Charge Compression Ignition Gasoline Engine. SAE 960081, 1996.
- [30] Iwabuchi, Y.; Kawai, K.; Shoji, T.; Takeda, Y.: Trial of New Concept Diesel Combustion System - Premixed Compression-Ignited Combustion -. SAE 1999-01-0185, 1999.
- [31] Takeda, Y.; Keiichi, Na.; Keiichi, Ni.: Emission Characteristics of Premixed Lean Diesel Combustion with Extremely Early Staged Fuel Injection. SAE 961163, 1996.
- [32] Akagawa, H.; Miyamoto, T.; Sasaki, S.; Shimanazi, N., Hashuzime, T.; Tsujimura, K.: Approaches to Solve Problems of the Premixed Lean Diesel Combustion. SAE 199-01-0183, 1999.
- [33] Aoyagi, Y.; Asami, Y.; Kunishima, E.; Harada, A.; Morita, A.; Seko, T.: Visualised Analysis of a Pre-Mixed Diesel Combustion Under the High Boosting Engine Condition. The Fifth International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA 2001), Nagoya, 2001.
- [34] Yanagihara, H.; Sato, Y.; Mizuta, J.: A study of DI diesel combustion under uniform higher-dispersed mixture formation. JSAE 9733675, 1997.
- [35] Yanagihara, H.; Sato, Y.; Mizuta, J.: A study of DI diesel combustion under uniform higher-dispersed mixture formation. JSAE 9735853, 1997.
- [36] Yanagihara, H.: Ignition Timing Control at Toyota "UNIBUS" Combustion System. IFP-Kongress: A New Generation of Engine Combustion Processes for the Future?, Paris, 2001.
- [37] Christensen, M.; Hultqvist, A.; Johannson, B.: Demonstrating the Multi Fuel Capability of a Homogeneous Charge Ignition Engine with Variable Compression ratio. SAE 1999-01-3679, 1999.
- [38] Schloz, E.: Untersuchungen zur homogenen Dieselerbrennung bei innerer Gemischbildung. Universität Karlsruhe. Dissertation, 2003.
- [39] Heywood, John B.: Internal Combustion Engine Fundamentals. McGraw-Hill. New York, 1988.
- [40] Ogink, R.: Gasoline HCCI Modeling. Chalmers university of technology, Göteborg, Schweden, 2002.
- [41] Easley, W.L.; Agarwal, A.; Lavoie, G.A.: Modelling of HCCI Combustion and Emissions Using Detailed Chemistry. SAE 2001-01-1029, 2001.

- [42] Aceves, Salvador M.; Martinez-Frias, Joel; Flowers, Daniel L.; Smith, Ray; Dibble, Robert W.; Wright, John F., Hessel, Randy P: A Decoupled Model of Detailed Fluid Mechanics Followed by Detailed Chemical Kinetics for Prediction of Iso-Octane HCCI Combustion. SAE 2001-01-3612, 2001.
- [43] Babajimopoulos, A.; Assanis, D.N.; Flower, D.L.; Aceves, S.M.; Hessel, R.P.: A Fully Integrated CFD and Multi-zone Model with Detailed Chemical Kinetics for the Simulation of PCCI Engines. 15th International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting, 2005.
- [44] Babajimopoulos, A.; Assanis, D.N.; Flower, D.L.; Aceves, S.M.; Hessel, R.P.: A fully coupled computational fluid dynamics and multi-zone model with detailed chemical kinetics for the simulation of premixed charge compression ignition engines. International Journal of Engine Research, Vol. 6, 2005.
- [45] Kraft, M.: Stochastic Modeling of Turbulent Reacting Flow in Chemical Engineering. Fortschritt Berichte VDI Reihe 6 Nr. 391, Düsseldorf, 2001.
- [46] Maigaard, P.; Mauss, F.; Kraft, M.: Homogeneous Charge Compression Ignition Engine: A Simulation Study on the Effects of Inhomogeneities. ASME 2000-ICE-275, 2000.
- [47] Soyhan, H.S.; Lovas, T.; Mauss, F.: A Stochastic Simulation of an HCCI Engine using an Automatically Reduced Mechanism. ASME 2001-ICE-416, 2001.
- [48] Montorsi, L.; Mauss, F.; Bianchi, G.M.; Bhave, A.; Kraft, M.: Analysis of the HCCI Combustion of a Turbocharged Truck Engine using a Stochastic Reactor Model. ASME Fall Technical Conference, ICES-2003-681, 2003.
- [49] Pope, S., B.: PDF Methods for Turbulent Reactive Flows. Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 11, S. 119-192, 1985.
- [50] Möbus, H.: Euler- und Lagrange-Monte-Carlo-PDF-Simulation turbulenter Strömungs-, Mischungs- und Verbrennungsvorgänge. Fortschritt Berichte VDI Reihe 7 Nr. 414, Düsseldorf, 2001.
- [51] Lundgren, T.S.: Distribution Functions in the Statistical Theory of Turbulence. The Physics of Fluids, Vol. 10, Nr. 5, S. 969-975, 1967.
- [52] Pope, S., B.: A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow. Combustion Science and Technology, Vol. 25, S. 159-174, 1981.
- [53] Scheurlen, M.: Über den Einsatz von Monte-Carlo-Verfahren zur Berechnung von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen in reagierenden Brennkammerströmungen. Universität Karlsruhe. Dissertation, 1992.
- [54] Laxander, A.: Numerische Simulation von turbulenten Diffusionsflammen mit einem PDF-Transportgleichungsmodell. Universität Stuttgart. Dissertation, 1996.
- [55] Wölfert, A.: Verwendung von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktions-Methoden zur Modellierung turbulenter reaktiver Strömungen. Universität Stuttgart. Dissertation, 1997.

- [56] Nooren, P.: Stochastic modeling of turbulent natural-gas flames. Universität Delft. Dissertation, 1998.
- [57] Taut, C.: Simulation turbulenter reaktiver Strömungen mittels Monte-Carlo-PDF-Methoden in drei Raumdimensionen am Beispiel motorischer Verbrennung. Universität Heidelberg. Dissertation, 1999.
- [58] Wouters, H.: Lagrangian Models for Turbulent Reacting Flows. Universität Delft. Dissertation, 1998.
- [59] Kollmann, W.: Modelling of Combustion and Turbulence - Pdf Transport Modelling. von Karman Institute Lecture Series, 1992.
- [60] Zhu, M.; Bray, K.N.C.; Rumberg, O.; Rogg, B.: PDF Transport Equations for Two-Phase Reactive Flows and Sprays. *Combustion and Flame*, Vol. 122, S. 327-338, 2000.
- [61] Liu, Z.; Zheng, C.; Zhou, L.: A Joint PDF Model for Turbulent Spray Evaporation/Combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2002, Vol 29, S. 561-568.
- [62] Zhang, Y.Z.; Kung, E.H.; Haworth, D.C.: A PDF method for multidimensional modeling of HCCI engine combustion: effects of turbulence/chemistry interactions on ignition timing and emissions. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2005, Vol 30, S. 2763-2771.
- [63] Kung, E.H.; Haworth, D.C.: An Investigation of PDF Methods in Real Engine Configurations. *International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting*, 2007.
- [64] Peters, N.: *Turbulent Combustion*. Cambridge, University Press, 2000.
- [65] Curl, R.L.: Dispersed Phase Mixing: I. Theory and Effects in Simple Reactors. *A.I.Ch.E. Journal*, Vol. 9, S. 175-181, 1963.
- [66] Dopazo, C.: Relaxation of initial probability density functions in the turbulent convection of scalar fields. *Phys. Fluids*, Vol. 22(1), S. 20-30, 1979.
- [67] Dopazo, C.: Recent Developments in Pdf Methods, in P. A. Libby and F. A. Williams (editors): *Turbulent Reacting Flows*, S. 375-474, Academic Press, London, 1994.
- [68] Subramaniam, S.; Pope, B.: A Mixing Model for Turbulent Reactive Flows based on Euclidean Minimum Spanning Trees. *Combustion and Flame*, Vol. 115, S. 487-514, 1998.
- [69] Kong, S.-C.; Marriott, C.D.; Reitz, R.D.; Christensen, M.: Modelling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD. SAE 2001-01-1026, 2001.
- [70] Kong, S.-C.; Reitz, R.D.: Application of Detailed Chemistry and CFD for Predicting Direct Injection HCCI Engine Combustion and Emissions. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2002, Vol 29, S. 663-669.
- [71] Priesching, P.; Wanker, R.; Cartellieri, P.; Tatschl, R.: Detailed and Reduced Chemistry CFD Modeling of Premixed Charge Compression Ignition Engine Combustion.

- [72] Steiner, R.: Modellbildung und strömungsmechanische Simulation der dieselmotorischen Verbrennung. Universität Karlsruhe. Dissertation, 2004.
- [73] Steiner, R., Bauer, C.; Krüger, C.; Otto, F.; Maas, U.: 3d-Simulation of DI-Diesel Combustion applying a Progress Variable Approach accounting for Complex Chemistry. SAE 2004-01-0106, 2004.
- [74] Amsden, A.A.; O'Rourke, P.J.; Butler, T.D.: KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays. Los Alamos Report LA-11560-MS, Los Alamos National Laboratory, 1989.
- [75] Kong, S.-C.; Han, Z.; Reitz, R.D.: The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulation. SAE 950278, 1995.
- [76] Abraham, J.; Bracco, F.V.; Reitz, R.D.: Comparisons of Computed and Measured Premixed Charge Engine Combustion. *Combustion and Flame*, 60:309-322, 1985.
- [77] Kong, S.-C.; Ayoub, N.; Reitz, R.D.: Modeling Combustion in Compression Ignition Homogeneous Charge Engines. SAE 920512, 1992.
- [78] Magnussen, B.F.; Hjertager, B.H.: On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. The 16th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 1976.
- [79] Magnussen, B.F.; Hjertager, B.H.: On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. The 16th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 1976.
- [80] Karlsson, J.A.J.: Modeling Auto-Ignition, Flame Propagation and Combustion in Non-Stationary Turbulent Sprays. PhD thesis, Chalmers University of Technology, Göteborg, 1995.
- [81] Rao, S.: A Probability Density Function Time-scale Model for Combustion using Large Eddy Simulation. MS thesis, University of Wisconsin-Madison, 2001.
- [82] Rao, S.; Rutland, C.J.: A Flamelet Time Scale combustion model for turbulent combustion in KIVA. 12th Int. Multidim. Engine Modeling User's group Meeting at SAE Congress, 2002.
- [83] Pires da Cruz, A.: 3D Modeling of Self-Ignition in HCCI and Conventional Diesel Engines. *Combustion Science and Technology*, Vol. 176, S. 867-887, 2004.
- [84] Colin, O.; Pires da Cruz, A.; Jay, S.: Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations. *Proceedings of the Combustion Institute*. 2005, Vol 30, S. 2649-2656.
- [85] Williams, F.A.: Spray Combustion and Atomization. *Phys. Fluids*, Band 1, S. 541-545, 1958.
- [86] Krüger, C.: Validierung eines 2D-Spraymodells zur Simulation der Gemischbildung in direkt einspritzenden Dieselmotoren. Universität Aachen. Dissertation, 2001.

- [87] Amsden, A., A.; O'Rourke, P., J.; Butler, T., D.: KIVA-II: A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays. Los Alamos Report LA-11560-MS, Los Alamos National Laboratory, 1989.
- [88] Christensen, M.; Johansson, B.: The Effect of In-Cylinder Flow and Turbulence on HCCI-Operation. SAE 2002-01-2864, 2002.
- [89] Kong, S.-C.; Reitz, R.D.: Use of detailed chemical kinetics to study hcci engine combustion with consideration of turbulent mixing effects. ASME 2000-ICE-306, 2000.
- [90] Kong, S.-C.; Reitz, R.D.; Christensen, M.; Johansson, B.: Modeling the Effects of Geometry Generated Turbulence on HCCI Engine Combustion. SAE 2003-01-1088, 2003.
- [91] Hohlbaum, B.: Beitrag zur rechnerischen Unterstützung der Stickstoffoxid-Bildung schnelllaufender Hochleistungsdieselmotoren. Universität Karlsruhe. Dissertation, 1992.
- [92] Glarborg, P.; Miller, J.A.; Kee, R.J.: Kinetic Modeling and Sensitivity Analysis of Nitrogen Oxide Formation in Well-Stirred Reactors. Combustion and Flame, 65:177-202, 1986.
- [93] Glassman, I.: Combustion. Academic Press, San Diego, 1996.
- [94] Merker, G.P.; Stiesch, G.: Technische Verbrennung, Motorische Verbrennung. B. G. Teubner Verlag, Stuttgart, Leipzig, 1999.
- [95] Pilling, M., J.; Seakins, P., W.: Reaktion Kinetics. Oxford University Press, New York, 1995.
- [96] Pilling, M., J.: Low-Temperature Combustion and Autoignition. Comprehensive Chemical Kinetics, Volume 35, Elsevier Science B. V., Amsterdam, 1997.
- [97] Homann, K., H.: Reaktionskinetik. Dr. Dietrich Steinkopf Verlag, Darmstadt, 1975.
- [98] Lang, G.: Reaktionskinetik. Verlag Moritz Diesterweg, Frankfurt Main, 1990.
- [99] Westbrook, C., K.; Curran, H., J.; Pitz, W., J., Griffiths, J., F., Mohamed, C.; Wo, S., K.: The Effects of Pressure, Temperature and Concentration on the Reactivity of Alkanes: Experiments and Modeling in a Rapid Compression Machine. The 27th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, S. 371-378, 1998.
- [100] Golovitchev, V.: u.a. n-Heptan- u. iso-Oktan-Mechanismus (CHEMKIN-basiert) <http://www.tfd.chalmers.se/valeri/MECH.html>
- [101] Colin, O.; Benkenida, A.: The 3-Zones Extended Coherent Flame Model (ECFM3Z) for Computing Premixed/Diffusion Combustion. Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP, Vol. 59, No. 6, S. 593-609, 2004.
- [102] Colin, O.; Benkenida, A.; Angelberger, C.: 3D Modeling of Mixing, Ignition and Combustion Phenomena in Highly Stratified Gasoline Engines. Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP, Vol. 58, No. 1, S. 47-62, 2003.

- [103] Zolver, M.; Benkenida, A.; Bohbot, J.; Klahr, D.; Reveille, B.: CFD Tools at IFP for HCCI Engine Simulations. International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting, 2004.
- [104] Zellat, M.; Duranti, S.; Liang, Y.; Kralj, C.; Schmidt, G.; Duclos, J.-M.: Towards a Universal Combustion Model in STAR-CD for IC Engines: From GDI to HCCI and Application to DI Diesel Combustion Optimisation. International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting, 2003.
- [105] Barths, H.; Pitsch, H.; Peters, N.: Three-Dimensional Simulation of Pollutant Formation in a DI-Diesel Engine Using Multiple Interactive Flamelets. SAE 982459, 1998.
- [106] Barths, H.: Simulation of Diesel Engine and Gas Turbine Combustion Using Multiple Flamelets with Detailed Chemistry. Universität Aachen. Dissertation, 2000.
- [107] Barths, H.; Pitsch, H.; Peters, N.: Three-Dimensional Simulation of DI Diesel Combustion and Pollutant Formation Using a Two-Component Reference Fuel. Oil and Gas Science and Technology, 2, Vol. 54, 1999.
- [108] Klimenko, A., Y.; Bilger, R., W.: Conditional moment closure for turbulent combustion. Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 25, S. 595-687, 1999.
- [109] Poinso, T.; Veynante, D.: Theoretical and Numerical Combustion. Edwards-Verlag, 2001.
- [110] Spadaccini, L.J.; TeVelde, J.A.: Autoignition Characteristics of Aircraft-Type Fuels. Combustion and Flame, 46:283-300, 1982.
- [111] Wolfer, H.H.: Der Zündverzug im Dieselmotor. VDI-Forschungsheft 392, 1938.
- [112] Bourdon, A.; Rymer, G.; Wanker, R.: Optimization of a 5-Step Kinetic Scheme for HCCI Applications. SAE 2004-01-0559, 2004.
- [113] Halstead, M.P.; Kirsch, L.J.; Prothero, A.; Quinn, C.P.: A mathematical model for hydrocarbon autoignition at high pressures. Proc. R. Soc. Lond. A. 346, S. 515-538, 1975.
- [114] Schreiber, M.; Sadat Sakak, A.; Lingens, A.: A reduced thermokinetic model for the autoignition of fuels with variable octane ratings. The 25th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, 1994.
- [115] Spalding, D.B.: Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames. The 13th Symposium (International) on Combustion, The Combustion Institute, S. 649-657, 1971.
- [116] Oertel, H.: Strömungsmechanik. Vieweg-Verlag, Braunschweig/Wiesbaden, 1999.
- [117] Versteeg, H.K.; Malalasekera, W.: An Introduction to Computational Fluid Dynamics (The Finite Volume Method). Pearson Education Limited, Harlow (England), 1995.

- [118] Zeldovich, J.: The Oxidation of Nitrogen in Combustion and Explosions. Acta Physico-chimica URSS, Vol. XXI No.4, 1946.
- [119] Wan, Y.: Numerical Study of Transient Fuel Sprays with Autoignition and Combustion under Diesel-Engine relevant Conditions. Universität Aachen, Dissertation, 2000.
- [120] Wan, Y.; Peters, N.: Scaling of Spray Penetration with Evaporation. Atomization and Sprays, Band 9, S. 111-132, 1999.
- [121] Steiger, W.; Kohnen, C.; Nitzke, H.-G.: Das Low-Emission Brennverfahren CCS - Symbiose aus Kraftstoff, Verbrennung und Regelung. 2. Emission Control, Dresden, 2004.
- [122] Pope, S.B.: Turbulent Flows. Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [123] Michels, U.: Verbesserte 3D-Simulation der dieselmotorischen Verbrennung durch Applikation des ICAS-Modells für die Gemischbildung. Universität Aachen, Diplomarbeit, 2001.
- [124] <http://de.wikipedia.org/wiki/BtL-Kraftstoff>
- [125] <http://www.choren.com/de/>
- [126] Richtlinie 2003/30/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 8. Mai 2003 zur Förderung der Verwendung von Biokraftstoffen oder anderen erneuerbaren Kraftstoffen im Verkehrssektor.
- [127] DIN EN 590: Kraftstoffe für Kraftfahrzeuge - Dieselmotorkraftstoff - Anforderungen und Prüfverfahren; Deutsche Fassung EN 590:2004.
- [128] DIN EN 228: Kraftstoffe für Kraftfahrzeuge - Unverbleite Ottomotorkraftstoffe - Anforderungen und Prüfverfahren; Deutsche Fassung EN 228:2004.
- [129] Fieweger, K.: Selbstzündung von Kohlenwasserstoff/Luft-Gemischen unter motorischen Randbedingungen. Shaker-Verlag, Aachen. Dissertation, 1996.
- [130] Ciezki, H.: Untersuchung des Selbstzündungsverhaltens von n-Heptan/Luft-Gemischen unter hohem Druck. Verlag der Augustinus-Buchhandlung, Aachen. Dissertation, 1990.
- [131] Pfahl, U.: Selbstzündverhalten dieselrelevanter Modellkraftstoffe. Shaker-Verlag, Aachen. Dissertation, 1996.
- [132] Jones, W.P.; Whitelaw, J.H.: Calculation Methods for Turbulent Flows: A Review. Combustion and Flame, Vol. 48, S. 1-26, 1982.
- [133] <http://www.dieselnet.com/standards/>
- [134] Kee, R.J.; Miller, J.A.; Jefferson, T.H.: CHEMKIN: A General-Purpose, Problem-Independent, Transportable, Fortran Chemical Kinetics Code Package. Sandia-Report, SAND80-8003, 1980.
- [135] Hergart, C.; Barths, H.; Peters, N.: Modelling the Combustion in a Small-Bore Diesel Engine Using a Method Based on Representative Interactive Flamelets. SAE 1999-01-3550, 1999.

Wissenschaftlicher Werdegang

Name: Clemens Bauer

Geburtsdatum: 20. Oktober 1973

Geburtsort: Karlsruhe

Staatsangehörigkeit: deutsch

Familienstand: verheiratet mit Birgit Heini

Schulbildung: 1980 - 1984
Grundschule in Karlsruhe

1984 - 1993
Humboldt-Gymnasium in Karlsruhe
Allgemeine Hochschulreife

Studium: 09/1994 - 05/2000
Technische Universität Karlsruhe
Fachbereich Maschinenbau
Studienrichtung: allgemeiner Maschinenbau
Abschluss: Diplom-Ingenieur

10/1999 - 03/2000
Diplomarbeit
Institut für Entwurfsaerodynamik, DLR, Braunschweig

Beruf: 10/2000 - 12/2003
Doktorand im Forschungsbereich Verbrennungsmotoren
der DaimlerChrysler AG, Stuttgart

01/2004 - 12/2005
Wissenschaftlicher Mitarbeiter innerhalb des Bereichs
Research and Technology/Austauschgruppe/Knowledge Transfer
der DaimlerChrysler AG, Stuttgart

seit 01/2006
Berechnungsingenieur in der Motoren-Entwicklung
der Daimler AG, Stuttgart