

**Ein statistisches Modell  
zur quantitativen Beschreibung der Verbrennung  
in einem HCCI – Motor**

***A statistical model for  
the quantitative description of combustion  
in an HCCI – engine***

Dipl.-Ing. Alexander Schubert, Dr.-Ing. Robert Schießl, Prof. Dr. rer. nat. Ulrich Maas  
Universität Karlsruhe, Institut für Technische Thermodynamik



## 1 Einleitung

Eine rasche und gezielte Entwicklung von Verbrennungsmotoren ist auf verlässliche und effiziente Werkzeuge für die numerische Modellierung der im Brennraum ablaufenden Prozesse angewiesen. Eine große Schwierigkeit hierbei ist es, die bei der Zündung und Verbrennung stattfindende komplizierte Abfolge chemischer und physikalischer Prozesse in vollem Detail zu berechnen. Vor allem die Steuerung der Zündung und Verbrennung in HCCI-Motoren durch Abgasrückhaltung, ein wichtiges Konzept der aktuellen Motorenentwicklung, ist bei der derzeitigen verfügbaren Rechenleistung nicht in vollem Detail numerisch berechenbar.

Bisherige numerische und experimentelle Untersuchungen haben jedoch gezeigt, dass zumindest der Zünd- und Verbrennungsprozess in HCCI-Motoren mit homogener Zylinderladung (ohne Abgasrückhaltung) unter hinreichend mageren Bedingungen durch einfache und effiziente statistische Modelle recht genau modelliert werden kann [1]. Als für den Verlauf der Selbstzündung und der nachfolgenden Verbrennung wesentliche Größe wurde hierbei die örtliche Fluktuation des Temperaturfeldes im Zylinder identifiziert. Ein Modell wurde daher entwickelt und vorgestellt, das das unverbrannte Gas als bezüglich des Kraftstoff-Luft-Verhältnisses als homogen, bezüglich des Temperaturfeldes als kleinen statistischen Schwankungen unterliegend beschreibt.

In praktischen HCCI-Motoren ist die Rückhaltung von verbranntem Abgas und seine Vermischung mit Frischgas ein wesentlicher Aspekt, so dass nicht von einer vollkommen homogenen Zusammensetzung der Zylinderladung ausgegangen werden kann. In Erweiterung der vorherigen Arbeiten wird in dieser Studie daher ein statistisches Modell zur Beschreibung von HCCI-Motoren mit Abgasrückhaltung entwickelt und angewandt. Das Modell wird benutzt, um numerisch den Einfluss örtlicher Fluktuationen des Mischungsgrads zwischen Abgas und Frischgas auf die Zündung und die Verbrennung zu studieren.

Zur Modellvalidierung wird in einem optisch zugänglichen HCCI-Motor durch Experimente Information über die Statistik des Mischungsgrads zwischen Abgas und Frischgas gewonnen. Die Experimente werden genutzt um zu prüfen, ob gewisse Voraussetzungen für die Anwendbarkeit des Modells in dem untersuchten Motor realisiert sind. Weiterhin dient die experimentell bestimmte Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung des Mischungsgrads, die die Mischung von Abgas und Frischgas beschreibt, als Eingangsgröße für das statistische Modell.

## 2 Experimentelle Untersuchungen

In einem optisch zugänglichen Einzylinder 2-Takt HCCI-Versuchsmotor [1] wurden experimentelle Untersuchungen mit Laserinduzierter Fluoreszenz (LIF) durchgeführt, um die Mischung zwischen Abgas und Frischgas im Brennraum kurz vor der Selbstzündung

## 1 Introduction

*A rapid and purposeful development of combustion engines requires reliable and efficient tools for the numerical modelling of the various processes that occur inside the combustion chamber. To compute those processes in full detail is a large challenge. Especially, the influence of exhaust gas that remains in the cylinder from the previous cycle, on the ignition and combustion in HCCI engines — an important concept in the current engine development — can at the present time not be simulated in full detail due to the prohibitively large computational effort.*

*Numerical and experimental investigations have shown, however, that at least the ignition and combustion in HCCI engines with lean, nearly homogeneous loads (without residual exhaust gas) may be described reasonably accurate by statistical models [1]. The temperature fluctuation field in the unburned gas was identified as being of essential importance for the ignition and combustion process. A numerical model was developed and introduced that treats the cylinder load as a homogeneous fuel/air mixture that displays small, statistical temperature fluctuations.*

*In realistic HCCI-engines, the presence of residual exhaust gas and its mixing with fuel/air mixture is an essential aspect; therefore, a cylinder load with a homogeneous chemical composition is not a realistic assumption. As an extension of previous work, in this paper a statistical model for the description of HCCI engines with exhaust gas recirculation is developed and applied. The model is used to investigate the influence of local inhomogeneities in the mixing ratio between exhaust gas and fuel/air mixture on ignition and combustion.*

*For model validation, experiments are performed in an optically accessible HCCI engine in order to retrieve information about the statistics of the degree of mixing between exhaust gas and fresh gas. These experiments are also used to check if certain conditions for applying the model are fulfilled. Furthermore, the experimentally determined probability density function of the degree of mixing, which describes the mixing between exhaust gas and fresh gas is used as an input to the model.*

## 2 Experimental investigations

*In an optically accessible one-cylinder two-stroke test engine, [1] experiments were performed using laser-induced fluorescence (LIF) as a diagnostic technique. The mixing between exhaust and fresh gas shortly before self-ignition, as well as the onset of self-ignition*



dung, sowie das Einsetzen der Selbstzündung und die nachfolgende Verbrennung, zu visualisieren. Details zu diesem Experiment sind bereits in früheren Arbeiten (siehe [1]) publiziert worden, daher wird hier nur kurz auf einige wesentliche Punkte eingegangen.

Eine Mischung aus 90 vol-% iso-Oktan (Reinheit > 99%) und 10% Aceton (als Fluoreszenztracer) wurde erstellt. Der Motor wurde mit dieser Mischung als Kraftstoff im HCCI-Modus bei einer Drehzahl von 1000 min<sup>-1</sup> betrieben. Der HCCI Modus wurde durch Vorheizung der Ansaugluft auf 170 °C und durch das nach einem Verbrennungszyklus im Brennraum verbleibende heiße Abgas erreicht. Durch Einstrahlung eines Laserlichtschnittes (XeCl-Excimer, Wellenlänge 308 nm, Breite ca. 5 cm, Höhe 500 mm, gemessen vor Eintritt in den Motor) in den Brennraum wurde das Aceton zur Fluoreszenz angeregt. Das resultierende zweidimensionale Fluoreszenz-Intensitätsfeld wurde mit Hilfe einer intensivierten CCD-Kamera (LaVision FlameStar II F) digital aufgenommen. Der zeitliche Verlauf des Zylinderdrucks wurde mit einem piezoelektrischen Druckaufnehmer (Kistler 6001) gemessen.

Das im Zylinder verbleibende Abgas liefert keine messbare Fluoreszenz. Die vor dem Einsetzen der Selbstzündung aufgezeichneten LIF-Bilder geben daher qualitative Informationen über das Mischungsgradfeld, also die räumliche Verteilung von Abgas und Frischgas, im Brennraum. Zu späteren Zeitpunkten (während und nach der Zündung) aufgenommene Bilder werden zusätzlich durch den Abbau von Aceton beeinflusst. Sie zeigen, überlagert zum Mischungsgradfeld, die Verteilung des chemischen Fortschritts im Brennraum, da bei den im Brennraum stattfindenden chemischen Prozessen das Aceton abgebaut wird.

### 3 Methodik

#### 3.1 Numerisches Modell

In den verschiedenen Motorkonzepten werden verschiedene Wege beschritten, um den Kraftstoff in den Brennraum einzubringen und diesen mit der Luft zu vermischen (Saugrohreinspritzung, Direkteinspritzung mit ihren verschiedenen Varianten). Durch verschiedene Maßnahmen (Ladungsbewegung, Turbulenz) kann eine mehr oder weniger starke Homogenisierung des Kraftstoff/Luft/Restgas-Gemisches erreicht werden. Es ist ein nichttriviales Problem, die Einzelheiten der Gemischbildung und ihrer Interaktion mit dem Strömungsfeld zu modellieren. Im Rahmen dieser Arbeit ist lediglich der Zustand des Gemisches unmittelbar vor dem Einsetzen der chemischen Reaktionen (als Anfangsbedingung) von Interesse. Dieser anfängliche Mischungszustand wird vorgegeben, nicht modelliert. Der Einfluss des Mischungs Zustands auf die nachfolgende Selbstzündung und Verbrennung wird untersucht.

Die Vermischung von Abgas und Frischgas wird hierbei als statistisches Phänomen beschrieben. Hierfür werden die anfängliche (am unteren Totpunkt vor-

*tion and the subsequent combustion, were visualized. Details of this experiment have been described elsewhere [1]; therefore, only a short account will be given here.*

*A mixture of 90% (vol.) iso-octane (purity > 99%) and 10% acetone (as a fluorescent tracer) was prepared. The engine was operated in HCCI mode with this mixture as fuel at a speed of 1000 rpm. HCCI operation was achieved by heating the intake air to 170 °C, and by hot residual exhaust gas from the previous engine cycle. By illuminating the combustion chamber with a laser light sheet (XeCl-Excimer, wavelength 308 nm, width approx. 5cm, height ~500 mm, measured before entrance into the engine), acetone was excited to fluoresce. The resulting two-dimensional fluorescence intensity-field was recorded using an intensified CCD camera (LaVision FlameStar II F). The in-cylinder pressure trace was recorded using a piezoelectric pressure transducer (Kistler 6001).*

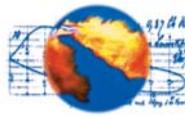
*The residual exhaust gas does not display any measurable fluorescence. LIF images that were recorded before the onset of auto-ignition deliver qualitative information about the mixing (the spatial distribution of fresh gas and exhaust gas) inside the combustion chamber. Images recorded at later times (during and after ignition) are influenced by the decomposition of acetone. They display the distribution of chemical progress in the combustion chamber, since acetone is decomposed by the chemical reactions associated with ignition and combustion.*

### 3 Methodology

#### 3.1 Numerical model

*In different engine concepts, different concepts to create a fuel/air mixture (port fuel injection, direct injection and their modifications) exist. By several means (flow field, turbulence), a more or less complete homogenisation of the fuel/air/exhaust mixture may be achieved. Modelling this mixing process in every detail is a non-trivial problem. However, for modelling ignition and combustion, it is the state of the cylinder load at the onset of self-ignition that is relevant. In our approach, this mixing state is specified, not derived. It is investigated how variations of the mixing state affect the subsequent ignition and combustion.*

*The mixing between exhaust gas and fresh gas is described as a statistical phenomenon. The initial chemical composition and temperature of the exhaust gas and fresh gas are fixed to certain values in a parametric study. This mixture is compressed according to the volume history of a moving piston in a crank-slider arrangement. By the compression-induced temperature rise, self-ignition is achieved near top dead center.*



herrschende) chemische Zusammensetzung und Temperatur des Abgases sowie des Frischgases festgelegt. Dieses Gemisch wird entsprechend der Zylindervolumenkurve (Kolbenbewegung) komprimiert und so zur Selbstzündung gebracht.

Das Frischgas wird durch eine iso-Oktan/Luft-Mischung mit  $\lambda=2.5$  und  $T=450$  K repräsentiert. Temperatur und chemische Zusammensetzung des Abgases werden aus diesem Frischgas durch Modellierung einer Zündung und Verbrennung im Motor durch Kompression und anschließende polytrope Expansion bis zum unteren Totpunkt, gefolgt von einer Entspannung auf  $p = 1$  bar, berechnet. Durch zusätzliche Modellierung von Wärmeverlusten kann die Abgastemperatur am unteren Totpunkt in weiten Bereichen variiert werden.

Der örtlich variierende Vermischungsgrad dieser beiden Gase wird durch die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung (pdf) des Mischungsgrades  $\xi$  charakterisiert.  $\xi$  ist definiert als der Bruchteil der Masse in einem Volumenelement, die von Abgas stammt; formelmäßig ist also

$$\xi = m_{\text{abgas}} / (m_{\text{frischgas}} + m_{\text{abgas}})$$

wobei  $m_{\text{abgas}}$  und  $m_{\text{frischgas}}$  die aus dem Abgas- und Frischgasstrom stammenden Massen in einem Volumenelement sind.  $\xi$  ändert sich durch chemische Reaktionen nicht.

In **Abbildung 1** sind einige qualitativ unterschiedliche Szenarien mitsamt den zugehörigen pdfs in  $\xi$  schematisch dargestellt. In der oberen Reihe ist ein Brennraum, der mit Abgas und Frischgas gefüllt ist, gezeigt. In allen Fällen ist der globale (über den gesamten Brennraum gemittelte) Mischungsgrad gleich 0.5; jedoch ist links die Standardabweichung des Mischungsgrades  $\xi$  sehr groß, d.h. es treten nur ungemischte Zonen aus Abgas ( $\xi=1$ ) und reinem Frischgas ( $\xi=0$ ) auf (bimodale pdf). Im mittleren Bild ist die Standardabweichung gleich null, da an allen Orten der Mischungsgrad gleich 0.5 ist (vollständige Vermischung im ganzen Brennraum). Ganz rechts findet sich eine teilweise gemischte Zylinderladung, mit einer gaußförmigen pdf.

Das Zünd- und Verbrennungsverhalten hängt bei gegebener Motorgeometrie und Drehzahl von der Mischungsgrad-pdf ab. Um diese Abhängigkeit numerisch zu modellieren, wird der Motorbrennraum in Zonen mit am unteren Totpunkt gleichem Anfangsvolumen eingeteilt. Jeder dieser Bereiche (identifiziert durch den Index  $j$ ) wird als

The fresh gas is represented by an iso-octane/air-mixture with a stoichiometric ratio  $\Phi=0.4$  and  $T=450$  K. Initial temperature and chemical composition of the exhaust gas are computed from the fresh gas by modelling a polytropic compression and ignition, with subsequent polytropic expansion to bottom dead center, followed by an expansion to  $p=1$  bar. By additional modeling of heat-transfer the exhaust gas temperature can be varied in a wide range.

The spatially varying mixing state of the two gases is characterized by the probability density function (pdf) of the degree of mixing  $\xi$ .  $\xi$  is defined as fractional part of the mass in a volume element that originates from the exhaust gas; as a formula

$$\xi = m_e / (m_f + m_e)$$

where  $m_e$  and  $m_f$  are the masses from the exhaust- and fresh gas stream.  $\xi$  cannot be changed by chemical reactions.

In **Figure 1**, some qualitatively different scenarios with the associated pdfs of  $\xi$  are shown. In the top-most row, a combustion chamber that is filled with exhaust and fresh gas is shown. In all cases, the global degree of mixing (averaged over the whole combustion chamber) equals 0.5; however, on the left side, the standard deviation of  $\xi$  is very large. There exist only separate zones of pure exhaust gas ( $\xi = 1$ ) and pure fresh gas ( $\xi = 0$ ), resulting in a bimodal pdf. In the column in the middle, the standard deviation is zero, since  $\xi$  has the same value, namely 0.5, at all locations (complete mixing throughout the whole combustion chamber). In the right column, partial mixing is realized, with a gaussian as pdf.

The ignition and combustion behavior depends, at a given engine geometry and speed, on the pdf of  $\xi$ . To model this dependence numerically, the combustion chamber is distributed into a number of zones, where each zone occupies the same volume at BDC. Each zone (identified by index  $j$ ) is treated as a homogeneous chemical reactor. Before the onset of reaction near TDC, temperature and chemical composition of each reactor are unambiguously defined by the degree of mixing  $\xi_j$  in each zone.

For the mass fractions  $w_{ij}$  of species  $i$  ( $i=1, \dots, n_s$ , where  $n_s$  is the number of chemical species that participate in the chemical reactions) in Zone  $j$  there holds before the onset of chemical reaction:

$$w_{ij} = \xi_j w_i^{(f)} + (1-\xi_j) w_i^{(a)}$$

$w_i^{(f)}$ , are the mass fractions of the species in the fresh gas, and  $w_i^{(a)}$ ; the mass fractions in the exhaust gas. The initial

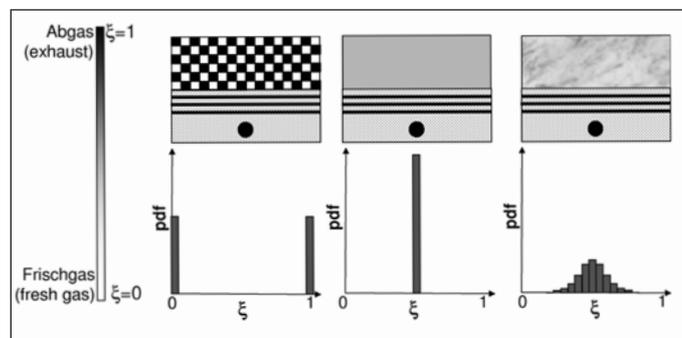


Abbildung 1:  
Illustration einiger Mischungszustände zwischen Abgas und Frischgas im Brennraum (obere Reihe), sowie die zugehörigen Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen (pdfs) des Mischungsgrades.  
Figure 1:  
Illustration of some mixing states between exhaust gas and fresh gas in the combustion chamber (top row), and the associated pdfs of the degree of mixing,  $\xi$ .



homogener chemischer Reaktor behandelt. Bevor die Reaktion einsetzt (in der Nähe des oberen Totpunktes) sind Temperatur und chemische Zusammensetzung jedes Bereiches durch den Mischungsgrad  $\xi_j$ , der das lokale Mischungsverhältnis zwischen Abgas und Frischgas beschreibt, festgelegt.

Für die Massenbrüche  $w_{ij}$  der chemischen Spezies ( $i=1, \dots, n_s$ , wobei  $n_s$  die Zahl der an den Reaktionen beteiligten chemischen Spezies ist) des  $j$ -ten Teilmolumens gilt zum Zeitpunkt 0 (vor dem Einsetzen der chemischen Reaktion)

$$w_{ij} = \xi_j w_i^{(f)} + (1 - \xi_j) w_i^{(a)} .$$

Dabei sind die  $w_i^{(f)}$  die Massenbrüche der chemischen Spezies im Frischgas, und die  $w_i^{(a)}$  die Massenbrüche im Abgas.

Die anfängliche Temperatur  $T_j$  in jedem Bereich ist durch die chemische Zusammensetzung  $w_{ij}$  und die innere spezifische Energie  $u_j = \xi_j u^{(f)} + (1 - \xi_j) u^{(a)}$  bestimmt.

Jeder einzelne dieser Bereiche entwickelt sich zeitlich unter dem Einfluss chemischer Reaktionen und physikalischen Zwangsbedingungen, die durch die Kolbenbewegung und die thermische Ausdehnung der einzelnen Volumina nach der Zündung entstehen. Die zeitliche Entwicklung der Reaktoren wird durch das folgende System von differentiell-algebraischen Gleichungen beschrieben:

$$\begin{aligned} \sum_j V_j &= V^{(zyl.)}(t) \\ du_j/dt &= -pdV_j/dt \\ dw_{ij}/dt &= \omega_{ij}^{(chem)} M_i / \rho_j \end{aligned} \quad (1)$$

$M_i$  ist die Molmasse der  $i$ -ten Spezies,  $\rho_j$  ist die Dichte des Gases im  $j$ -ten Reaktor,  $\omega_{ij}^{(chem)}$  ist der chemische Quellterm (auf molarer Basis) für die Spezies  $i$  im Reaktor  $j$ . Der Quellterm wird mit einem detaillierten chemischen Mechanismus für die Zündung und Verbrennung von iso-Oktan mit Luft ( $n_s=97$ ) [5] berechnet. Die Temperatur und der Zylinderdruck können in jedem Teilmolumen und zu allen Zeitpunkten aus der inneren Energie  $u_j$  und der chemischen Zusammensetzung  $w_{ij}$  berechnet werden, unter zusätzlicher Nutzung des idealen Gasgesetzes.

Das instantane Zylindervolumen  $V^{(zyl.)}(t)$  wird durch den instantanen Kurbelwinkel und die Motorgeometrie (Totvolumen, Kurbelgeometrie und Zylinderdurchmesser) vorgegeben. Der instantane Druck  $p$  wird als in allen Volumina gleich angenommen. Das Modell kann also keine Stoßwellen im Brennraum beschreiben, was für die hier betrachtete Verbrennung eines mageren, mit Abgas verdünnten Gemisches keine wesentliche Einschränkung darstellt [1]. Ebenso findet in dem Modell zwischen den Zonen kein Austausch von Wärme oder Stoff durch Transportprozesse statt.

Gl. (1) beschreibt ein Mehrzonenmodell [3], in dem jede Zone einen homogenen chemischen Reaktor darstellt. Das System kann auch als ein statistisches Ensemble [2] (statistisch bezüglich der Zusammen-

temperature  $T_j$  in each zone is determined by the chemical composition  $w_{ij}$  in this zone and the specific internal energy  $u_j = \xi_j u^{(f)} + (1 - \xi_j) u^{(a)}$ .

Each zone develops in time according to chemical reactions and the physical constraints imposed by the moving piston and by the thermal expansion of other zones after ignition. The temporal development of the reactors can be described by the following system of differential-algebraic equations:

$$\begin{aligned} \sum_j V_j &= V^{(cyl.)}(t) \\ du_j/dt &= -pdV_j/dt \\ dw_{ij}/dt &= \omega_{ij}^{(chem)} M_i / \rho_j \end{aligned} \quad (1)$$

$M_i$  is the molar mass of species  $i$ ,  $\rho_j$  is the density of the gas in the  $j$ th reactor,  $\omega_{ij}^{(chem)}$  is the chemical source term (on a molar basis), describing the rate of formation or consumption of species  $i$  in reactor  $j$ . This source term is evaluated using a detailed chemical mechanism for the ignition and combustion of iso-octane with air ( $n_s=97$ ) [5]. The temperature and the cylinder pressure can be computed at each instant of time and in each volume from the internal energy and  $u_j$ , the chemical composition  $w_{ij}$ , using the ideal gas law.

The instantaneous cylinder volume  $V^{(cyl.)}(t)$  is given by the crank angle and the engine geometry (clearance volume, crank geometry and cylinder diameter). The instantaneous pressure  $p$  is assumed to be equal in all volume elements. The model, therefore, can not describe pressure waves in the cylinder. For the cases we study here (lean fuel/air mixture diluted with exhaust gas) [1], this limitation is not essential.

Eq. (1) describes a multi-zone model, [3], in which each zone displays a homogeneous chemical reactor. The system can also be viewed as a statistical ensemble of homogeneous reactors, [2] (statistical with respect to composition and temperature), which are coupled only by the volume-sharing ( $\sum V_j = V^{(cyl.)}$ ) and the condition of equal pressure in each zone, but not by transport of heat or mass between the zones.

The neglect of transport processes displays a substantial simplification, which drastically reduces the computational effort and therefore renders the model feasible for numerical evaluation in practical problems. The question occurs, however, if this simplification does not imply a significant loss of accuracy. The accuracy can be estimated for the conditions of our engine by means of detailed 1D simulations. These simulations (similar to the studies in [7]) deliver the contribution of chemical and physical processes in the unburned gas to the rate of change of a quantity, e.g., the temperature or the concentration of chemical species. These simulations help to decide, if either chemical or physical processes dominate the development of the cylinder load, or if both processes are of the same relevance.

The spatial gradients of the scalars (temperature, species concentrations) are of paramount importance in this context, since steep gradients cause strong transport effects [6].



setzung und der Temperatur) von homogenen Reaktoren angesehen werden, die nur durch die Volumenteilung und durch den räumlich konstanten Druck, nicht jedoch durch Transport von Wärme oder Stoff miteinander gekoppelt sind.

Die Vernachlässigung von Transportprozessen stellt eine wesentliche Vereinfachung dar, die die Rechenzeit drastisch reduziert und das Modell so einer in der Praxis realisierbaren numerischen Auswertung zugänglich macht. Es stellt sich jedoch die Frage, ob diese Vereinfachung nicht einen wesentlichen Verlust an Genauigkeit bewirkt.

Die Genauigkeit dieser Modellannahme für die Bedingungen unseres Experimentalmotors kann jedoch durch Analyse detaillierter 1D-Simulationen abgeschätzt werden. Diese eindimensionalen Simulationen (ähnlich zu den Studien in [7]) liefern den Beitrag der chemischen und physikalischen Prozesse im unverbrannten Gas zur Änderungsgeschwindigkeit einer Größe, z.B. der Temperatur oder der Konzentration der chemischen Spezies. Somit lässt sich anhand der 1D-Simulationen für gegebene Bedingungen entscheiden, ob vorwiegend chemische Reaktionen oder Transportprozesse die Entwicklung des Systems bestimmen, oder ob diese Prozesse von vergleichbarer Größenordnung sind.

Von entscheidender Bedeutung sind hierbei die im Frischgas auftretenden Gradienten der Skalare (Temperatur, Spezieskonzentrationen), da steile Gradienten starke Transportprozesse bewirken [6]. Um die Größenordnung der in unserem Motor vorherrschenden Gradienten vor und während der Zündung abzuschätzen, wurden die Untersuchungen mit laserinduzierter Fluoreszenz von Aceton herangezogen (siehe Abschnitt "experimentelle Untersuchungen").

### 3.2 Evaluation der Messsignale

Ziel ist es, aus den Fluoreszenzbildern, die vor Einsetzen der Zündung erfasst wurden, auf die örtliche Verteilung des Mischungsgrades zu schließen. Da das LIF-Signal von vielen Faktoren (Gastemperatur, lokale Zusammensetzung) in komplizierter Weise beeinflusst wird, ist dies ein nichttriviales Problem.

Für das von einem Punkt im Brennraum emittierte LIF-Signal  $I$  von Aceton kann geschrieben werden

$$I = K p / (RT(\xi)) M_m / M_{ac} w_{ac} \sigma(p, \mathbf{w}, T) \quad (2)$$

wobei  $K$  eine Konstante zur Beschreibung der Intensität des Anregungslichtes sowie der Detektionseffizienz des verwendeten experimentellen Aufbaus ist,  $R$ ,  $M_{ac}$  und  $M_m$  die universelle Gaskonstante sowie die molaren Massen von Aceton und der Frischgas/Abgas Mischung sind.  $\mathbf{w} := (w_i)$  wurde hierbei als Abkürzung eingeführt.  $\sigma$  beschreibt die Temperatur-, Druck- und zusammensetzungsabhängigen spektroskopischen Eigenschaften (Absorption und Fluoreszenzemission) des Aceton. Vereinfacht ausgedrückt gibt  $\sigma(p, \mathbf{w}, T)$  an, wie effizient eine gegebene Stoffmenge des Tracers Aceton beim Druck  $p$  und unter den Bedingungen  $T$  und  $\mathbf{w}$  das eingestrahlte

*To estimate the order of magnitude of the gradients in our engine, investigations with laser induced fluorescence of seeded acetone were performed (see section "experimental investigations").*

### 3.2 Evaluation of measurement signals

*The goal is to estimate the local distribution of the degree of mixing between exhaust gas and fresh gas by the LIF-signal from acetone. Since the LIF-signal is determined by many factors like temperature and local gas composition, this is a non-trivial problem.*

*The LIF-signal  $I$  of acetone that is emitted from a certain point in the exhaust gas, can be expressed as*

$$I = K p / (RT(\xi)) M_m / M_{ac} w_{ac} \sigma(p, \mathbf{w}, T) \quad (2)$$

*where  $K$  is a constant that describes the Intensity of the exciting laser source and the detection efficiency of the employed optical setup.  $R$ ,  $M_{ac}$  and  $M_m$  are the universal gas constant, the molar masses of acetone and the exhaust gas/fresh gas mixture, respectively.  $\mathbf{w} := (w_i)$  is used as an abbreviation for the vector of molar masses.  $\sigma$  describes the temperature, pressure and composition dependent spectroscopical properties (absorption and fluorescence emission) of acetone. Simply stated,  $\sigma(p, \mathbf{w}, T)$  describes how efficiently the excitation light is transformed into fluorescence emission by a certain amount of acetone, at conditions given by  $(p, T, \mathbf{w})$ . Note that  $\sigma$  is a molar quantity.*



Anregungslicht in Fluoreszenzemission umsetzt.  $\sigma$  ist auf die Stoffmenge bezogen, gibt also die Fluoreszenzeffizienz bezogen auf ein Mol des Tracers an.

Um ausgehend von der Messgröße (LIF-Signal) Aussagen über den Mischungsgrad  $\xi$  zwischen Abgas und Frischgas zu treffen, lässt sich folgende, für den nichtreaktiven Fall gültige, abschätzende Überlegung anstellen:

Wenn die LIF-Intensitäten an verschiedenen Orten (aber zum gleichen Zeitpunkt, innerhalb eines LIF-Bildes) verglichen werden, dann ist die Druckabhängigkeit von  $I$  unwesentlich, da alle diese Punkte den gleichen Druck haben. Es kann weiterhin davon ausgegangen werden, dass  $\sigma$  nur schwach von der chemischen Zusammensetzung abhängt [9]. Nimmt man an, dass alle Spezies (insbesondere also der Tracer Aceton) gleich schnell diffundieren, dann sind im nichtreaktiven Fall die Konzentrationen aller Spezies eine eindeutige Funktion des Mischungsgrades  $\xi$ , und für den Massenbruch  $w_{ac}$  von Aceton gilt  $w_{ac}(\xi) = (1-\xi)w_{ac}^{(f)}$ . Die Abhängigkeit der Temperatur von  $\xi$  kann näherungsweise linearisiert werden durch  $T(\xi) = T^{(f)} + \xi(T^{(f)} - T^{(a)})$ . Falls man weiterhin annimmt, dass  $\sigma$  sich mit der Temperatur linear ändert, ( $\sigma = A + BT$ , mit Konstanten  $A$  und  $B$ ), dann lässt sich (2) schreiben als:

$$I = K' (1-\xi) (A+BT)/T \quad (3)$$

Dabei ist  $K' = KpM_m w_{ac}^{(f)}/(RM_{ac})$  konstant innerhalb eines LIF-Bildes (die mittlere Molmasse  $M_m$  hängt für das betrachtete Gemisch praktisch nicht von  $\xi$  ab). Da man ohne Beschränkung der Allgemeinheit  $A=1$  gesetzt werden kann (für  $A>0$  kann stets eine neue Konstante  $K'' = K'/A$  bestimmt und dann  $K'$  in Gl. (3) durch  $K''$  ersetzt werden) ist einfacher

$$I = K' (1-\xi) (1+BT)/T \quad (4)$$

( $K'$  ist hier  $KpM_m w_{ac}^{(f)}/(RM_{ac}A)$ ).

Für  $B=0$  ist  $I \sim (1-\xi)/(1+\xi)$ , für  $B \rightarrow \infty$  ist  $I \sim (1-\xi)$ . Aus Messungen der Fluoreszenzstärke für  $p=1$  bar und verschiedene Temperaturen [11] kann  $B \sim 0.01/K$  im Bereich 800 K bis ca. 1000 K abgeleitet werden. Dann hat die resultierende  $I(\xi)$ -Kurve näherungsweise die Form  $I \sim 1-\xi$ . Unter der Annahme, dass die Temperaturabhängigkeit von  $\sigma$  sich nicht stark mit steigendem Druck ändert, gilt dieser Zusammenhang auch für die hier betrachteten Bedingungen nahe dem OT. Die Fluoreszenzbilder können dann angenähert als "Negative" der Mischungsgradverteilung angesehen werden.

## 4 Ergebnisse

### 4.1 Experimentelle Resultate

In Abbildung 2 sind typische Einzelschuß-LIF-Signale aus dem Motor, aufgenommen 6°KW und 2°KW vor dem oberen Totpunkt (-6°CA, -2°CA), sowie 2°KW nach dem OT (+2°CA) gezeigt. Der Bildausschnitt stammt aus einem 5 cm langen und 6 mm breiten

To obtain information about  $\xi$  from the measured LIF-signal, the following consideration is made:

If LIF-Intensities emitted at different locations (but at the same time, within one LIF-image) are compared, then the pressure dependence of  $I$  is not essential, since all locations display the same pressure. Furthermore,  $\sigma$  depends only weakly on the chemical composition [9]. If we assume equal diffusivity for all species (including the tracer acetone), then the concentrations of all species are a function of  $\xi$ , and for the mass fraction  $w_{ac}$  of acetone there holds  $w_{ac}(\xi) = (1-\xi)w_{ac}^{(f)}$ . The temperature dependence of  $\xi$  can (since  $T(\xi)$  is certainly a smooth function) at least locally be approximated by a linear function according to  $T(\xi) = T^{(f)} + \xi(T^{(f)} - T^{(a)})$ . If we furthermore assume that  $\sigma$  varies locally linear with temperature ( $\sigma = A + BT$ , with some constants  $A$  and  $B$ ), we may write (2) as:

$$I = K'(1-\xi) (A+BT)/T \quad (3)$$

Here,  $K' = KpM_m w_{ac}^{(f)}/(RM_{ac})$  is a constant within a LIF-image (for the mixture investigated here, the mean molar mass  $M_m$  is practically independent of  $\xi$ ). Since we may always choose  $A=1$  (for  $A>0$ , a new constant  $K'' = K'/A$  can be determined, and then  $K'$  can be replaced by  $K''$  in (3), we get a simpler expression

$$I = K' (1-\xi) (1+BT)/T \quad (4)$$

( $K'$  is here  $KpM_m w_{ac}^{(f)}/(RM_{ac}A)$ ).

For  $B=0$  we have  $I \sim (1-\xi)/(1+\xi)$ , for  $B \rightarrow \infty$  there is  $I \sim (1-\xi)$ . By measuring the fluorescence for  $p=1$  bar and for different temperatures [11],  $B \sim 0.01/K$  can be derived in the range 800 K ... 1000 K. The resulting  $I(\xi)$ -curve then has approximately the shape  $I \sim 1-\xi$ . Assuming that the temperature dependence of  $\sigma$  does not vary strongly with increasing pressure, this relationship also holds for the conditions considered here near TDC. The fluorescence images can then be interpreted as approximate "negatives" of the  $\xi$ -fields.

## 4 Results

### 4.1 Experimental results

In Figure 2, typical single-shot LIF-Signals (greyscale images, representing the recorded LIF-intensity) out of the engine are shown, recorded at 6°CA and 2°CA before TDC (-6°CA, -2°CA), as well as 2°CA after TDC (+2°CA). The image is from a region with a length of



Ausschnitt aus der Mitte des Brennraums, der Laserstrahl fällt von rechts ein. Die Bilder sind um Absorptionseffekte korrigiert und mit einer Gauss-Maske der Breite 3 Pixel tiefpassgefiltert. Die Zahlen unter dem Kurbelwinkel geben die Grenzen (in Intensitäts-Counts der verwendeten Digitalkamera) der Falschfarbenskala an, wobei reines Schwarz der unteren Grenze (0 Counts) und reines Weiß der oberen Grenze (2500 bzw. 1000 Counts) entspricht. Von  $-6^\circ\text{KW}$  bis  $-2^\circ\text{KW}$  ändern sich der Druck im Brennraum kaum; lediglich bei  $+2^\circ\text{KW}$  ist ein leichter Anstieg des Druckes zu verzeichnen. Der hier beobachtete Prozess entspricht also noch nicht der (stark exothermen) Verbrennung, sondern dem Abbau von Aceton vor der Zündung, der ein nur sehr schwach exothermer oder gar leicht endothermer Prozess ist [12]. Insbesondere sind die spektroskopischen Bedingungen (Druck, Temperatur) in den Bildern annähernd gleich, so dass die Bildintensitäten näherungsweise als Aceton-Konzentrationen interpretiert (und als solche miteinander verglichen) werden können.

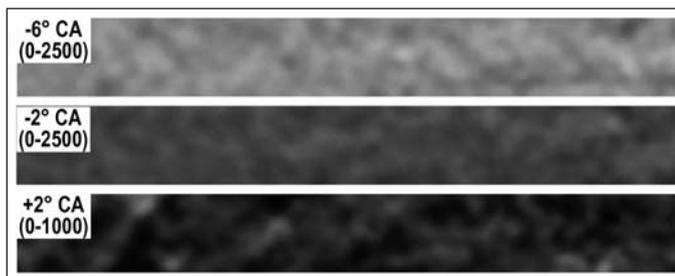


Abbildung 2:  
Planares LIF-Signal aus dem Motor (Einzelschüsse bei den angegebenen Kurbelwinkeln). Man beachte den Wechsel der Skala bei  $+2^\circ\text{KW}$ . Die Bildausschnitte geben einen Bereich der Länge 5 cm und der Höhe 6 mm wieder. Die Bilder stammen aus verschiedenen Zyklen.

Figure 2:  
*Planar LIF-signal out of the engine (single-shots at the crank angles indicated). Note the change of scale at  $+2^\circ\text{CA}$ . The images represent a 5 cm wide and 6 mm high region. Images are from different cycles.*

5 cm and a width of 6 mm, centered in the engine. The laser-sheet enters from the right. The images have been corrected by absorption effects and have been low-pass filtered using a gaussian mask, with a width of 3 pixels. The numbers under the crank-angle label refer to the upper and lower limits (in units of gray-value-counts of the digital camera) of the grayscale, black representing 0 counts and white 2500 or 1000 counts, respectively.

Bemerkenswert ist, dass selbst nachdem das Aceton an einigen Stellen vollständig verbraucht ist ( $2^\circ\text{KW}$  nOT) sehr weiche Gradienten vorherrschen, und die Varianz des LIF-Signales recht gering bleibt.

Noch deutlicher tritt dieser Umstand bei der Betrachtung der zeitlichen Entwicklung der pdf des LIF-Signals zutage. Diese ist in [Abbildung 3](#) dargestellt. Wie zu sehen ist, verschiebt sich die pdf zunächst nur zu niedrigeren Werten, ohne ihre Form und Breite wesentlich zu ändern. Von  $-6^\circ$  zu  $+2^\circ\text{KW}$  wird sie sogar eher etwas schmaler.

Dies ist auf eine kleine Varianz des Mischungsverhältnisses zurückzuführen, das eine geringe örtliche Variation der Temperatur und damit der Geschwindigkeit der chemischen Reaktionen bedingt. Bei einer hohen Varianz des Mischungsverhältnisses und der Temperatur würden die heißen Bereiche lange vor den kühleren zünden und ihre Verbrennung wäre schon weit fortgeschritten (vollständiger Aceton-Verbrauch), bevor die kühleren Volumina merklich mit der chemi-

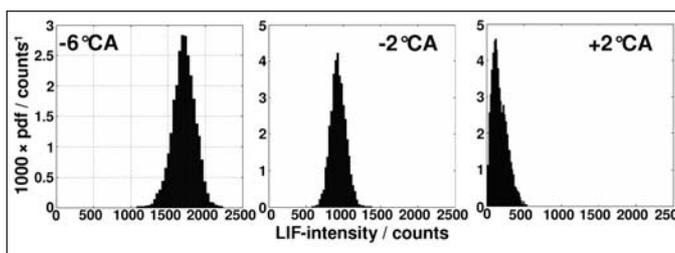


Abbildung 3:  
Beispielhafte gemessene Entwicklung der pdf der LIF-Intensität mit dem Kurbelwinkel.

Figure 3:  
*Development of the pdf of the LIF-Intensity with crank angle.*

Between  $-6^\circ\text{CA}$  and  $-2^\circ\text{CA}$ , the pressure variation in the combustion chamber is very small; at  $+2^\circ\text{CA}$ , there is only a modest pressure increase. The process observed here is therefore not the (strongly exothermic) combustion, but the decomposition of acetone before the start of ignition, which is an only weakly exothermic (or even endothermic) process [12]. Especially, the spectroscopical conditions (pressure, temperature) are approximately equal in the images shown above, so that the image intensities may be interpreted (and compared) as acetone-concentrations.

Remarkably, even when acetone has disappeared completely (below the detection limit), ( $+2^\circ\text{CA}$ ), there are still smooth gradients persisting, and the variance of the LIF-signal is still quite small.

This becomes clearer when the development of the pdf of the LIF-signals with varying crank angle is considered, as shown in [Figure 3](#). It is observed that the pdf is "shifted" to smaller values with increasing crank angles, without changing its shape or variance; the variance is even slightly decreasing from  $-6^\circ$  to  $+2^\circ\text{CA}$ .

The reason for this behavior is that the variance of the degree of mixing between exhaust gas and fresh gas is quite small, leading to a small variance of the temperature and, therefore, also to a small variance of the velocity of chemical reactions. In the presence of a high variance of the degree of mixing, the warmer regions would ignite long before the cooler ones, and their combustion would typically be progressed quite far, before the cooler regions start reacting (consuming acetone).



schen Reaktion (Abbau von Aceton) beginnen. Dies würde eine rasche Verbreiterung der pdf, die zu gewissen Zeitpunkten bimodal werden kann, ergeben.

## 4.2 Simulationen

Für ein Ensemble aus Reaktoren lassen sich als charakteristische Größen der Ensemble-gemittelte Mischungsgrad und die Standardabweichung des Mischungsgrades  $\xi'$ , definieren. (Die Standardabweichung ist die Quadratwurzel der Varianz).

In Abbildung 4 ist das berechnete Verhalten des Reaktor-Ensembles (für  $T^{(f)}=450K$ ,  $T^{(a)}=600K$  bei UT) für verschiedene mittlere Mischungsgrade und verschwindende Standardabweichung  $\xi' = 0$  anhand der zeitlichen Entwicklung des Zylinderdrucks und dem Massebruch von Kohlenmonoxid (CO) gezeigt.  $\xi' = 0$  bedeutet, dass alle Reaktoren identische Mischungsgrade besitzen; die Zylinderladung ist also in diesem Fall ein räumlich homogenes Gemisch aus Frischgas und Abgas.

Für sehr große Mischungsgrade, entsprechend einem hohen Abgasanteil, kommt es nicht zur Zündung ( $\xi = 0.9$ ), obwohl die Anfangstemperatur für alle Reaktoren in diesem Fall recht hoch ist. Dies ist darauf zurückzuführen, dass bei der hohen Abgasmenge lediglich eine langsame Reaktion stattfindet. Für reines Frischgas ( $\xi = 0$ ) kommt es ebenfalls nicht zu einer Zündung, weil die Temperatur des Systems in diesem Fall zu gering ist.

Für Mischungsgrade zwischen diesen beiden Extremen kann es dagegen zu einer Zündung kommen. Der Zeitpunkt der Zündung kann in weiten Bereichen (ca. 180 °KW bis 195 °KW) durch relativ geringe Variation des mittleren Mischungsgrades beeinflusst werden. Allerdings weisen in diesem Fall die Druckkurven recht steile Anstiege auf, die zu einem klopfenden Verbrennungsmodus führen können. Bei weniger mageren Gemischen wird dieses Problem noch größer; bei sehr hohen oder sehr kleinen globalen Mischungsbrüchen treten außerdem beträchtliche CO-Emissionen auf. Dies ist im rechten Diagramm der Abbildung 4 gezeigt, in der der über alle Reaktoren gemittelte CO-Massenbruch  $w(CO)$  gezeigt ist.

*This would lead to a quick broadening of the pdf, which might even become bi-modal.*

## 4.2 Simulations

*For a reactor-ensemble, the ensemble mean of the degree of mixing, and the standard deviation of the degree of mixing  $\xi'$ , can be defined. (The standard deviation is the square root of the variance).*

*In Figure 4, the simulated behaviour of the reactor-ensemble (for  $T^{(f)}=450K$ ,  $T^{(a)}=600K$  at BDC) for different mean values of the degree of mixing and for vanishing standard deviation  $\xi' = 0$  is shown, by the temporal development of the cylinder pressure and the mass fraction of carbon monoxide (CO).  $\xi' = 0$  means that all reactors have identical degree of mixing; the cylinder load is, in this case, a spatially homogeneous mixture of fresh gas and exhaust gas.*

*For very high values of the degree of mixing,  $\xi$ , corresponding to a high amount of residual exhaust gas, there is no ignition, ( $\xi = 0.9$ ), even though the initial temperature of all reactors is quite high in this case.*

*This is due to the fact that with the high amount of residual exhaust gas, only a slow reaction occurs. For pure exhaust gas, ( $\xi = 0$ ), there is no ignition, too, since the temperature of the system is too low.*

*For values of  $\xi$  between those extremes, ignition can occur. The timing of auto-ignition can be influenced to a high degree (from approx. 180 CA to 195 °CA) by varying the mean value of  $\xi$  by relatively small amounts. However, the pressure traces in this case display steep slopes, possibly leading to a knocking combustion mode. With less lean mixtures, this problem becomes more pronounced.*

*With very high or very small mean values of the degree of mixing, considerable CO-emissions may result. This is shown in the right side of Figure 4, where the CO mass fraction  $w(CO)$  (averaged over all reactors) is shown.*

*As shown in Figure 5, "smoothing" the pressure increase can be achieved by increasing the variance of the degree of mixing. Due to the subsequent, tem-*

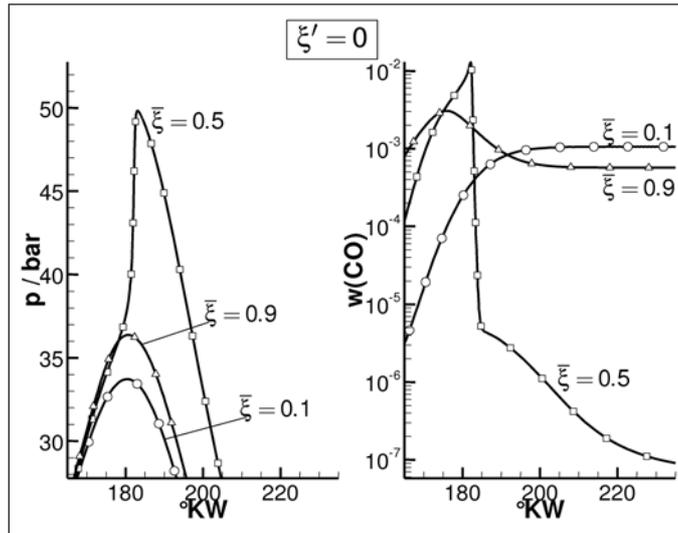


Abbildung 4:  
Berechnetes Verhalten des statistischen Modells für verschiedene globale Mischungsgrade  $\xi$  bei verschwindender Standardabweichung ( $\xi'=0$ ).  
Links: Druckverlauf, rechts: Massenbruch des Kohlenmonoxids.  
Figure 4:  
Simulated behavior of the statistical model for different mean values  $\xi$ , for vanishing standard deviation.  
Left: Temporal pressure trace. Right: Mass fraction of carbon monoxide



Für eine Spreizung des Druckanstiegs nach der Zündung kann, wie in [Abbildung 5](#) gezeigt, eine Erhöhung der Varianz herangezogen werden. Durch die sequentielle Zündung der einzelnen Reaktoren aufgrund der lokal verschiedenen Mischungsgrade ergibt sich ein sanfter Druckanstieg nach der Zündung. Ebenso wirkt sich eine Erhöhung der Varianz günstig auf die CO-Emissionen aus. Lediglich im Falle sehr hoher Varianz ( $\xi' = 0.3$ ) ergibt sich eine merkliche CO-Emission, weil hier einige Reaktoren mit sehr großen oder sehr kleinen Mischungsgraden nicht vollständig "durchreagieren".

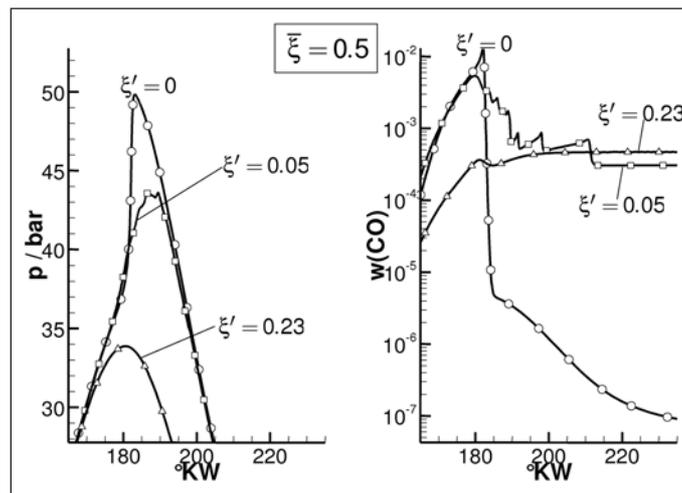


Abbildung 5:  
Berechnetes Verhalten des statistischen Modells für verschiedene Standardabweichungen  $\xi'$  für Mittelwert  $\xi=0.5$ .  
Links: Druckverlauf, rechts: Massenbruch des Kohlenmonoxids (über den Brennraum gemittelt).

Figure 5:  
Simulated behavior of the statistical model for different standard deviations  $\xi'$ , mean  $\xi=0.5$ .  
Left: temporal pressure trace. Right: Mass fraction of carbon monoxide, averaged over the whole ensemble.

porally distributed ignition events of the individual reactors (as effected by a larger variance of  $\xi$ ), a smooth pressure increase results.

Increasing the variance can also reduce CO emissions in some cases. Only in the case of a very high standard deviation, ( $\xi' = 0.3$ ), a high CO-Emission results, since some reactors with very small or very high values of  $\xi$  do not display complete reaction.

## 5 Zusammenfassung und Diskussion

In dieser Arbeit wurde ein einfaches numerisches Modell zur Berechnung von HCCI-Motoren mit Abgasrückhaltung vorgestellt und angewandt. Das Modell beruht auf einer statistischen Behandlung der Mischung von Abgas und Frischgas und kann als Multi-Zonenmodell betrachtet werden. Als wesentliche Vereinfachung werden Transportphänomene zwischen den Zonen vernachlässigt, Interaktion über die Wärmefreisetzung und den damit verbundenen Druckanstieg werden jedoch berücksichtigt. Diese Annahme ist gerechtfertigt, sofern die örtliche Variation des Mischungsgrades zwischen Abgas und Frischgas nicht zu groß ist und nicht zu steile Gradienten aufweist.

Es wird eine laserdiagnostische Methode vorgestellt und angewandt, die eine Abschätzung der örtlichen Variation des Mischungsgradfeldes erlaubt. Es zeigt sich, dass die Varianz des LIF-Signals vor der Zündung recht gering ist; es treten auch keine steilen Gradienten auf. Auch zu späteren Zeitpunkten ergibt sich stets ein sehr weicher örtlicher Übergang von hohem zu geringem LIF-Signal. Dies ist nicht mit einer flammenartigen Verbrennung vereinbar, sondern deutet auf eine sequentielle Zündung verschiedener Stellen im Brennraum nach Maßgabe der lokalen Bedingungen (Temperatur, chemische Zusammensetzung) hin.

Diese Beobachtung motiviert die Anwendung des oben beschriebenen statistischen Reaktormodells zur Beschreibung der Zündung und Verbrennung in dem Experimentalmotor.

## 5 Summary and discussion

In this work, a simple, efficient numerical model for the simulation of HCCI-engines with residual exhaust gas is introduced and applied. The model is based on statistical treatment of mixing between exhaust gas and fresh gas, and may be considered as a multi-zone model. As a significant simplification, transport phenomena between the zones are neglected. Only interzonal interactions resulting from temperature increase and the associated pressure increase due to chemical reactions are accounted for. This simplification can be justified, as long as the spatial variation of the degree of mixing between exhaust gas and fresh gas is not too large and does not display steep gradients.

A laser diagnostic method is introduced and applied, that allows estimating the instantaneous spatial variation of the degree of mixing. In an optically accessible singlecylinder two-stroke HCCI engine running on iso-octane, it is observed that the variance of the LIF-Signal immediately near the onset of self ignition is small; no steep (flame-like) gradients are observed. Also at later times in the engine cycle, there is a smooth transition from burned to unburned zones. This is unlike a flame-like combustion, but speaks in favour of a sequential, largely independent ignition of individual sites in the combustion chamber, according to the local conditions (temperature, chemical composition).

This observation motivates the application of the above described reactor-ensemble model for the description of HCCI engines with lean mixtures.



Die Anwendung der Technik in einem optisch zugänglichen Versuchsmotor zeigt, dass die typischen HCCI-Bedingungen (weitgehend homogenes Gemisch mit geringen Temperaturfluktuationen) den oben genannten Anforderungen entsprechen, so dass das Modell hier zu einer Beschreibung der Prozesse genutzt werden kann.

Die Anwendung des Modells auf eine Reihe von repräsentativen Testfällen zeigt, dass das Zünd- und Verbrennungsverhalten in einem HCCI-Motor durch die Mischung von Abgas und Frischgas stark beeinflusst werden. Bei gegebener Temperatur und Zusammensetzung von Abgas und Frischgas ist der Grad der Vermischung wesentlich, sowohl für die Zündung und den Verlauf der Verbrennung als auch für Abgasemissionen.

Es bietet sich die Möglichkeit, durch gezielte Variation des globalen (über den Brennraum gemittelten) Mischungsgrades  $\xi$  den Zeitpunkt der Zündung wirksam zu beeinflussen. Bei vorgegebenem globalem Mischungsbruch kann auch durch den Grad der Vermischung (die Varianz des Mischungsbruches) eine Steuerung des Verbrennungsverlaufs erreicht werden.

Diese Resultate wurden für in weiten Bereichen variierende Szenarien der Mischung zwischen Frischgas und Abgas gewonnen; es wurden keine Details über Brennraumgeometrie, Art der Gemischaufbereitung und Strömungsfeld für die Modellierung benutzt. Das Modell ist anwendbar in Fällen, wo kurz vor dem Einsetzen der Selbstzündung keine übermäßig steilen Gradienten des Mischungsgradfeldes vorliegen, unabhängig von der speziellen Geometrie des Motors. Ob diese Voraussetzung in einem gegebenen Motor erfüllt ist, kann oft abgeschätzt, oder aber durch Strömungssimulationen oder über optische Methoden, wie in dieser Arbeit demonstriert, nachgewiesen werden.

## 6 Literatur / References

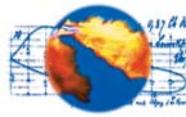
- [1] R. Schießl, O. Maiwald, K. König, U. Maas  
Laserdiagnostische Untersuchung und detaillierte numerische Modellierung der Zündung in einem HCCI Motor  
6. Internationale Symposium für Verbrennungsdiagnostik  
Baden-Baden  
2004
- [2] M. Kraft, P. Maigaard, F. Mauss, M. Christensen, B. Johansson  
Investigation of combustion emissions in a homogeneous charge compression injection engine: measurements and a new computational model  
Proceedings of the Combustion Institute  
Pittsburgh  
2000

*Application of the technique in an optically accessible engine shows that typical HCCI-conditions (nearly homogeneous mixture with small temperature fluctuations) fulfils the above mentioned conditions, so that the model may be used for a description of the processes.*

*Applying the model to a set of representative test cases shows that the ignition and combustion behavior in an HCCI-engine is strongly influenced by the degree of mixing between exhaust gas and fresh gas. At a given temperature and composition, the degree of mixing is essential, both for the ignition and for the exhaust gas emissions.*

*There is a possibility to effectively adjust the point in time where ignition occurs by variation of the mean (averaged over the combustion chamber) value of  $\xi$ . If the mean value of  $\xi$  is kept fixed, also the standard deviation  $\xi$  can be used to regulate the course of ignition and combustion.*

*These results were obtained for mixing scenarios which varied in a wide range of mean and standard deviation of the degree of mixing; no details of combustion chamber geometry, fuel injection strategy or in-cylinder flow field were used. The model is applicable in cases where no steep spatial gradients of the degree of mixing exist at the point where self-ignition occurs, independent of the particular geometry of the engine. Whether or not this condition is fulfilled in a given engine can be decided by analysis of the pressure trace, by flow simulations, or also by optical methods, as demonstrated in this work.*



- [3] S. M. Aceves, D. L. Flowers, C. K. Westbrook, J. R. Smith, W. Pitz, R. W. Dibble, M. Christensen, B. Johansson  
A multi-zone-model for prediction of HCCI combustion and emissions  
SAE Paper 2000-01-0327  
2000
- [4] A. Gogan, B. Sunden, H. Lehtiniemi, F. Mauss  
Stochastic model for the investigation of the Influence of Turbulent mixing on engine knock  
SAE 2004-01-2999  
2004
- [5] S. S. Ahmed, G. Moréac, T. Zeuch, F. Mauss  
Reduced Mechanism for the Oxidation of the Mixtures of n-Heptane and iso-Octane  
Proceedings of the European Combustion Meeting  
Louvain-la-Neuve, Belgium  
2005
- [6] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble  
Verbrennung  
Springer, 3. Auflage  
2001
- [7] U. Maas, J. Warnatz  
Ignition of Hydrogen-Oxygen Mixtures by Hot Spots and Its Relation to Engine Knock  
Proc. Joint Meeting of the German and Italian Sections of the Combustion Institute  
5.6  
1989
- [8] J. F. Griffiths, B. J. Whittaker  
Thermokinetic Interactions leading to knock during homogeneous charge compression ignition  
Combustion and Flame 131(4) 386-399  
2002
- [9] V. Sick, C. Schulz  
Tracer-LIF diagnostics: quantitative measurement of fuel concentration, temperature and fuel/air ratio in practical combustion systems  
Progress in Energy and Combustion Science 31, 75-121  
2005
- [10] R. Schießl, U. Maas  
Analysis of endgas temperature fluctuations in an SI engine using laser-induced fluorescence  
Combustion and Flame 133:19-27  
2003
- [11] M. C. Thurber, F. Grisch, B. J. Kirby, M. Votsmeier, R. K. Hanson  
Measurements and modelling of acetone laser-induced fluorescence with implications for temperature imaging diagnostics  
Applied Optics 37:4963-4968  
1998
- [12] R. Schießl, P. Pixner, A. Dreizler, U. Maas  
Formaldehyde formation in the endgas of Otto engines: Numerical simulation and quantitative concentration measurements  
Combustion Science and Technology 149:339-360  
1999