

Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Selbstzündung und Verbrennung in Ottomotoren

Zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor der Ingenieurwissenschaften
der Fakultät für Maschinenbau
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

genehmigte
Dissertation
von

Dipl.-Ing. Christoph Dahnz

Tag der mündlichen Prüfung:
Hauptreferent:
Korreferent:

6. Februar 2015
Prof. Dr.-Ing. Ulrich Spicher
Prof. Dr. rer. nat. habil. Ulrich Maas

**Forschungsberichte aus dem
Institut für Kolbenmaschinen
Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Hrsg.: Prof. Dr.-Ing. Ulrich Spicher
Prof. Dr. sc. techn. Thomas Koch**

Bibliographische Information der Deutschen Nationalbibliothek

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

© Copyright Logos Verlag Berlin 2015
Alle Rechte vorbehalten

ISBN 978-3-8325-4019-7
ISSN 1615-2980

Logos Verlag Berlin
Comeniushof, Gubener Straße 47
10243 Berlin
Tel.: +49 (0)30 42 85 10 90
Fax: +49 (0)30 42 85 10 92
INTERNET: <http://www.logos-verlag.de>

Vorwort der Herausgeber

Die Komplexität des verbrennungsmotorischen Antriebes ist seit über 100 Jahren Antrieb für kontinuierliche Aktivitäten im Bereich der Grundlagenforschung sowie der anwendungsorientierten Entwicklung. Die Kombination eines instationären thermodynamischen Prozesses mit einem chemisch reaktiven und hochturbulenten Gemisch, welches in intensiver Wechselwirkung mit einer Mehrphasenströmung steht, stellt den technologisch anspruchsvollsten Anwendungsfall dar. Gleichzeitig ist das Produkt des Verbrennungsmotors aufgrund seiner vielseitigen Einsetzbarkeit und zahlreicher Produktvorteile für sehr viele Anwendungen annähernd konkurrenzlos. Nun steht der Verbrennungsmotor insbesondere aufgrund der Abgasemissionen im Blickpunkt des öffentlichen Interesses. Vor diesem Hintergrund ist eine weitere und kontinuierliche Verbesserung der Produkteigenschaften des Verbrennungsmotors unabdingbar.

Am Institut für Kolbenmaschinen am Karlsruher Institut für Technologie wird deshalb intensiv an der Weiterentwicklung des Verbrennungsmotors geforscht. Übergeordnetes Ziel dieser Forschungsaktivitäten ist die Konzentration auf drei Entwicklungsschwerpunkte. Zum einen ist die weitere Reduzierung der Emissionen des Verbrennungsmotors, die bereits im Verlauf der letzten beiden Dekaden um circa zwei Größenordnungen reduziert werden konnten, aufzuführen. Zum zweiten ist die langfristige Umstellung der Kraftstoffe auf eine nachhaltige Basis Ziel der verbrennungsmotorischen Forschungsaktivitäten. Diese Aktivitäten fokussieren gleichzeitig auf eine weitere Wirkungsgradsteigerung des Verbrennungsmotors. Der dritte Entwicklungsschwerpunkt zielt auf eine Systemverbesserung. Motivation ist beispielsweise eine Kostenreduzierung, Systemvereinfachung oder Robustheitssteigerung von technischen Lösungen. Bei den meisten Fragestellungen wird aus dem Dreiklang aus Grundlagenexperiment, Prüfstandversuch und Simulation eine technische Lösung erarbeitet.

Die Arbeit an diesen Entwicklungsschwerpunkten bestimmt die Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten des Instituts. Hierbei ist eine gesunde Mischung aus grundlagenorientierter Forschung und anwendungsorientierter Entwicklungsarbeit der Schlüssel für ein erfolgreiches Wirken. In nationalen als auch internationalen Vorhaben sind wir bestrebt, einen wissenschaftlich wertvollen Beitrag zur erfolgreichen Weiterentwicklung des Verbrennungsmotors beizusteuern. Sowohl Industriekooperationen als auch öffentlich geförderte Forschungsaktivitäten sind hierbei die Grundlage guter universitärer Forschung.

Zur Diskussion der erarbeiteten Ergebnisse und Erkenntnisse dient diese Schriftenreihe, in der die Dissertationen des Instituts für Kolbenmaschinen verfasst sind. In dieser Sammlung sind somit die wesentlichen Ausarbeitungen des Instituts niedergeschrieben. Natürlich werden darüber hinaus auch Publikationen auf Konferenzen und in Fachzeitschriften veröffentlicht. Präsenz in der Fachwelt erarbeiten wir uns zudem durch die Einreichung von Erfindungsmeldungen und dem damit verknüpften Streben nach Patenten. Diese Aktivitäten sind jedoch erst das Resultat von vorgelagerter und erfolgreicher Grundlagenforschung.

Jeder Doktorand am Institut beschäftigt sich mit Fragestellungen von ausgeprägter gesellschaftlicher Relevanz. Insbesondere Nachhaltigkeit und Umweltschutz als Triebfedern des ingenieurwissenschaftlichen Handelns sind die Motivation unserer Aktivität. Gleichzeitig kann er nach Beendigung seiner Promotion mit einer sehr guten Ausbildung in der Industrie oder Forschungslandschaft wichtige Beiträge leisten.

In diesem Band der Schriftenreihe berichtet Herr Dahnz über experimentelle und numerische Untersuchungen zur Selbstzündung und Verbrennung in Ottomotoren. Im Fokus der Arbeit steht die Entwicklung eines integralen Verbrennungsmodells für die ottomotorische Verbrennung. Das Modell, das im ersten Teil der Arbeit vorgestellt wird, umfasst Teilmodelle für reguläre Flammenfrontverbrennung sowie für homogene Selbstzündung.

Im zweiten Teil der Arbeit werden verschiedene Anwendungsbeispiele für das Verbrennungsmodell behandelt. Dabei werden die Ergebnisse von Simulationsrechnungen jeweils anhand von Messdaten bewertet. Die reguläre Flammenfrontverbrennung wird anhand von gemessenen Zylinderdruckverläufen und Kameraaufnahmen validiert. Als Anwendungsbeispiel für das Selbstzündungsmodell wird die HCCI-Verbrennung untersucht. Zur Validierung werden hier die berechneten Zündorte mit einer optisch ermittelten Zündortverteilung verglichen. Neben diesen Fällen mit reiner Flammenfrontverbrennung und reiner Selbstzündung wird außerdem die Vorentflammung als komplexerer Anwendungsfall untersucht. Die Untersuchungen zu diesem Phänomen umfassen eine systematische Analyse der möglichen Auslösemechanismen sowie eine Bewertung dieser Mechanismen. Es wird ein Ansatz vorgestellt, mit dem sich auf Grundlage des vorgestellten Verbrennungsmodells die Vorentflammungsneigung unterschiedlicher Motorkonzepte und Betriebsstrategien vergleichen lässt.

Karlsruhe, im Juni 2015

Prof. Dr.-Ing. Ulrich Spicher
Prof. Dr. sc. techn. Thomas Koch

Vorwort des Autors

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Kolbenmaschinen des Karlsruher Instituts für Technologie.

Mein besonderer Dank gilt dem ehemaligen Leiter des Instituts, Herrn Prof. Dr.-Ing. Ulrich Spicher, für das vertrauensvolle Verhältnis bei der Betreuung dieser Arbeit und die große Freiheit bei deren Durchführung und Gestaltung. Herrn Prof. Dr. rer. nat. Ulrich Maas danke ich für sein Interesse an meiner Arbeit, die Übernahme des Korreferats und die gute Zusammenarbeit in unterschiedlichen Projekten. Prof. Dr. sc. techn. Thomas Koch danke ich herzlich dafür, dass er mir die Fortführung meiner Arbeiten am Institut für Kolbenmaschinen ermöglicht hat.

Allen Mitarbeitern des Instituts danke ich für die gute Zusammenarbeit und das freundschaftliche Arbeitsklima. Ohne die große Hilfsbereitschaft zahlreicher Kollegen wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Thomas Heidenreich danke ich für seine große Unterstützung bei der Einarbeitung in die CFD-Simulation zu Beginn meiner Tätigkeit am Institut. Für seine unermüdliche Hilfe bei der Durchführung der optischen Untersuchungen bedanke ich mich bei Jürgen Pfeil. Bei den Kollegen vom Institut für Technische Thermodynamik bedanke ich mich für die gute Zusammenarbeit in mehreren Forschungsprojekten. Insbesondere die zahlreichen Diskussionen mit Robert Schießl haben mir wertvolle Denkanstöße und Anregungen geliefert.

Allen Mitarbeitern aus Vormontage, mechanischer Fertigung und elektrischer Werkstatt, die während meiner Prüfstandszeiten Motor, Prüfstand und Messtechnik lauffähig gehalten haben, danke ich für ihren Beitrag zum Gelingen der Messungen, ebenso den Abgasmesstechnikern. Michael Busch danke ich dafür, dass er jederzeit ein offenes Ohr für meine Fragen zu Recherausstattung und Software hatte und sich auch für Sonderwünsche kurzfristig Zeit genommen hat.

Ich danke allen Kollegen, mit denen ich im Laufe meiner Zeit am Institut das Büro teilen durfte, für die angenehme Arbeitsatmosphäre, die fachlichen und nichtfachlichen Schreibtischgespräche und die vielen Feierabendaktivitäten. Den Teilnehmern der IFKM-Fahrradrunde danke ich dafür, dass sie mich neben den Abenden im Kap zu einem gesünderen Ausgleichsprogramm zur Büroarbeit motiviert haben. Bei den Mitstreitern aus dem Sonderforschungsbereich 606 „Instationäre Verbrennung“ bedanke ich mich für die unterhaltsamen Klausurtagungen.

Besonderer Dank gilt schließlich meiner Familie. Meinen Eltern danke ich für ihre Unterstützung und ihr Vertrauen in meinen Weg, Melanie Syha für ihre Geduld, ihre Unterstützung und ihre motivierenden Worte zur rechten Zeit.

Karlsruhe, im Juni 2015

Christoph Dahnz

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	IX
1 Einleitung	1
2 Grundlagen	7
2.1 Turbulente Vormischverbrennung	7
2.1.1 Laminare Flammen	8
2.1.2 Einfluss der Turbulenz	9
2.2 Homogene Selbstzündung höherer Kohlenwasserstoffe	15
2.2.1 Elementarreaktionen	15
2.2.2 Reaktionsmechanismen	16
2.2.3 Radikalkettenreaktionen	16
2.3 Selbstzündung in Ottomotoren	22
2.3.1 Klopfen	23
2.3.2 Glühzündung	24
2.3.3 Vorentflammung	25
2.3.4 Homogene Kompressionszündung	26
3 Untersuchungs- und Analysemethoden	29
3.1 Versuchsträger	29
3.1.1 Versuchsmotor im HCCI-Betrieb	29
3.1.2 Versuchsmotor für Vorentflammungs-Untersuchungen	31
3.2 Messtechnik	32
3.2.1 Standardmesstechnik	32
3.2.2 Sondermesstechnik	33
3.3 Simulationsmodelle der Versuchsträger	37
4 Numerische Modellierung der Verbrennung	41
4.1 Stoffmodell	41
4.2 Übergeordnetes Verbrennungsmodell	42
4.3 Fortschrittsvariablenmodell	43
4.3.1 Modellierung	43
4.3.2 Implementierung	44

4.4	Flammenmodell	52
4.4.1	Modellierung	52
4.4.2	Implementierung	53
4.5	Eingangsdaten für den Einsatz des Modells	56
5	Validierung	57
5.1	Integration	57
5.2	Zündverzugszeit	61
6	Anwendungsbeispiele	65
6.1	Reguläre ottomotorische Verbrennung	65
6.1.1	Betriebspunktauswahl	65
6.1.2	Abstimmung des Simulationsmodells	66
6.1.3	Ergebnisse	67
6.2	HCCI-Verbrennung	69
6.2.1	Betriebspunktauswahl	70
6.2.2	Kraftstoffvergleich	75
6.2.3	Abstimmung des Einspritzmodells	76
6.2.4	Untersuchung der Zündortverteilung	79
6.3	Vorentflammung	81
6.3.1	Experimentelle Untersuchungen	81
6.3.2	Simulation	95
7	Zusammenfassung	107
	Literatur	111

Nomenklatur

Physikalische Größen

Formelzeichen	Einheit	Bezeichnung
α	$^{\circ}\text{KW}$	Kurbelwinkel
α_{AS}	$^{\circ}\text{KW}$	Schließzeit der Auslassventile
α_{EB}	$^{\circ}\text{KW}$	Einspritzbeginn
α_{ES}	$^{\circ}\text{KW}$	Schließzeit der Einlassventile
α_{H50}	$^{\circ}\text{KW}$	Verbrennungsschwerpunktlage
α_{Z}	$^{\circ}\text{KW}$	Zündwinkel
Γ	—	Ignition Delay Fraction
ε	m^2/s^3	Dissipationsrate der Turbulenz
ε	—	Verdichtungsverhältnis
η	m	Kolmogorov-Längenmaß
η	—	Ersatzgröße für Kraftstoffmassenbruch
κ	—	Isentropenexponent
λ	—	Verbrennungsluftverhältnis
$\lambda_{\text{äq}}$	—	äquivalentes Verbrennungsluftverhältnis
λ_{F}	W/mK	Wärmeleitfähigkeit in der inneren Schicht der Flamme
λ_{H}	—	Hilfs-Verbrennungsluftverhältnis
ν	m^2/s	kinematische Viskosität
ν_{F}	m^2/s	kinematische Viskosität in der inneren Schicht der Flamme
ξ	—	normierter Kraftstoffmassenbruch
ξ_{St}	—	normierter Kraftstoffmassenbruch, stöchiometrische Bedingungen
Ξ	—	Faltungparameter
Ξ_{eq}	—	Faltungparameter im Gleichgewicht
ρ	kg/m^3	Dichte
ρ_{F}	kg/m^3	Dichte der inneren Schicht der Flamme
ρ_{uv}	kg/m^3	Dichte des unverbrannten Gemischs
ρ_{v}	kg/m^3	Dichte des verbrannten Gemischs
τ	s	turbulente Zeitskala
τ	s	Zündverzugszeit
τ_{int}	s	integrale Zündverzugszeit

Formelzeichen	Einheit	Bezeichnung
χ	–	Fortschrittsvariable
a	m^2/s	Temperaturleitfähigkeit
A	<i>var.</i>	präexponentieller Faktor
A'	<i>var.</i>	präexponentieller Faktor
A	m^2	Flammenfläche
A_L	m^2	laminare Flammenfläche
A_T	m^2	turbulente Flammenfläche
b	–	Regressvariable
b_i	g/kWh	spezifischer Kraftstoffverbrauch
$c_{p,F}$	$\text{J}/\text{kg K}$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck in der inneren Schicht der Flamme
c_p	$\text{J}/\text{kg K}$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
c_v	$\text{J}/\text{kg K}$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen
C_i	–	Skalierungsfaktor für Größe i
CO_i	g/kWh	spezifische Kohlenmonoxidemissionen
D	m^2/s	molekularer Diffusionskoeffizient
D_b	–	Diffusionskoeffizient der Regressvariable b
D_T	m^2/s	turbulenter Diffusionskoeffizient
E_a	J/mol	Aktivierungsenergie
h_V	m	Ventilhub
h_i	J/kg	spezifische Enthalpie für Spezies i
H	J/kg	spezifische Gesamtenthalpie
HC_i	g/kWh	spezifische Emissionen an unverbrannten Kohlenwasserstoffen
I	–	Livengood-Wu-Integral
k	m^2/s^2	turbulente kinetische Energie
k	<i>var.</i>	Geschwindigkeitskoeffizient
K	–	Streckungsfaktor
l	m	integrales Längenmaß
l_{ein}	m	Strahleindringtiefe
l_F	m	Dicke der Flamme
l_δ	m	Dicke der inneren Schicht der Flamme
L_{St}	–	Stöchiometrischer Luftbedarf
M_i	kg/mol	molare Masse für Spezies i
n	$1/\text{min}$	Drehzahl
$\text{NO}_{x,i}$	g/kWh	spezifische Stickoxidemissionen
p	bar, Pa	Druck
p_0	bar	Anfangsdruck
p_K	bar	Kraftstoffdruck
p_{DK}	bar	Kammerdruck in der Druckkammer

Formelzeichen	Einheit	Bezeichnung
p_L	bar	Ladedruck
p_{me}	bar	effektiver Mitteldruck
p_{mi}	bar	indizierter Mitteldruck
p_U	bar	Umgebungsdruck
p_{Zyl}	bar	Zylinderdruck
r	m	Radius des Flammenkerns
R	l/mol K	Gaskonstante
s	l/K	Entropie
s_0	l/K	Anfangsentropie
s_{eq}	l/K	Gleichgewichtsentropie
s_L	m/s	laminare Flammengeschwindigkeit
s_T	m/s	turbulente Flammengeschwindigkeit
t	s	Zeit
t_η	s	Kolmogorov-Zeitskala
t_c	s	chemische Zeitskala
t_F	s	Flammenzeitskala
T	K, °C	Temperatur
T_0	K	Anfangstemperatur
T_a	K	Aktivierungstemperatur
T_{ad}	K	adiabate Flammentemperatur
T_{DK}	°C	Gastemperatur in der Druckkammer
T_F	K	Temperatur in der inneren Schicht der Flamme
T_K	°C	Kraftstofftemperatur
T_L	°C	Lufttemperatur
v_{uv}	m/s	Strömungsgeschwindigkeit im unverbrannten Gemisch
v_v	m/s	Strömungsgeschwindigkeit im verbrannten Gemisch
v'	m/s	Turbulenzintensität
V	l, m ³	Brenraumvolumen
v_η	m/s	Kolmogorov-Geschwindigkeit
x	m	Ortskoordinate
x	%	relative Häufigkeit
x_{fl}	Vol.-%	flüssiger Anteil
x_{VE}	1/10 000 Zyklen	Vorentflammungshäufigkeit
x_{verd}	Vol.-%	verdampfter Anteil
y_i	–	Massenbruch für Spezies i
y_{AGR}	–	Abgasmassenbruch
y_K	–	Kraftstoffmassenbruch
y_{FG}	–	Frischgemischmassenbruch
y_L	–	Luftmassenbruch

Vektoren und Matrizen

Formelzeichen	Bezeichnung
α	Reaktionsmannigfaltigkeit
φ_{ideal}	vollständiger Zustandsvektor (ideal)
φ	vollständiger Zustandsvektor (CFD)
ψ	reduzierter Zustandsvektor
\mathbf{c}	Vektor der Nebenbedingungen
$\mathbf{J}_{\alpha}^{\psi}$	Jacobimatrix von α bezüglich ψ
$\mathbf{J}_{\mathbf{c}}^{\varphi}$	Jacobimatrix von \mathbf{c} bezüglich φ
\mathbf{P}	Projektionsmatrix
\mathbf{P}_{orth}	orthogonale Projektionsmatrix
\mathbf{P}_{obl}	Projektionsmatrix mit Nebenbedingungen
\mathbf{v}	Geschwindigkeit
\mathbf{y}	Vektor der Speziesmassenbrüche

Dimensionslose Kennzahlen

Formelzeichen	Bezeichnung
Da	Damköhler-Zahl
Ka	Karlovitz-Zahl
Ka_{δ}	Karlovitz-Zahl bezogen auf die innere Schicht der Flamme
Le	Lewis-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Pr_{F}	Prandtl-Zahl in der inneren Schicht der Flamme
Re	Reynolds-Zahl
Re_{T}	turbulente Reynolds-Zahl
Sc	Schmidt-Zahl

Abkürzungen

Abkürzung	Bezeichnung
AV	Auslassventil
BDE	Benzindirekteinspritzung
CFD	Computational Fluid Dynamics
EV	Einlassventil
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
REDIM	Reaction Diffusion Manifold
ROZ	Research-Oktanzahl
TRF	Toluene Reference Fuel
ZOT	Oberer Totpunkt (Zündung)

1 Einleitung

Drosselverluste im Teillastbetrieb sind die größte Herausforderung bei der Reduzierung des Kraftstoffverbrauchs von Ottomotoren. Abbildung 1.1 zeigt exemplarisch das p - V -Diagramm eines Ottomotors im gedrosselten Betrieb. Deutlich ist zu erkennen, wie der Zylinderdruck während des Saugtakts auf ein Niveau weit unterhalb des Umgebungsdrucks absinkt. Die daraus resultierende große Ladungswechselarbeit leistet einen negativen Beitrag zur Nettoarbeit des Motors und muss durch positive Arbeit in der Hochdruckschleife des Motorprozesses kompensiert werden. Gelingt es, die Ladungswechselarbeit zu reduzieren, kann auch die Hoch-

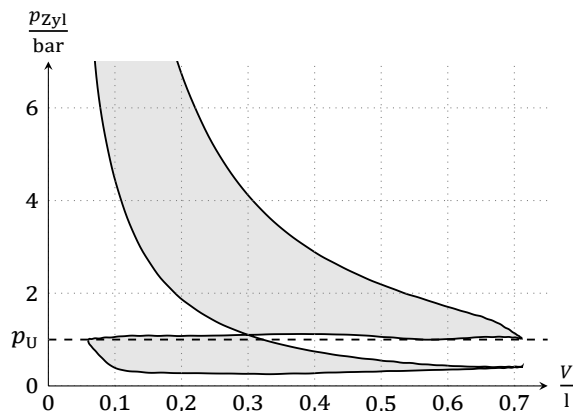


Abbildung 1.1: p - V -Diagramm eines konventionellen Ottomotors im Teillastbetrieb (Ausschnitt). $p_{mi} = 2,7$ bar.

druckarbeit reduziert werden, was mit einer Senkung des Kraftstoffverbrauchs gleichgesetzt werden kann.

Zur Vermeidung der Drosselverluste wurden zahlreiche Strategien entwickelt. Diese lassen sich in drei Gruppen unterteilen: Magerstrategien, Strategien mit vollvariablem Ventiltrieb und Strategien mit Betriebspunktverschiebung.

Bei den Magerstrategien werden die Drosselverluste reduziert, indem der Motor entdrosselt betrieben wird. Die Last wird dann – ähnlich wie bei Dieselmotoren – durch eine Anpassung der eingespritzten Kraftstoffmenge geregelt. Für kleine Lasten ergeben sich somit sehr magere Gemischzusammensetzungen, was für den ottomotorischen Betrieb problematisch ist, da sich nur Gemische innerhalb von en-

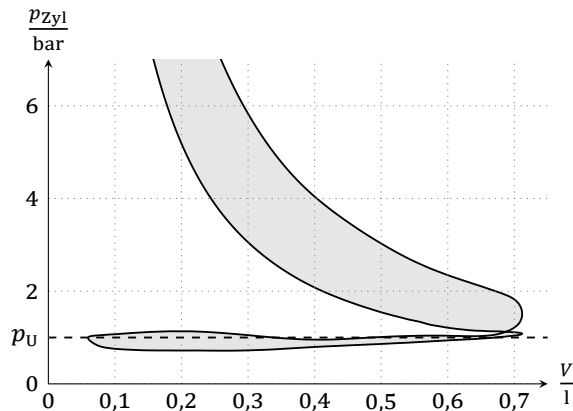


Abbildung 1.2: *p-V-Diagramm eines Ottomotors mit Schichtbrennverfahren in der Teillast (Ausschnitt). $p_{\text{mi}} = 3,0$ bar.*

gen Zündgrenzen um die Stöchiometrie zuverlässig entflammen lassen. Lösen lässt sich dieses Problem, indem der Kraftstoff des global mageren Gemischs räumlich inhomogen im Brennraum platziert wird. Dies lässt sich durch die strahlgeführte Benzindirekteinspritzung realisieren. Abbildung 1.2 zeigt den Ladungswechsel in einem vollständig entdrosselten Teillastpunkt bei einem Motor mit Schichtladung.

Neben dem reinen Schichtbetrieb wurden auch Strategien umgesetzt, bei denen zunächst ein homogenes mageres Grundgemisch im gesamten Brennraum erzeugt wird, das gezündet werden kann, nachdem in der unmittelbaren Umgebung der Zündkerze durch eine zündungsnahe Einspritzung ein zündfähiges Gemisch erzeugt wurde [Wal10].

Des Weiteren lässt sich das Problem der Entflammbarkeit magerer Gemische auch dadurch lösen, dass zur Zündung keine Zündkerze verwendet wird, sondern Selbstzündung. Auf diese Weise lassen sich auch sehr magerer Gemische zur Reaktion bringen. Neben der Abmagerung durch Verdünnung mit Frischluft besteht die Möglichkeit, das Gemisch zu verdünnen, indem heißes Abgas im Brennraum zurückgehalten wird, beispielsweise durch negative Ventilüberschneidung [Gün04]. Die Verdünnung mit Abgas hat den Vorteil, dass ohne zusätzlichen Aufwand hohe Mischungstemperaturen erzielt werden können. Dies erleichtert das Erreichen der für die Selbstzündung erforderlichen hohen Temperaturen bei Kompressionsende. Abbildung 1.3 zeigt das *p-V*-Diagramm des Ladungswechsels bei einem solchen Brennverfahren.

Bei der Nutzung eines vollvariablen Ventiltriebs können die Drosselverluste in der Teillast erheblich reduziert werden, indem die Ventilsteuerzeiten auf geeignete Weise angepasst werden. Dabei kann entweder durch extrem spätes Schließen der

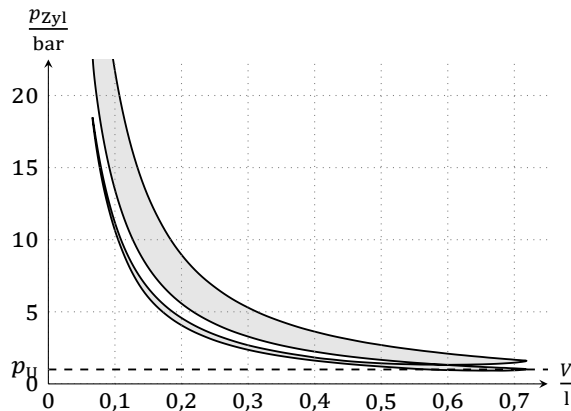


Abbildung 1.3: p - V -Diagramm eines Ottomotors im HCCI-Betrieb mit negativer Ventilüberschneidung (Ausschnitt). $p_{\text{mi}} = 2,0$ bar.

Einlassventile ein Teil der Zylinderfüllung ins Saugrohr zurückgeschoben werden (*Atkinson-Verfahren*) oder durch frühes Schließen der Einlassventile der Ansaugvorgang frühzeitig beendet werden (*Miller-Verfahren*) [Fli01]. Auf diese Weise kann die Zylinderfüllung ohne Drosselung angepasst werden, so dass der Motor auch bei niedrigen Lasten mit stöchiometrischem Gemisch betrieben werden kann. Beide Strategien sind als p - V -Diagramm in schematischer Darstellung in Abbildung 1.4 zu sehen.

Anstatt durch Reduktion der Drosselverluste im Teillastbetrieb kann die Effizienz des Verbrennungsmotors auch gesteigert werden, indem der Motorbetrieb bei Teillast ganz vermieden wird. Eine derartige Betriebspunktverschiebung kann realisiert werden, indem Motoren mit kleinerem Hubvolumen eingesetzt werden, die folglich spezifisch höher belastet werden. Diese Strategie wird als *Downsizing* bezeichnet [Gol05].

Die Verkleinerung des Hubvolumens hat natürlich zur Folge, dass auch das maximal erzielbare Drehmoment und – sofern der zulässige Drehzahlbereich nicht erweitert wird – die Nennleistung abnimmt. Um diesen Nachteil zu kompensieren, werden Downsizing-Motoren aufgeladen. Auf diese Weise ist es möglich, die Verbrauchsvorteile im Teillastbetrieb zu nutzen und gleichzeitig die Möglichkeit des Betriebs bei höheren Lasten zu erhalten.

Alle genannten Verfahren haben einen mehr oder weniger großen Einfluss auf den Ablauf der Verbrennung und müssen somit bei der Entwicklung aktueller und zukünftiger Verbrennungsmodelle für die ottomotorische Verbrennung berücksichtigt werden.

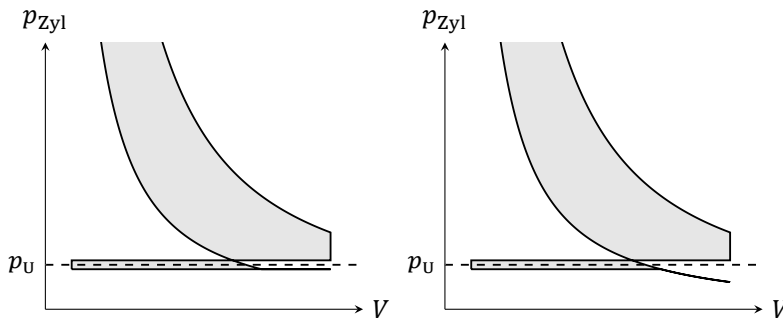


Abbildung 1.4: Ungedrosselter Teillastbetrieb bei vollvariablem Ventiltrieb: Einlass schließt spät (Atkinson, links), Einlass schließt früh (Miller, rechts). Schematische Darstellung.

Den schwächsten Einfluss auf die Verbrennung hat unter den genannten Strategien der Einsatz von vollvariablen Ventiltrieben. Wie beim konventionellen Ottomotor findet auch hier eine funkengezündete Flammenfrontverbrennung in homogenem stöchiometrischen Gemisch statt. Einzig der Einfluss der geänderten Brennrauminnenströmung hat einen Einfluss auf das Brennverfahren. Das frühe Schließen des Einlassventils beim Miller-Verfahren bewirkt, dass sich nur eine schwache Brennrauminnenströmung ausbildet. Dies hat ein geringes Turbulenzniveau zu Beginn der Verbrennung zur Folge [Sch07], das wiederum für thermodynamisch ungünstige lange Brenndauern verantwortlich ist [Het12]. Im Hinblick auf die Berechnung während der Brennverfahrensentwicklung stellt dieser Einfluss jedoch kein Problem dar, da die verfügbaren Verbrennungsmodelle den Einfluss der Turbulenzintensität auf die Flammgeschwindigkeit bereits berücksichtigen.

Sowohl die Strategie des Downsizing als auch die unterschiedlichen Ausprägungen der Magerstrategien bergen hingegen neue Herausforderungen für die Verbrennungsmodellierung.

Die Verbrennung bei Ladungsschichtung weist gegenüber der Verbrennung unter homogen vorgemischten Bedingungen einige Besonderheiten auf. Da im Brennraum ein kontinuierlicher Übergang von sehr fetten zu sehr mageren Bedingungen stattfindet, hat auch die Flamme eine besondere Struktur. Es treten gleichzeitig Vormischflammen im fetten und im mageren Bereich und eine Diffusionsflamme im stöchiometrischen Bereich dazwischen auf [Pet97a]. Diese Form der Verbrennung wird als Tripelflamme bezeichnet.

Bestehende Modelle können zwar mit geringem Aufwand erweitert werden, um die Verbrennung unter geschichteten Bedingungen abzudecken, in den allgemein verfügbaren Modellen ist dieser Schritt jedoch noch nicht vollzogen [Mer11].

Für die Berechnung der Magerbrennverfahren auf Basis von homogener Selbstzündung sind die gängigen Modelle für die ottomotorische Verbrennung gänzlich ungeeignet. Der Verlauf der Verbrennung wird bei diesen Brennverfahren maßgeblich durch die Selbstzündung des Kraftstoff-Luft-Gemischs bestimmt. Diese wiederum ist von der Reaktionskinetik dominiert, die stark vom verwendeten Kraftstoff abhängt. Bisher existieren keine einfachen, allgemeingültigen Modelle zur Beschreibung der Selbstzündung und anschließenden Verbrennung.

Das Downsizing selbst ist unproblematisch im Hinblick auf die Simulation der Verbrennung. Wie bei konventionellen Ottomotoren auch findet in diesen Motoren eine reguläre, funkengezündete Flammenfrontverbrennung unter annähernd stöchiometrischen homogenen Bedingungen statt. Der höhere Ladedruck bei Vollast stellt kein Problem bei der Anwendung der gängigen Verbrennungsmodelle dar. Allerdings treten in diesen spezifisch hoch belasteten Motoren vermehrt Verbrennungsanomalien auf, die bei der Brennverfahrensentwicklung berücksichtigt werden müssen. Neben dem Klopfen wird hier der Vorentflammung besondere Bedeutung beigemessen. Dieses Phänomen, das auf der Selbstzündung des Gemischs noch vor der Funkenzündung beruht, ist bisher nur unzureichend verstanden.

Ein allgemeines Verbrennungsmodell für die Auslegung aktueller und künftiger Brennverfahren für Ottomotoren muss somit eine Fülle von Anforderungen erfüllen. Um die genannten Herausforderungen zu meistern, muss das Simulationsmodell in der Lage sein, die Verbrennung in Ottomotoren unter homogen und teilhomogen vorgemischten Bedingungen zu berechnen. Außerdem muss es Selbstzündung im unverbrannten Gemisch zuverlässig vorhersagen und die Übergänge zwischen beiden zulassen. Ein Übergang von der Selbstzündung zur Flammenfrontverbrennung kann beispielsweise bei der Vorentflammung oder unter Umständen auch bei der HCCI-Verbrennung auftreten. Beim Klopfen folgt die Selbstzündung auf die Flammenausbreitung.

Im Rahmen dieser Arbeit soll ein Beitrag zur Entwicklung eines solchen allgemeingültigen Verbrennungsmodells zur Einbindung in die dreidimensionale Strömungssimulation (3D-CFD) geleistet werden.

In den folgenden Abschnitten werden zunächst einige Grundlagen zur turbulenten Vormischverbrennung und zur Selbstzündung sowie zu Selbstzündphänomenen in der Motoranwendung zusammengefasst. Danach folgt eine Beschreibung der verwendeten Versuchsmotoren sowie der eingesetzten Messtechnik. Anschließend wird das implementierte integrale Verbrennungsmodell vorgestellt. Als Anwendungsbeispiele werden dann die reguläre Flammenausbreitung, die HCCI-Verbrennung und die Vorentflammung behandelt.

2 Grundlagen

Die Verbrennung ist ein hoch komplexer Prozess, der sich aus einer Vielzahl von physikalischen Effekten zusammensetzt. In erster Linie kann sie als eine Überlagerung von chemischer Kinetik und Wärme- und Stofftransport betrachtet werden. In vielen Anwendungen – so auch im Verbrennungsmotor – finden diese Prozesse zudem innerhalb eines turbulenten Strömungsfelds statt, in dem die Verteilung der Reaktanden sowie das Temperatur- und Druckfeld mehr oder weniger große Inhomogenitäten aufweisen. Abhängig vom gewählten Brennverfahren können diese Inhomogenitäten – wie etwa im Fall des Ottomotors mit Saugroheinspritzung – vergleichsweise schwach ausgeprägt sein, es können aber auch deutliche Stratifizierungseffekte auftreten, etwa bei der strahlgeführten Benzindirekteinspritzung. Im Extremfall später Kraftstoffeinspritzung kann die Verbrennung sogar maßgeblich durch Mehrphasigkeit bestimmt sein. Dies ist beispielsweise bei der Dieselvebrennung der Fall.

Im Rahmen dieser Arbeit können daher nur einzelne Grenzfälle betrachtet werden, die von besonderer Bedeutung für die Vorgänge in Ottomotoren sind: die Flammenfrontverbrennung unter vorgemischten Bedingungen und die homogene Selbstzündung.

2.1 Turbulente Vormischverbrennung

Unter den Bedingungen, die üblicherweise in Ottomotoren herrschen, stellt die Vormischverbrennung den wichtigsten Sonderfall der Verbrennung dar. Die Reaktion verläuft in diesem Fall fast ausschließlich innerhalb einer dünnen, selbsterhaltenden Reaktionszone, die sich relativ zum umgebenden Gemisch fortbewegt [Tur00].

Auch wenn laminare Flammen unter den Bedingungen, wie sie in Verbrennungsmotoren vorzufinden sind, nicht vorkommen, liefert ihre Beschreibung doch eine unverzichtbare Grundlage zur Betrachtung von turbulenten Flammen. In den folgenden Abschnitten werden daher zunächst grundlegende Eigenschaften von laminaren Flammen vorgestellt, bevor die Betrachtung auf turbulente Flammen ausgeweitet wird.

2.1.1 Laminare Flammen

Basis für die Betrachtung der Flammenfrontverbrennung ist die laminare Flamme. Sie ist charakterisiert durch einen steilen Temperaturanstieg von der unverbrannten zur verbrannten Seite hin, einhergehend mit der stofflichen Umwandlung der Reaktionsedukte in die -produkte. Die Struktur einer solchen Flamme ist in Abbildung 2.1 am Beispiel einer Methanflamme für vorgemischte Magerverbrennung zu sehen. Ausgehend von der unverbrannten Seite besteht die Flamme aus drei

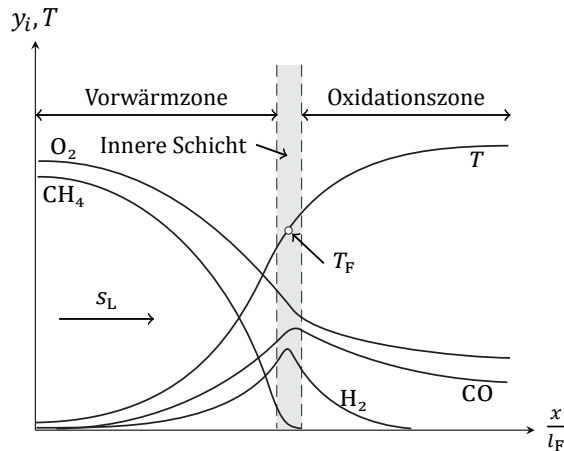


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der Struktur einer vorgemischten Methanflamme [Pet97b].

Bereichen: der Vorwärmzone, der inneren Schicht und der Oxidationszone [Zel38]. In der chemisch inerten Vorwärmzone wird das unverbrannte Gemisch durch Wärmeleitung aufgeheizt. Die Gradienten in den Spezieskonzentrationen in dieser Zone kommen dadurch zustande, dass Verbrennungsprodukte in die innere Schicht und Verbrennungserzeugnisse aus der inneren Schicht heraus diffundieren. Die geometrische Ausdehnung der Vorwärmzone liegt in der Größenordnung der Flammendicke l_F .

An die Vorwärmzone schließt die deutlich dünnere innere Schicht an, in der in schnellen zweimolekularen Reaktionen Kraftstoffmoleküle angegriffen und Zwischenprodukte gebildet werden. Die Dicke der inneren Schicht l_δ lässt sich als Bruchteil der Flammendicke l_F angeben. Der Skalierungsfaktor δ liegt in der Größenordnung von 0,1.

$$l_\delta = \delta l_F . \quad (2.1)$$

Hinter der inneren Schicht liegt die Oxidationszone, in der die Zwischenprodukte in vergleichsweise langsam ablaufenden Reaktionen zu den Endprodukten oxidiert werden. Von besonderer Bedeutung ist dabei die Bildung von CO_2 :



Eine charakteristische Größe zur Beschreibung der laminaren Vormischverbrennung ist die laminare Flammengeschwindigkeit s_L . Sie beschreibt die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Reaktionsfront in Normalenrichtung, relativ zum unverbrannten Gemisch. Die Flammengeschwindigkeit muss abgegrenzt werden von der Flammenfrontgeschwindigkeit. Diese gibt die Geschwindigkeit der Flamme in einem ortsfesten Koordinatensystem an und schließt daher neben der Flammengeschwindigkeit auch konvektive Strömungs- und Expansionseffekte mit ein, die aus dem Dichteunterschied zwischen unverbranntem und verbranntem Gemisch entstehen. Aus der Kontinuitätsbedingung folgt für die Strömungsgeschwindigkeiten an einer Flammenfront mit der Oberfläche A :

$$\rho_{uv}s_L A = \rho_{uv}v_{uv}A = \rho_v v_v A. \quad (2.2)$$

Der Index uv bezeichnet hier den unverbrannten Zustand, v den verbrannten. Mit ρ ist jeweils die Dichte im entsprechenden Bereich bezeichnet, mit v die Strömungsgeschwindigkeit.

Die laminare Flammengeschwindigkeit ist eine thermochemische Transporteigenschaft. Sie hängt für einen gegebenen Kraftstoff in erster Linie vom Luft-Kraftstoff-Verhältnis, der Temperatur im Unverbrannten und vom Druck ab. Sie kann gemessen werden, indem an einem flachen Brenner die Ausströmungsgeschwindigkeit so eingestellt wird, dass die Flamme gerade nicht abhebt.

2.1.2 Einfluss der Turbulenz

Betrachtet man den Einfluss von Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit, so ist eine Klassifizierung nach unterschiedlichen Längenskalen erforderlich.

Großskalige Turbulenz

Turbulente Wirbel, deren Abmessungen groß sind gegenüber der Dicke der laminaren Flamme, bewirken ausschließlich kinematische Wechselwirkungen zwischen Strömung und Flamme, also eine Deformation der Flammenfront. Abbildung 2.2 zeigt schematisch eine solche deformierte Flammenfront. Durch Anwendung der Kontinuitätsgleichung lässt sich aus dieser Betrachtung ein Ausdruck für die tur-

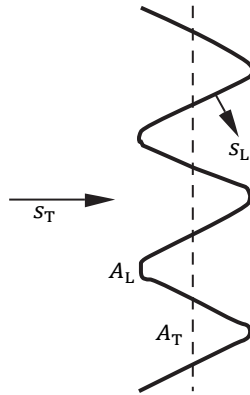


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung der Fortpflanzung einer turbulenten Flamme [War01].

bulente Flammengeschwindigkeit s_T in Abhängigkeit von der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L ableiten:

$$\dot{m} = \rho_u s_L A_L = \rho_u s_T A_T, \quad (2.3)$$

$$\frac{s_T}{s_L} = \frac{A_L}{A_T}. \quad (2.4)$$

A_L ist dabei die laminare, A_T die turbulente Flammenfläche, die der Projektion der laminaren Flammenfläche in die Normalenebene der Hauptausbreitungsrichtung der Flamme entspricht.

Aus der geometrischen Analogie zur Flamme eines Bunsenbrenners lässt sich zunächst ein einfacher Ansatz zur Berechnung der turbulenten Flammengeschwindigkeit s_T aus dem Schwankungsanteil der Strömungsgeschwindigkeit v' , der auch als Turbulenzintensität bezeichnet wird, herleiten [Dam40]:

$$s_T = s_L + v'; \quad \frac{s_T}{s_L} = 1 + \frac{v'}{s_L}. \quad (2.5)$$

Für größere Werte von v'/s_L gilt daher näherungsweise:

$$\frac{s_T}{s_L} \approx \frac{v'}{s_L}. \quad (2.6)$$

Allerdings ist dieser lineare Ansatz nur gültig, solange die Turbulenzintensität nicht zu groß ist [War01]. Messungen der Flammengeschwindigkeit in einer Verbrennungsbombe mit Turbulenzgeneratoren haben gezeigt, dass die turbulente Flammengeschwindigkeit bei zunehmender Turbulenzintensität ein Maximum erreicht und dann wieder abnimmt, bevor schließlich Verlöschungseffekte auftreten [Abd84].

Kleinskalige Turbulenz

Bei Turbulenz mit kleineren Längenskalen kommen andere Effekte zum Tragen als bei der oben beschriebenen großskaligen Turbulenz. Die turbulenten Wirbel sind hier so klein, dass sie den Transport zwischen Reaktionszone und unverbranntem Gas beeinflussen können. Die Flamme wird daher durch die Turbulenz nicht einfach deformiert, sondern in ihrer Struktur verändert.

Um diesen Effekt zu quantifizieren, schlug Damköhler eine Formulierung in Analogie zur laminaren Flammengeschwindigkeit vor [Dam40]:

$$s_L \propto \left(\frac{D}{t_c}\right)^{1/2}; \quad s_T \propto \left(\frac{D_T}{t_c}\right)^{1/2}. \quad (2.7)$$

Darin ist D die molekulare, D_T die turbulente Diffusivität und t_c die chemische Zeitskala. Unter der Voraussetzung, dass die chemische Zeitskala nicht von der Turbulenz beeinflusst wird, gilt dann:

$$\frac{s_T}{s_L} \propto \left(\frac{D_T}{D}\right)^{1/2}. \quad (2.8)$$

Die turbulente Diffusivität D_T ist proportional zum Produkt aus der Turbulenzintensität v' und der integralen Länge l , die laminare Diffusivität zum Produkt aus der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L und der Flammendicke l_F [Pet99]:

$$\frac{s_T}{s_L} \propto \left(\frac{v'l}{s_L l_F}\right)^{1/2}. \quad (2.9)$$

Der Vergleich der Gleichungen 2.9 und 2.6 zeigt, dass für kleinskalige Turbulenz das Verhältnis der Flammengeschwindigkeiten nicht nur vom Verhältnis der Turbulenzintensität zur laminaren Flammengeschwindigkeit, sondern auch vom Verhältnis l/l_F der Längenskalen von Turbulenz und Flamme abhängt.

Für extrem kleinskalige Turbulenz verliert jedoch auch der in Gleichung 2.9 angegebene Zusammenhang seine Gültigkeit, da die Annahme gleicher chemischer Zeitskalen für den laminaren und turbulenten Fall nicht mehr erfüllt ist. Sind die kleinsten Wirbel der Turbulenz (Kolmogorov-Längenskala) so klein, dass sie in die innere Schicht eindringen können, dann reißt die Flammenfront auf. Die Zeitskala der Reaktion wird dann durch die turbulente Mischung beeinflusst, Gleichung 2.8 ist nicht mehr gültig.

Verbrennungsregime bei turbulenter Vormischverbrennung

Anhand der in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen Zusammenhänge lassen sich unterschiedliche Verbrennungsregime unterscheiden. Entsprechend

den Zusammenhängen aus den Gleichungen 2.6 und 2.9 lassen sich diese in Abhängigkeit von v'/s_L und l/l_F in einem Diagramm darstellen [Pet99].

Um in dieser Darstellung, die als *Borghi-Diagramm* bezeichnet wird, Bereiche einteilen zu können, müssen jedoch zunächst einige charakteristische Kennzahlen eingeführt werden. Die Turbulenz kann durch zwei Kenngrößen beschrieben werden, die große Bedeutung in der numerischen Modellierung haben: die mittlere turbulente kinetische Energie \bar{k} und die mittlere Dissipationsrate $\bar{\varepsilon}$. Unter der Annahme isotroper Turbulenz lassen sich diese in Abhängigkeit von der Intensität v' und der integralen Länge l der Turbulenz angeben [Pet99]:

$$\bar{k} = \frac{3}{2}v'^2; \quad \bar{\varepsilon} = \frac{v'^3}{l}. \quad (2.10)$$

Außerdem lässt sich aus diesen Größen eine integrale Zeitskala τ für die großen, energiereichen Strukturen der Turbulenz berechnen:

$$\tau = \frac{l}{v'}. \quad (2.11)$$

Die kleinsten Strukturen, die auftreten, bevor die Turbulenz durch viskose Effekte in thermische Energie dissipiert, werden durch die Kolmogorov-Größen (η : Länge, t_η : Zeit, v_η : Geschwindigkeit) charakterisiert [Pet99]:

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\bar{\varepsilon}}\right)^{1/4}; \quad t_\eta = \left(\frac{\nu}{\bar{\varepsilon}}\right)^{1/2}; \quad v_\eta = (\nu\bar{\varepsilon})^{1/4}. \quad (2.12)$$

Für die Berechnung wird die kinematische Viskosität ν unmittelbar vor der inneren Reaktionsschicht verwendet. Sie ist über die Schmidt-Zahl mit der molekularen Diffusivität verknüpft:

$$Sc = \frac{\nu}{D}. \quad (2.13)$$

Unter der Annahme, dass die Schmidt-Zahl den Wert $Sc = 1$ hat, lassen sich dann auch Ausdrücke für die Flammendicke und die charakteristische Flammenzeitskala angeben [Pet99]:

$$l_F = \frac{D}{s_L} = \frac{\nu}{s_L}; \quad t_F = \frac{l_F}{s_L}. \quad (2.14)$$

Anhand dieser Größen lassen sich Ähnlichkeitskennzahlen definieren, die zur Abgrenzung der Verbrennungsregime herangezogen werden können. Eine der wichtigsten Kennzahlen zur Charakterisierung von Turbulenz ist die turbulente Reynoldszahl Re_T :

$$Re_T = \frac{v'l}{\nu} = \frac{v'l}{s_L l_F}. \quad (2.15)$$

Im Hinblick auf die Wechselwirkung von Verbrennung und Turbulenz ist außerdem die turbulente Karlovitzzahl Ka von entscheidender Bedeutung:

$$Ka = \frac{t_F}{t_\eta} = \frac{l_F^2}{\eta^2} = \frac{v_\eta^2}{s_L^2}. \quad (2.16)$$

Wie aus der Definition ersichtlich ist, gibt sie das Verhältnis der Flammenzeitskala zur Kolmogorov-Zeitskala und das Verhältnis von Flammen- und Kolmogorov-Längenskala in quadratischer Form an. Analog kann eine zweite Karlovitzzahl Ka_δ definiert werden, die sich nicht auf die gesamte Flammendicke, sondern nur auf die innere Reaktionsschicht bezieht [Pet99]:

$$Ka_\delta = \frac{l_\delta^2}{\eta^2} = \delta^2 Ka. \quad (2.17)$$

Aus den Gleichungen 2.10, 2.12, 2.15 und 2.16 können dann Ausdrücke für Linien konstanter Reynolds- und Karlovitzzahl im Borghi-Diagramm abgeleitet werden:

$$\frac{v'}{s_L} = Re_T \left(\frac{l}{l_F} \right)^{-1}, \quad (2.18)$$

$$\frac{v'}{s_L} = Ka^{2/3} \left(\frac{l}{l_F} \right)^{1/3}. \quad (2.19)$$

In doppeltlogarithmischer Auftragung erscheinen diese Linien als Geraden. Das Borghi-Diagramm mit den charakteristischen Linien $Re_T = 1$, $Ka = 1$ und $Ka_\delta = 1$ (für $\delta = 0,1$) ist in Abbildung 2.3 zu sehen. Die ausgewählten Linien zeigen die Grenzen der Verbrennungsregime, die sich aus den oben beschriebenen Herleitungen ergeben [Pet99]:

- *Bereich der laminaren Flammen:* In der linken unteren Ecke des Diagramms, begrenzt durch die Linie $Re_T = 1$, liegt der Bereich der laminaren Flammen. Die Flammenfronten in diesem Bereich sind flach.
- *Bereich der gewellten Flammenfronten:* Der Bereich unterhalb der Linie $v'/s_L = 1$ wird als Bereich der gewellten Flammenfronten (*wrinkled flamelets*) bezeichnet. Die Turbulenz hat hier nur sehr schwachen Einfluss auf die Flammenausbreitung, da die laminare Flammengeschwindigkeit größer ist als die turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen. Die Flammenfronten in diesem Bereich sind daher nur leicht gewellt, können aber lokal als laminar betrachtet werden.
- *Bereich der gefalteten Flammen:* In diesem Bereich gilt: $Ka < 1$. Das bedeutet, dass die Kolmogorov-Länge η der kleinsten Wirbel größer ist als die Flammendicke l_F , weshalb zwischen Turbulenz und Flamme eine rein kinematische Wechselwirkung besteht. Die Flamme kann auch hier lokal noch als laminar betrachtet werden, wird jedoch durch die Turbulenz auf großen

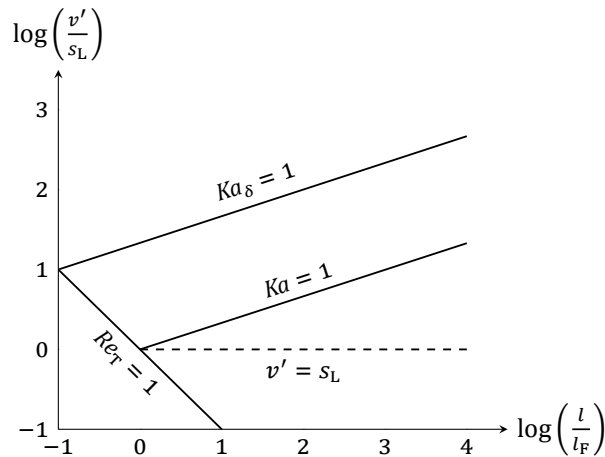


Abbildung 2.3: Borghi-Diagramm: Regime der turbulenten Vormischverbrennung [Pet99].

Längenskalen deformiert. Der Bereich wird auch als *corrugated flamelets*-Bereich bezeichnet.

- *Bereich der dünnen Reaktionszonen:* Im anschließenden Bereich $1 < Ka < Ka_\delta$ ist die Kolmogorov-Länge η kleiner als die Flammendicke l_F , aber größer als die Dicke δ der inneren Schicht. Es kommt daher zur Wechselwirkung zwischen Turbulenz und Vorwärmerschicht. Allerdings hat die turbulente Mischung keinen Einfluss auf die chemische Reaktion in der inneren Schicht. Die Flamme wird daher aufgeweitet und aufgerissen.
- *Bereich der gelöschten Reaktionszonen:* Oberhalb der Linie $Ka_\delta = 1$ liegt der Bereich, in dem die kleinsten Wirbel der Turbulenz so klein sind, dass sie in die innere Reaktionszone eindringen und diese aufreißen können: $\eta < l_\delta$. Die turbulente Mischung beeinflusst hier direkt die chemische Zeitskala. Für hohe Karlovitzzahlen ist keine Flammenfront mehr zu erkennen. Die Verhältnisse gleichen sich denen in einem idealen Rührreaktor an.

In der ursprünglichen Fassung des Borghi-Diagramms ist der Bereich der gelöschten Reaktionszonen anhand der turbulenten Damköhler-Zahl definiert [Bor85]:

$$Da = \frac{t}{t_F} = \frac{l}{l_F} \frac{s_L}{v'} \quad (2.20)$$

Die Linie $Da = 1$ ist im Borghi-Diagramm somit eine Ursprungsgerade mit Steigung eins.

In realen Strömungen liegt ein breites Spektrum von Dissipationsraten ε vor, weshalb turbulente Flammen sich nicht einfach als Punkte im Borghi-Diagramm einzeichnen lassen, sondern nur als Zonen [War01].

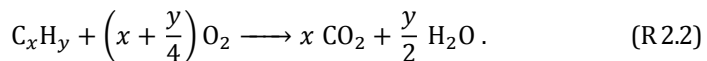
Unter den Bedingungen, wie sie in Ottomotoren auftreten, kann die Verbrennung meist in den Bereich der gefalteten Flammen eingeordnet werden. Nur unter mageren Verbrennungsbedingungen oder bei einer Kombination aus hoher Drehzahl und kleiner Last kann unter Umständen auch der Bereich der dünnen Reaktionszonen erreicht werden [Wir93].

2.2 Homogene Selbstzündung höherer Kohlenwasserstoffe

Im Gegensatz zur Flammenfrontverbrennung spielt die räumliche Auflösung für homogene Selbstzündprozesse eine untergeordnete Rolle. Wird die räumliche Verteilung der Reaktanden sowie der thermischen Zustandsgrößen in der idealisierten Betrachtung als perfekt homogen verteilt angesehen, dann können sämtliche Transportprozesse vernachlässigt werden. Das zeitliche Verhalten des Systems ist dann ausschließlich durch die Reaktionskinetik bestimmt.

2.2.1 Elementarreaktionen

Für die Verbrennung von höheren Kohlenwasserstoffen gilt zunächst die globale Reaktionsgleichung:



In der Realität kann diese Reaktion so allerdings nicht ablaufen. Deutlich wird dies bei Betrachtung eines konkreten Beispiels: Im Falle von Heptan C_7H_{16} müsste ein Kraftstoffmolekül gleichzeitig mit elf Sauerstoffmolekülen zusammentreffen, was als nahezu unmöglich anzusehen ist.

Die Bruttoreaktion R.2.2 kann stattdessen in eine Vielzahl von kleinschrittigen Einzelreaktionen aufgeteilt werden. Sind dies Reaktionen, die auf molekularer Ebene tatsächlich so ablaufen, spricht man von Elementarreaktionen [War01].

Ein großer Vorteil bei der Verwendung von Elementarreaktionen zur quantitativen Beschreibung von Reaktionsverläufen liegt darin, dass für sie einfache Zeitgesetze gelten. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Reaktionsordnung von Elementarreaktionen ganzzahlig, unter allen Umständen konstant und einfach zu ermitteln ist [War01], da sie der Molekularität der Reaktion entspricht. In der Praxis treten unimolekulare, bimolekulare und trimolekulare Elementarreaktionen auf, die entsprechend Zeitgesetze erster, zweiter und dritter Ordnung aufweisen.

2.2.2 Reaktionsmechanismen

Die Gesamtheit aller Elementarreaktionen bildet das Reaktionssystem theoretisch exakt ab. Sie bilden einen Reaktionsmechanismus. Der Reaktionsverlauf kann damit für alle möglichen Anfangsbedingungen wie Temperaturen und Mischungsverhältnisse exakt berechnet werden, wenn die Parameter zur Berechnung der Geschwindigkeitskoeffizienten k aller Elementarreaktionen bekannt sind. Diese lassen sich mit einem Exponentialansatz nach Arrhenius berechnen:

$$k = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right). \quad (2.21)$$

Da bei einigen Reaktionen der präexponentielle Faktor A ebenfalls von der Temperatur abhängt, wird in der Regel eine erweiterte Darstellung gewählt:

$$k = A' \cdot T^b \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right). \quad (2.22)$$

Zur Verwendung des Reaktionsmechanismus für die numerische Simulation werden der präexponentielle Faktor A' , der Exponent b sowie die Aktivierungsenergie E_a für jede Reaktion des Mechanismus gespeichert.

In der Praxis ist es im Allgemeinen nicht möglich, einen vollständigen Reaktionsmechanismus aufzustellen, da dafür eine sehr große Anzahl an Elementarreaktionen berücksichtigt werden muss, deren Koeffizienten vorab ermittelt werden müssen. Eine vollständige Berechnung der Reaktionskinetik ist häufig jedoch auch nicht erwünscht, da ohnehin stets ein Kompromiss aus Vorhersagegenauigkeit und Rechenzeit getroffen werden muss. Es werden daher reduzierte Reaktionsmechanismen entwickelt, die den Reaktionsverlauf im interessierenden Temperatur- und Druckbereich ausreichend genau wiedergeben. Zu diesem Zweck existieren zahlreiche Methoden wie Annahme von Quasistationarität oder partiellen Gleichgewichten, Reaktionsauswahl mittels Sensitivitätsanalysen oder Reaktionsflussanalyse [War01; Joo06].

2.2.3 Radikalkettenreaktionen

Eine besondere Herausforderung bei der Untersuchung von Selbstzündvorgängen in realen Motoren liegt in dem Umstand, dass die gängigen Kraftstoffe aus einer Vielzahl von unterschiedlichen chemischen Spezies bestehen. Diese können bei der Analyse und Beschreibung des Zündverlaufs nicht alle explizit berücksichtigt werden, zumal die genaue Zusammensetzung der Kraftstoffe in aller Regel nicht bekannt ist. Allerdings können allgemeingültige Mechanismen formuliert werden, die sich auf alle höheren Kohlenwasserstoffe übertragen lassen. Möglich wird dies durch die Tatsache, dass es sich bei der Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-

Luft-Gemischen um Radikalkettenreaktionen handelt. Das Systemverhalten wird bestimmt durch das Zusammenspiel unterschiedlicher Reaktionstypen, bei denen den Radikalen eine zentrale Bedeutung zukommt [War01]:

- *Ketteneinleitungsreaktionen*: Das Kraftstoffmolekül reagiert z. B. mit einem Sauerstoffmolekül und bildet erste Radikale.
- *Kettenfortpflanzungsreaktionen*: Aus Radikalen werden durch Reaktion andere Radikale gebildet, wobei ihre Anzahl konstant bleibt.
- *Kettenverzweigungsreaktionen*: Aus einem Radikal werden durch Reaktion mehrere Radikale gebildet, wodurch sich die Reaktion beschleunigt.
- *Kettenabbruchreaktionen*: Durch Reaktion mit anderen Molekülen oder Stöße mit der Wand werden Radikale verbraucht.

Das Zusammenspiel dieser Reaktionstypen ist stark von Temperatur und Druck abhängig, so dass sich ein komplexes Systemverhalten ergibt: Betrachtet man ein Kohlenwasserstoff-Luft-Gemisch in einem heißen Behälter, so stellt man fest, dass das Gemisch bei bestimmten Werten von Temperatur und Druck nur sehr langsam reagiert, bei anderen jedoch – unter Umständen nach einer mehr oder weniger langen Zündverzugszeit – schlagartig zündet und explosionsartig durchreagiert. Durch Auftragen dieser Wertepaare in einem Diagramm lässt sich das p - T -Zünddiagramm erstellen (siehe Abbildung 2.4), in dem die Grenzen zwischen Gebieten mit langsamer Reaktion und denen mit explosionsartigem Umsatz eingezeichnet werden können. Es ist zu erkennen, dass bei mittleren Temperaturen in Abhängigkeit vom Druck drei Explosionsgrenzen existieren. Die Existenz der unteren beiden Explosionsgrenzen ist auf den Charakter der ablaufenden chemischen Reaktionen zurückzuführen. Es handelt sich dabei um Radikalkettenreaktionen, die zu ihrer Initiierung zunächst eine Ketteneinleitungsreaktion erfordern. Um schnell genug eine ausreichend große Anzahl an reaktiven Radikalen zu erzeugen, sind dann Kettenverzweigungsreaktionen erforderlich, bei denen definitionsgemäß auf der Produktseite mehr Radikale entstehen als auf der Eduktseite verbraucht werden. Ketteneinleitungs- und Kettenverzweigungsreaktionen stehen dabei in Konkurrenz zu Kettenabbruchreaktionen in der Gasphase und an Behälterwänden. Bei sehr kleinen Drücken und folglich kleiner Dichte des Gases dominieren diese letztgenannten Kettenabbruchreaktionen an den Behälterwänden das Zündverhalten des Systems. Die gebildeten Radikale diffundieren an die Wand (Diffusion $\propto p^{-1}$) und werden dort in Abbruchreaktionen verbraucht, bevor Kettenverzweigungen stattfinden können. Die Lage der ersten Zündgrenze ist folglich stark von Material und Beschaffenheit der Wände abhängig [War01].

Bei höheren Drücken schwindet der Einfluss der Wände, das Systemverhalten wird stattdessen bis hin zur dritten Explosionsgrenze dominiert von der Konkurrenz zwischen Verzweigungs- und Abbruchreaktionen im Gas. Mit steigendem Druck verschieben sich die Gleichgewichtslagen bestimmter Reaktionen derart, dass vermehrt reaktionsträge Zwischenprodukte entstehen, was de facto einem

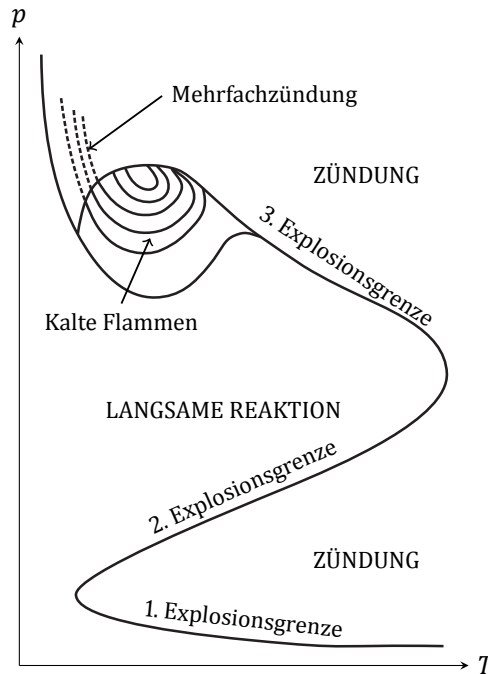


Abbildung 2.4: p - T -Zünddiagramm für ein Kohlenwasserstoff-Luft-Gemisch (schematisch) [War01].

Kettenabbruch gleichkommt. Dieser Übergang ist für die Ausbildung der zweiten Explosionsgrenze verantwortlich.

An der dritten Explosionsgrenze schließlich findet ein Übergang statt von der Radikalkettenreaktion zur thermischen Explosion. Die Dichte des reagierenden Gases ist für die vorherrschenden hohen Drücke so groß, dass die pro Volumeneinheit produzierte Wärmemenge nicht mehr schnell genug abgeführt werden kann, was zu einer schnellen Aufheizung und folglich zu einem explosionsartigen Umsatz führt, da die Reaktionsgeschwindigkeit mit der Temperatur zunimmt (Gleichung 2.21). Für den realen Motorbetrieb sind ausschließlich Drücke oberhalb der zweiten Explosionsgrenze relevant.

Bei höheren Kohlenwasserstoffen kommt es in Bereichen nahe der dritten Explosionsgrenze, die in Abbildung 2.4 ebenfalls eingezeichnet ist, darüber hinaus zu weiteren Phänomenen. Als *kalte Flammen* wird eine Form der Verbrennung bezeichnet, die bei extrem niedrigen Temperaturen abläuft. Bei der Mehrfachzündung erfolgt die Zündung erst nach einigen Lichtblitzen. Beide Phänomene treten im Motor aufgrund der Kürze der zur Verfügung stehenden Zeit nicht auf [Bäu01]. Da sie in dem Temperatur- und Druckbereich angesiedelt sind, in dem auch im Mo-

tor Selbstzündung stattfinden kann, soll aber im Folgenden das zugrundeliegende Phänomen der *degenerierten Kettenverzweigung* näher betrachtet werden. Dazu ist es unerlässlich, die ablaufenden Reaktionen etwas detaillierter zu betrachten. Wesentlich für das Systemverhalten ist in diesem Bereich die Unterscheidung zweier Temperaturbereiche, in denen unterschiedliche Reaktionsverläufe zum Tragen kommen.

Am Beginn jeder Reaktionskette steht jeweils eine Ketteneinleitungsreaktion, bei der das Kraftstoffmolekül RH von einem Sauerstoffmolekül angegriffen wird:



Diese Reaktionen weisen hohe Aktivierungsenergien auf, woraus sich die langen Zündverzugszeiten bei niedrigen Temperaturen erklären. Die Bildung von $\text{H}\dot{\text{O}}_2$ verläuft thermisch nahezu neutral, das Radikal ist relativ reaktionsträge.

Der weitere Verlauf der Reaktion ist stark von den herrschenden Temperaturen abhängig. Die Reaktionsmechanismen, die bei Temperaturen $T > 1200 \text{ K}$ (beispielsweise in der Flamme) zum Tragen kommen, werden als *Hochtemperaturoxidation* bezeichnet. Auf die Ketteneinleitungsreaktion folgt hier thermischer Zerfall in mehreren Schritten (β -Zerfall) unter Bildung von Alkenen und immer kleineren Alkylradikalen, bis letztlich – unabhängig vom ursprünglich eingesetzten Kraftstoff – nur noch eine Mischung aus Methyl- ($\dot{\text{C}}\text{H}_3$) und Ethyl-Radikalen ($\dot{\text{C}}_2\text{H}_5$) verbleibt [War01]:



Diese reagieren auf unterschiedliche Weise weiter [Wes00]. Methyl-Radikale neigen zur Rekombination, was einem Kettenabbruch gleichkommt:



Ethyl-Radikale hingegen bilden Wasserstoff-Radikale, die die folgenden Reaktionen beschleunigen:



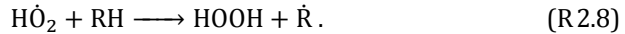
Die folgenden Oxidationsreaktionen verlaufen wesentlich langsamer als der β -Zerfall. Entscheidenden Einfluss hat in diesem Temperaturbereich die Kettenverzweigungsreaktion:



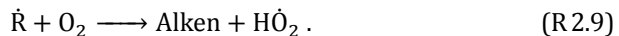
Der Mechanismus der Hochtemperaturoxidation soll hier jedoch nicht im Detail behandelt werden, da er erst in der letzten Phase der Selbstzündung und während der anschließenden Verbrennung relevant wird und somit keinen direkten Einfluss auf das Auftreten von Selbstzündung unter motorischen Randbedingungen hat.

Stattdessen sind hier die Mechanismen der *Niedertemperaturoxidation* ausschlaggebend. Im Folgenden werden die Reaktionspfade vorgestellt, auf denen die in

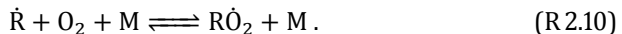
Reaktion R.2.3 entstandenen Radikale $\dot{\text{H}}\text{O}_2$ und $\dot{\text{R}}$ weiterreagieren können [Bäu01; Hey88; War01]. Das Radikal $\dot{\text{H}}\text{O}_2$ reagiert dabei mit einem weiteren Kraftstoffmolekül RH:



Das entstandene Wasserstoffperoxid ist für Temperaturen $T < 900 \text{ K}$ zunächst stabil und führt nicht unmittelbar zu einem weiteren Fortschritt der Reaktion. Der weitere Verlauf der Reaktion hängt somit vom verbleibenden Kraftstoffradikal $\dot{\text{R}}$ ab. Dieses kann auf zwei verschiedenen Weisen wiederum mit Sauerstoff reagieren. In der ersten möglichen Reaktion wird ein Alken sowie ein $\dot{\text{H}}\text{O}_2$ -Radikal gebildet:

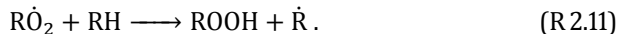


Diese Reaktion läuft allerdings relativ langsam ab, so dass das Systemverhalten maßgeblich von einer zweiten, wesentlich schnelleren Reaktion dominiert wird (M ist ein weiteres Molekül, das nicht direkt an der Reaktion beteiligt ist, aber Energie aufnimmt):



Die Gleichgewichtslage dieser Reaktion ist stark temperaturabhängig. Für niedrige Temperaturen liegt das Gleichgewicht zunächst auf der rechten Seite, bei höheren Temperaturen dann auf der linken [Wes00]. Die Reaktion stellt daher einen „Schalter“ dar, der je nach Temperatur den weiteren Verlauf der Zündung bestimmt. Das entstandene Peroxi-Radikal $\dot{\text{R}}\text{O}_2$ kann – abhängig vom Aufbau des Moleküls – prinzipiell auf zwei Arten weiterreagieren.

Bei der *externen Wasserstoffabstraktion* reagiert es mit einem anderen Molekül, dem Kraftstoffmolekül RH:



Das entstandene Hydroperoxid ROOH zerfällt in einem folgenden Kettenverzweigungsschritt unter homolytischer Spaltung der Peroxidbindung:



Diese Reaktion stellt den für die Radikalkettenreaktion wesentlichen Kettenverzweigungsschritt dar.

Besonders für langkettige, unverzweigte Kraftstoffmoleküle dominiert hingegen eine deutlich schnellere Isomerisierungsreaktion, die *interne Wasserstoffabstraktion*. Dabei lagert sich ein mittelständiges H-Atom aus einer CH-Bindung nach Bildung einer intermediären Ringstruktur an das endständige Sauerstoffatom mit Radikaleigenschaft um. Die Position der freien Valenz wechselt dabei zu dem vorher an das H-Atom gebundene Kohlenstoffatom [Wes88]:

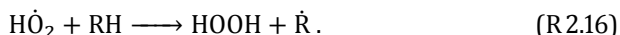


Diese Reaktion ist von entscheidender Bedeutung für die Selbstzündeigenschaften von Kraftstoffen: Die erforderliche Energie zur internen Abstraktion ist unmittelbar von der Ringspannungsenergie und der Bindungsenergie des Wasserstoffatoms abhängig. Je länger und unverzweigter das Kraftstoffmolekül, um so geringer die erforderliche Energie und um so höher die Neigung zur internen Abstraktion und damit zur schnellen Selbstzündung. Das entstandene Hydroperoxi-Radikal $\dot{\text{R}}\text{OOH}$ kann auf mehrere Arten weiterreagieren, beispielsweise unter Bildung von (instabilen) Diradikalen, Aldehyden oder Ketonen:

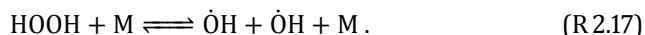


Die genannten Reaktionen stellen allerdings nur Kettenfortpflanzungsreaktionen dar und können so noch keine Beschleunigung der Reaktion bewirken. Die dazu erforderlichen Kettenverzweigungen finden in der Regel erst nach einer weiteren Sauerstoffaddition statt. Auf diese Reaktionen soll hier nicht im einzelnen eingegangen werden. Allen diesen Reaktionen ist jedoch gemein, dass im weiteren Verlauf – ebenso wie im Falle der externen Abstraktion (Reaktion R.2.12) – $\dot{\text{O}}\text{H}$ -Radikale gebildet werden. Diese reagieren (im Gegensatz zum bereits in der Ketteneinleitungsreaktion R.2.3 gebildeten $\dot{\text{H}}\dot{\text{O}}_2$) stark exotherm mit Kraftstoffmolekülen RH , was zu einer Temperaturerhöhung und damit zu einer Verlagerung des Gleichgewichts in Reaktion R.2.10 hin zur linken Seite führt. Die Reaktionen hemmen somit durch die resultierende Temperaturerhöhung die Bildung ihrer eigenen Edukte, was zu einer deutlichen Verlangsamung der Gesamtreaktion führt (*degenerierte Kettenverzweigung*).

Die zweite Stufe der Zündung findet erst nach einer weiteren Zündverzugszeit statt. Durch Verlagerung der Reaktion R.2.10 auf die linke Seite gewinnt nun die langsame Reaktion R.2.9 an Bedeutung. Ebenso wie durch die Ketteneinleitungsreaktion R.2.3 werden auch durch sie große Mengen an $\dot{\text{H}}\dot{\text{O}}_2$ -Radikalen gebildet, die zu Wasserstoffperoxid weiterreagieren:



Mit steigender Temperatur dominiert daher zunehmend die Wasserstoffperoxid-Dissoziation das Reaktionsverhalten:



Analog zur Reaktion R.2.12 findet auch hier eine homolytische Spaltung der peroxidischen Bindung statt. Während im Falle der ROOH -Dissoziation die Bildung der $\dot{\text{O}}\text{H}$ -Radikale jedoch aufgrund der exothermen Folgereaktionen zum Abbruch der Reaktion führten, beschleunigt die resultierende Aufheizung des Reaktionssystems nun die HOOH -Dissoziation noch. Es kommt zur Autokatalyse, einem selbstverstärkenden Systemverhalten, die in einem raschen Anstieg der Temperatur, verbunden mit Übergang zur Hochtemperaturoxidation, resultiert.

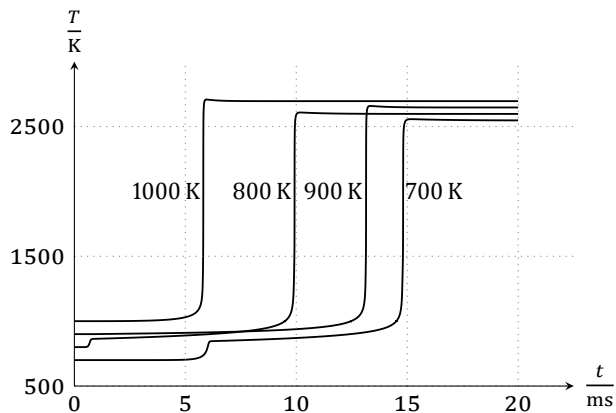


Abbildung 2.5: Isochore Selbstzündung von stöchiometrischen Gemischen aus *n*-Heptan und Luft bei 10 bar und unterschiedlichen Anfangstemperaturen.

Beispiele für dieses Zündverhalten sind in Abbildung 2.5 zu sehen, die Temperaturverläufe bei der Selbstzündung von stöchiometrischen *n*-Heptan-Luft-Gemischen bei verschiedenen Anfangstemperaturen zeigt. Es ist deutlich zu erkennen, dass sich bei niedrigeren Anfangstemperaturen eine zweistufige Zündung ausbildet. Nach einer ersten Zündverzugszeit, die durch die Aktivierungsenergie der Ketteneinleitungsreaktion geprägt ist, folgt nach Einsetzen der Niedertemperaturoxidation über den ROOH-Pfad zunächst eine leichte Temperaturerhöhung, die zum Abbruch der Reaktion führt. Nach einer weiteren Zeitspanne setzt die langsamere Reaktion über den HOOH-Pfad ein, die rasch zu einem starken Temperaturanstieg mit Übergang zur Hochtemperaturoxidation führt. Bei höheren Anfangstemperaturen verläuft die Selbstzündung einstufig.

Wie in Abbildung 2.5 zu erkennen ist, nimmt die Zündverzugszeit mit steigender Anfangstemperatur sowohl im Falle der zweistufigen als auch der einstufigen Zündung grundsätzlich ab, beim Übergang von der zweistufigen zur einstufigen Zündung jedoch leicht zu. Dieses Phänomen wird als *Negativer Temperaturkoeffizient* bezeichnet.

2.3 Selbstzündung in Ottomotoren

Obwohl bei der regulären ottomotorischen Verbrennung keine Selbstzündung auftritt, kann das Phänomen nicht vernachlässigt werden, da im realen Betrieb verschiedene Formen von irregulärer Verbrennung auftreten können. Die wich-

tigsten Verbrennungsanomalien, bei denen Selbstzündung eine Rolle spielt, sind das Klopfen, die Glühzündung und die Vorentflammung.

Neben diesen Formen der unerwünschten Selbstzündung gibt es außerdem Bestrebungen, das Gemisch im Brennraum nicht mehr per Zündkerze zu zünden, sondern per homogener Raumzündung.

2.3.1 Klopfen

Die bekannteste Form der Selbstzündung in Ottomotoren ist das Klopfen. Dieses Phänomen wurde bereits von Nikolaus August Otto beobachtet [Lan49], die Bezeichnung Klopfen geht auf das Ende des 19. Jahrhunderts zurück [Cle26]. Erste Erklärungsansätze wurden Anfang des 20. Jahrhunderts veröffentlicht [Ric23]. Im gesamten 20. Jahrhundert war das Klopfen Gegenstand intensiver Forschungsarbeiten, wobei vor allem die optischen Untersuchungen maßgeblich zur Erklärung des Phänomens beitrugen [Mil42; Mil45; Spi86; Spi91].

Klopfen tritt nach Einleitung der Verbrennung durch die Zündkerze auf. Vor der Flammenfront kommt es im noch unverbrannten Gemisch lokal zu Selbstzündung, die sich schnell auf das gesamte Endgas ausbreitet. Durch die schnelle Verbren-

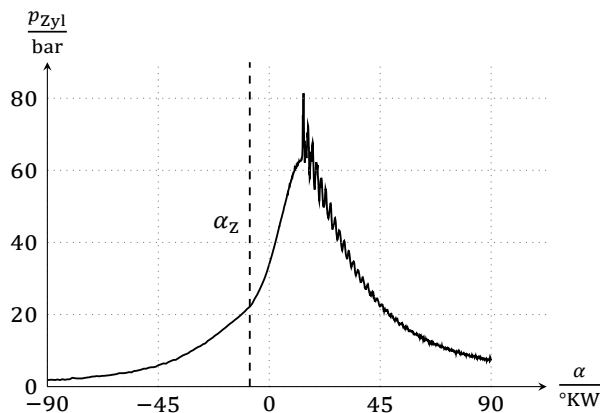


Abbildung 2.6: Zylinderdruckverlauf bei klopfender Verbrennung.

nung wird das Gas im Brennraum zu Eigenschwingungen angeregt, die im gemessenen Zylinderdrucksignal deutlich sichtbar sind. Abbildung 2.6 zeigt beispielhaft den Druckverlauf eines klopfenden Arbeitsspiels. α_Z bezeichnet den Zeitpunkt der Funkenzündung.

Die Druckwellen stören die Grenzschicht an den Brennraumwänden, was lokal zu einem erhöhten Wärmeeintrag führen kann. Im Zusammenspiel mit der erhöhten mechanischen Belastung durch große Druckgradienten und Schwingungen

kann es in der Folge zu Motorschäden durch Materialerosion oder verklemmte Kolbenringe kommen [Hey88].

Zur Vermeidung von Klopfen wird in modernen Motoren eine Klopfregelung eingesetzt. Das Auftreten von Klopfen wird dabei mit Hilfe von piezoelektrischen Körperschallsensoren registriert. Da die Klopfintensität mit Frühverstellung der Zündung monoton ansteigt, kann eine Regelung implementiert werden, die den Zündzeitpunkt stets auf thermodynamisch günstige Werte nah an der Klopfgrenze einstellt und trotzdem das dauerhafte Auftreten von Klopfen vermeidet.

2.3.2 Glühzündung

Bei der Glühzündung entzündet sich das Gemisch im Brennraum bereits vor der Funkenzündung an heißen Oberflächen im Brennraum. Durch die frühe Zündung werden bei der Verbrennung höhere Spitzentemperaturen erreicht, außerdem kann es zu starkem Klopfen kommen. Dies kann einen erhöhten Wärmeeintrag in die Struktur zur Folge haben. Der heiße Bereich, an dem sich das Gemisch ent-

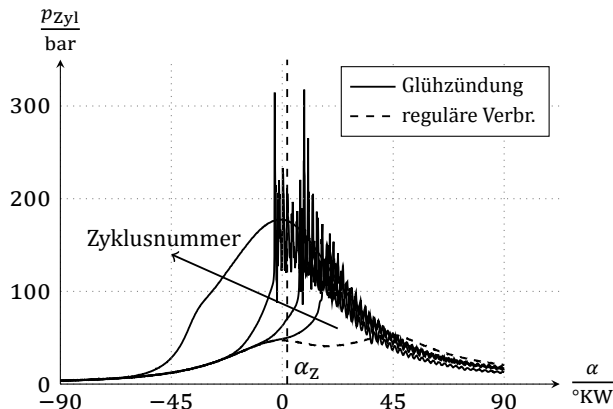


Abbildung 2.7: Zylinderdruckverläufe für vier aufeinanderfolgende Zyklen mit Glühzündung.

zündet hat, kann dadurch noch weiter aufgeheizt werden, so dass es im folgenden Zyklus zu einer noch früheren Zündung kommt [Ern02]. Abbildung 2.7 zeigt ein Beispiel für diesen selbstverstärkenden Prozess. Es ist deutlich zu erkennen, wie – ausgehend von der regulären Verbrennung – die Selbstzündung immer früher im Zyklus stattfindet, bis schließlich die Verbrennung so früh abgeschlossen ist, dass kein Klopfen mehr auftritt. Aufgrund dieser selbsterhaltenden bzw. selbstverstärkenden Charakteristik ist die Glühzündung ein extrem gefährliches Phänomen, das innerhalb von kurzer Zeit zur Zerstörung des Motors führen kann [Hey88].

Unterbrechen lässt sich der Automatismus der Glühzündung nur, indem die Einspritzung abgeschaltet wird, da Eingriffe in die Ansteuerung der Zündkerze keinen Einfluss haben können. Durch eine geeignete thermische Auslegung der kritischen Komponenten, insbesondere der Ventile und der Zündkerze, kann Glühzündung jedoch zuverlässig vermieden werden [Ern02].

2.3.3 Vorentflammung

Ein weiteres Beispiel für Selbstzündung in Ottomotoren ist die sogenannte Vorentflammung. Es handelt sich dabei um ein Phänomen, das erst in den letzten Jahren mit zunehmender Verbreitung von aufgeladenen Downsizing-Motoren in den Fokus des Interesses gerückt ist. In aller Regel tritt Vorentflammung bei kleinen Drehzahlen und sehr hohen Lasten auf. Ähnlich wie im Falle der Glühzündung setzt dabei die Verbrennung erkennbar vor der elektrischen Funkenzündung ein und geht im weiteren Verlauf in heftiges Klopfen über. Im Gegensatz zur Glühzündung ist allerdings niemals selbsterhaltendes oder selbstverstärkendes Verhalten zu beobachten. Auffällig ist jedoch, dass Vorentflammungen häufig in Form von intermittierenden Serien auftreten, bei denen mehrere Vorentflammungen sich mit Zyklen mit regulärer Verbrennung abwechseln [Dah10d; Zac10b; Ama11a; Ama11b].

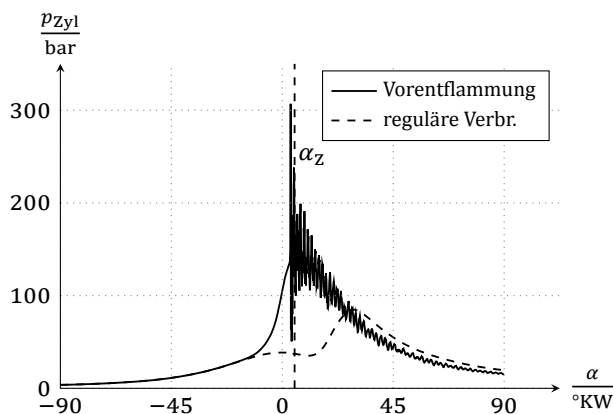


Abbildung 2.8: Zylinderdruckverläufe für reguläre Verbrennung und Vorentflammung.

In Abbildung 2.8 sind beispielhaft Druckverläufe aus Zyklen mit und ohne Vorentflammung am gleichen Betriebspunkt gegenübergestellt. Der Zyklus mit regulärer Verbrennung zeigt deutlich den charakteristischen Druckverlauf, wie er bei aufgeladenen Ottomotoren im Vollastbetrieb auftritt. Um Klopfen zu vermeiden, muss der Zündzeitpunkt so weit nach hinten verlagert werden, dass die Entflammung erst nach dem oberen Totpunkt stattfindet. Ebenso deutlich ist zu erkennen, dass

im Zyklus mit Vorentflammung der Druck bereits lange vor dem Zeitpunkt der Funkenzündung ansteigt und daher einen weitaus höheren Maximalwert erreicht. Zusätzlich tritt starkes Klopfen auf.

Aufgrund der enormen Klopfamplituden und der daraus resultierenden Gefahr ernster Motorschäden wird die Vorentflammung als eine der zentralen Herausforderungen bei der Entwicklung zukünftiger Downsizing-Motoren angesehen [Wil09].

Die Ursachen für Vorentflammung sind Gegenstand aktueller Forschung. Häufig werden Öltropfen als Ursache für die Selbstzündung genannt [Dah10a; Rot10; Zac10a; Zah11; Ama12; Pal13a; Wel14; Din14]. Neuere Forschungsergebnisse deuten jedoch darauf hin, dass auch feste Partikel Vorentflammung auslösen können [Pal13b; Sch13; Döh13; Oka14].

2.3.4 Homogene Kompressionszündung

Brennverfahren auf Basis von homogener Kompressionszündung stellen den einzigen Anwendungsfall dar, bei dem die Benzinselbstzündung erwünscht ist. Diese Brennverfahren werden häufig als HCCI (*Homogeneous Charge Compression Ignition*), PCCI (*Premixed Charge Compression Ignition*) oder CAI (*Controlled Auto-Ignition*) bezeichnet. Einige Autoren verwenden die unterschiedlichen Bezeichnungen, um Verfahren, die mit Dieselmotoren arbeiten, von denen mit Benzinselbstzündung zu unterscheiden, allerdings existiert für diese Unterscheidung keine durchgängige Systematik [Kau05]. Im Rahmen dieser Arbeit wird ausschließlich die homogene Benzinselbstzündung betrachtet, das Brennverfahren wird im Folgenden als HCCI-Verbrennung bezeichnet.

Charakteristisch für das Brennverfahren ist der Umstand, dass das Kraftstoff-Luft-Gemisch im Brennraum nicht durch eine Zündkerze gezündet wird, sondern selbst zündet. Da für die Selbstzündung Gemischtemperaturen erforderlich sind, die im normalen Ottomotor nicht erreicht werden, müssen besondere Maßnahmen getroffen werden, um Bedingungen zu schaffen, bei denen Zündung auftreten kann. Dies kann in Form einer Ansaugluftvorwärmung oder durch Zumischung von heißem Abgas erfolgen.

Die Abgaszumischung kann entweder in Form einer externen Abgasrückführung, einer Abgasrücksaugung oder einer Abgasrückhaltung realisiert werden. Rücksaugung und Rückhaltung sind zwei Methoden, das Abgas mittels geeigneter Wahl der Steuerzeiten im Brennraum zurückzuhalten, ohne dafür zusätzliche Abgasleitungen zu benötigen. Bei der Abgasrücksaugung wird das Abgas beim Ladungswechsel entweder in den Einlasskanal oder in den Abgastrakt ausgeschoben und anschließend zurück in den Brennraum gesaugt, indem die Einlassventile früh geöffnet werden bzw. die Auslassventile ein zweites Mal geöffnet werden [Fra02]. Abbildung 2.9 zeigt beispielhaft den Zylinderdruckverlauf und die dazugehörigen

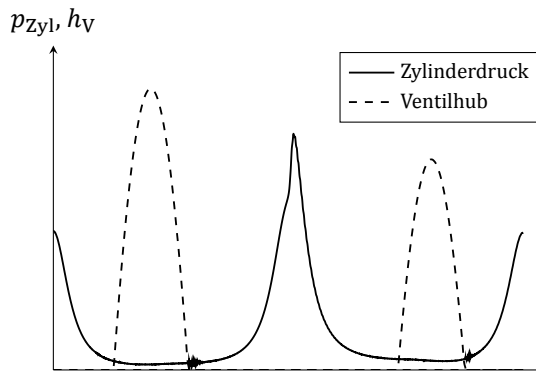


Abbildung 2.9: Ventilhubkurven h und Zylinderdruckverlauf p im HCCI-Betrieb mit Abgasrückhaltung durch negative Ventilüberschneidung.

Ventilhubkurven für eine Realisierung des HCCI-Betriebs mit Abgasrückhaltung durch negative Ventilüberschneidung. Darin ist deutlich die charakteristische Zwischenkompression zu erkennen.

Die Kraftstoffzumischung erfolgt bei HCCI-Brennverfahren typischerweise zu einem sehr frühen Zeitpunkt. Dabei kann sowohl Saugrohreinspritzung [Nie01] als auch Direkteinspritzung in den Saughub [Gün04; Sau07] zum Einsatz kommen. Auf diese Weise wird sichergestellt, dass der Kraftstoff bei Kompressionsende hinreichend homogen im Brennraum verteilt ist, da ausreichend viel Zeit zur Gemischaufbereitung zur Verfügung steht.

Die Selbstzündung des homogenen Gemischs kann bei hohen Lasten große Druckgradienten nach sich ziehen, was in einer hohen mechanischen Belastung des Motors sowie lauten Verbrennungsgeräuschen resultiert. Aus diesem Grund wird das HCCI-Verfahren hauptsächlich in Teillastbetriebspunkten eingesetzt. Hier kann der Problematik des schlagartigen Druckanstiegs entgegengewirkt werden, indem das Gemisch wahlweise mit Abgas oder mit Luft verdünnt wird.

3 Untersuchungs- und Analysemethoden

Im Rahmen dieser Arbeit wurden sowohl experimentelle Untersuchungen als auch Simulationsrechnungen durchgeführt. In den folgenden Abschnitten werden zunächst die verwendeten Versuchsmotoren sowie die eingesetzte Messtechnik und die verwendeten Auswerteverfahren vorgestellt. Anschließend folgt eine Beschreibung der Simulationsmodelle, die für die Berechnung der Gemischbildung und Verbrennung in den verwendeten Versuchsträgern aufgebaut wurden.

3.1 Versuchsträger

Da die Phänomene, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden, unter sehr unterschiedlichen Bedingungen auftreten, mussten für die experimentellen Untersuchungen mehrere Versuchsmotoren eingesetzt werden. In den folgenden Abschnitten werden diese Motoren sowie die daran vorgenommenen Modifikationen und die Besonderheiten im jeweiligen Prüfstands Aufbau vorgestellt.

3.1.1 Versuchsmotor für Untersuchungen im HCCI-Betrieb

Für die experimentellen Untersuchungen im HCCI-Betrieb wurde ein modifizierter Einzylindermotor der Firma *Rotax* verwendet. Der Motor wurde in den Jahren 1993 bis 2000 in Motorrädern des Typs *F-650* von *BMW* eingesetzt. Eine Übersicht über

Tabelle 3.1: Technische Daten des HCCI-Versuchsmotors.

Größe	Wert
Hersteller	Rotax
Bezeichnung	BMW F-650 (mod.)
Hubvolumen	650 cm ³
Hub	83,0 mm
Bohrung	100,0 mm
Verdichtung	10,84 : 1
Gemischbildung	BDE, zentrale Injektorlage

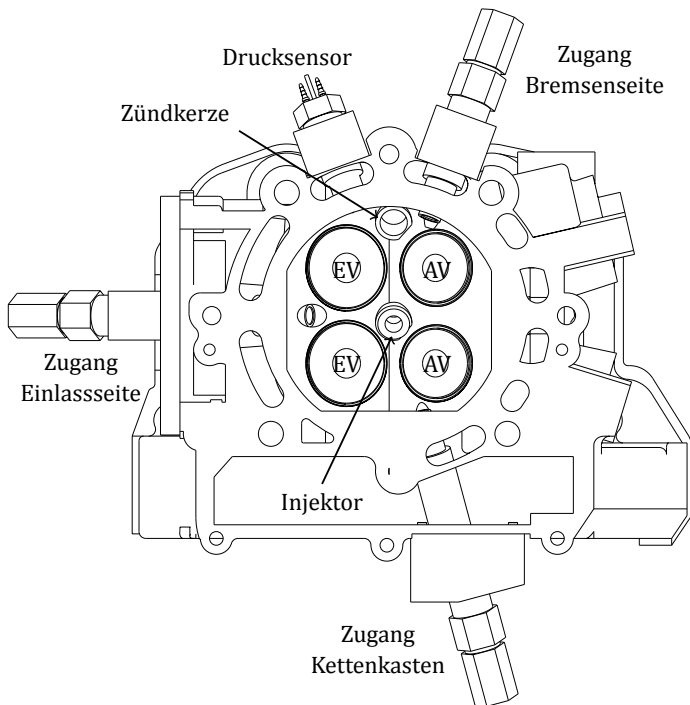


Abbildung 3.1: Anordnung der optischen Zugänge am HCCI-Versuchsträger. Ansicht von unten.

die technischen Daten des modifizierten Motors ist in Tabelle 3.1 aufgeführt.

Für die Untersuchungen im HCCI-Betrieb wurde der Motor von Saugrohr- auf Direkteinspritzung mit Injektor in zentraler Einbaulage umgerüstet. Die Gemischbildung erfolgte mittels eines Sechslöchinjektors vom Typ *HDEV5* der *Robert Bosch GmbH*, der bei einem Einspritzdruck von 100 bar betrieben wurde. Ferner wurde ein variabler Ventiltrieb mit Phasenstellern ein- und auslassseitig nachgerüstet. Die Konstruktion geht auf Arbeiten von Sauter [Sau07] zurück. Zur Darstellung der für den HCCI-Betrieb notwendigen hohen Restgasmengen wurden außerdem modifizierte Nockenwellen mit einem Hub von 2 mm einlass- und 1,5 mm auslassseitig verwendet und das Verdichtungsverhältnis durch Einbau eines Kolbens mit aufgesetztem Kegelstumpf auf $\varepsilon = 10,84 : 1$ erhöht. Auch diese Änderungen wurden aus den Arbeiten von Sauter übernommen.

Zur Adaption optischer Messtechnik wurde der Motor mit drei Endoskopzugängen ausgestattet. Die Anordnung der Zugänge ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

Da das HCCI-Brennverfahren besonders empfindlich auf Änderungen der Randbedingungen reagiert, wurde bei der Gestaltung der Prüfstandsperipherie besonde-

rer Wert auf die Konditionierung der Betriebsstoffe gelegt. So konnten die Temperaturen von Öl und Kühlwasser über externe Heizungen und Wärmetauscher zur Kühlung für alle Untersuchungen auf konstante Werte geregelt werden. Ebenso stand im Luftpfad eine Luftkonditionieranlage zur Verfügung, mit der Temperatur, Druck und Feuchte der Ansaugluft innerhalb von engen Toleranzbereichen eingestellt werden konnten.

3.1.2 Versuchsmotor für Vorentflammungs-Untersuchungen

Als Versuchsträger für die experimentellen Untersuchungen zur Vorentflammung wurde ein seriennaher turboaufgeladener 4-Zylinder-Reihenmotor mit Benzindirekteinspritzung der *Volkswagen AG* verwendet. Die wichtigsten Motorgrößen sind in Tabelle 3.2 zusammengestellt.

Tabelle 3.2: Technische Daten des Vorentflammungs-Versuchsmotors.

Größe	Wert
Hersteller	Volkswagen AG
Bezeichnung	2,0 l T-FSI
Hubvolumen	1984 cm ³
Hub	92,8 mm
Bohrung	82,5 mm
Verdichtung	10,5 : 1
Kraftstoff	Super Plus bleifrei ROZ 98
Gemischbildung	BDE, seitliche Injektorlage

Im Rahmen der Untersuchungen musste die Motorlast über das Niveau des Serienmotors hinaus angehoben werden, um reproduzierbar eine hinreichend große Zahl an Vorentflammungen zu provozieren. Dazu wurde eine gegenüber dem Serienstand modifizierte Auslassnockenwelle eingebaut [Gri08] und per Eingriff in die Motorsteuerung die Wastegateansteuerung des Turboladers modifiziert.

Um eine bessere Kontrolle über die Randbedingungen während der Versuche zu haben, wurde die Wasserpumpe des Motors durch eine externe Konditioniereinheit mit Pumpe ersetzt. So bestand auch bei diesem Motor die Möglichkeit, die Kühlwassertemperatur in gewissen Grenzen vorzugeben. Darüber hinaus wurde zur Kühlung der Ladeluft ein separat einstellbarer Ladeluftkühler verwendet.

Auch dieser Motor wurde mit Endoskopzugängen ausgestattet. Die Anordnung der Zugänge kann Abbildung 3.2 entnommen werden.

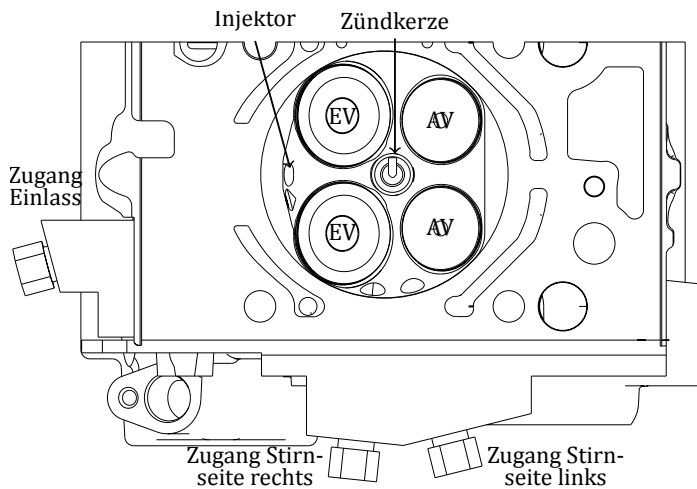


Abbildung 3.2: Anordnung der optischen Zugänge am Versuchsträger für die Vorentflammungsuntersuchungen. Ansicht von unten, nur Zylinder 1.

3.2 Messtechnik

Während der experimentellen Untersuchungen kamen unterschiedliche Messtechniken zum Einsatz. Neben der üblichen Standardmesstechnik wurden auch optische Messverfahren eingesetzt.

3.2.1 Standardmesstechnik

Für beide eingesetzten Motoren wurde jeweils eine Druckindizierung im Brennraum sowie motornah in Ein- und Auslasskanal mit einer Auflösung von $0,1^{\circ}\text{KW}$ durchgeführt. Im Falle des HCCI-Motors wurde ein piezoelektrischer Brennraumdrucksensor vom Typ 6045AU20 sowie piezoresistive Ein- und Auslassdrucksensoren vom Typ 4045 bzw. 4075 der Kistler Instrumente AG eingesetzt, im Falle des Vorentflammungs-Motors ein Brennraumdrucksensor vom Typ 6061BU und ebenfalls Niederdrucksensoren vom Typ 4045 bzw. 4075. Darüber hinaus wurden jeweils die Temperaturen und Drücke von Ansaugluft und Abgas sowie Kühlwasser und Motoröl gemessen. Außerdem standen jeweils Einrichtungen zur Messung des Kraftstoffverbrauchs und am HCCI-Motors der angesaugten Luftmasse sowie Breitbandlambdasonden zur Messung des Luft-Kraftstoff-Verhältnisses zur Verfügung. Diese Größen wurden zur Definition der Randbedingungen für die durchgeführten Simulationen herangezogen.

3.2.2 Sondermesstechnik

Globale Daten aus dem Brennraum, wie sie beispielsweise die Druckindizierung liefert, erlauben ausschließlich integrale Betrachtungen wie die Berechnung des Brennverlaufs. Zünd- und Verbrennungsvorgänge sind jedoch stark ortsabhängige Prozesse, die nur mit besonderen Messverfahren räumlich aufgelöst werden können. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit neben der Standardmesstechnik auch optische Messtechnik eingesetzt.

Verbrennungsvisualisierung mit Photomultiplierkamarasystem

Zur optischen Erfassung des Flammenleuchtens im Brennraum stand ein Hochgeschwindigkeitskamarasystem auf Basis von Photomultiplierteknologie (*Smetec Imaging System – SIS*) zur Verfügung [Sau05]. Das System besteht aus drei Einzelkameras, die synchronisiert eingesetzt werden können. Aufgrund des Einsatzes von Photomultipliern als Detektor in den Kameras ist die räumliche Auflösung zwar verhältnismäßig schlecht (1920 Bildpunkte pro Kamerabild), dem stehen allerdings erhebliche Vorteile gegenüber: Die hohe Empfindlichkeit der Photomultiplier erlaubt den Einsatz von vergleichsweise lichtschwachen Faserbündelendoskopen zur Auskopplung der Lichtsignale aus dem Brennraum, die im Vergleich zu den sonst verwendeten Endoskopen erheblich kleinere Durchmesser aufweisen (4 mm statt 8 mm für etwa 10 000 Lichtleiterfasern). Auf diese Weise kann die Adaption der Messtechnik an den Motor mit minimalen Modifikationen bezüglich Brennraumgeometrie und Wärmehaushalt realisiert werden. Der Öffnungswinkel der Endoskope von 80° ermöglicht die Erfassung eines großen Brennraumvolumens. Als weitere Vorteile der Photomultiplierteknologie sind die hohe zeitliche Auflösung ($0,1 \text{ }^\circ\text{KW}$ bis zu Drehzahlen von über $3000 \text{ } \frac{1}{\text{min}}$) und die spektrale Empfindlichkeit im UV- und UV-nahen Wellenlängenbereich, der für die Analyse von Zündvorgängen von besonderer Bedeutung ist, zu nennen. Die Empfindlichkeit

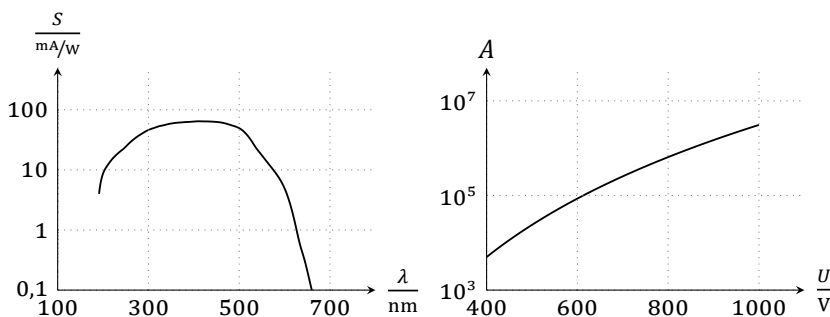


Abbildung 3.3: Empfindlichkeit S (links) und Verstärkung A (rechts) der verbauten Photomultiplier [Ham].

der eingebauten Photomultiplier (Typ *R7400U-03* von *Hamamatsu Photonics, K. K.*) in Abhängigkeit von der Wellenlänge des einfallenden Lichts sowie ihre Verstärkung in Abhängigkeit von der eingestellten Hochspannung ist in Abbildung 3.3 dargestellt [Ham].

Die Kamerasysteme sind darüber hinaus mit einem Ringspeicher ausgestattet, der die automatische Triggerung der Aufnahme auf vordefinierte Ereignisse mit Speicherung der vorangegangenen und nachfolgenden Zyklen ermöglicht. Diese Funktionalität erlaubt die Untersuchung stochastisch auftretender Phänomene wie beispielsweise der Vorentflammung.

Zündortbestimmung mit Photomultiplierkammersystem

Neben der einfachen Verbrennungsvisualisierung kann das Kamerasystem außerdem zur Bestimmung der räumlichen Lage von Selbstzündorten eingesetzt werden. Dazu können bis zu drei Kameras gleichzeitig eingesetzt werden, mit denen die Verbrennung synchron aus unterschiedlichen Blickwinkeln aufgenommen wird.

Während der Auswertung wird in jedem der drei Kamerabilder die Position der ersten Lichtdetektion bestimmt. Unter Zuhilfenahme der Einbauposition und -ausrichtung der Endoskope kann daraus für jedes Kamerabild eine Gerade im Raum errechnet werden, auf der der Zündort liegt. Zur Berechnung dieser Zündortgeraden wird eine Berechnungsvorschrift auf Basis eines einfachen Lochkammermodells verwendet [Sau07]. Nach dieser wird jedem Pixel im Bild eine Gerade im Raum zugewiesen. Alle diese Geraden schneiden sich in einem optischen Zentrum in der Fokalebene der Kamera. Eine schematische Darstellung der geometrischen Verhältnisse ist in Abbildung 3.4 zu sehen. Aus dem bekannten Öffnungswinkel des Endoskops und der Größe des Bildes können die fehlenden geometrischen

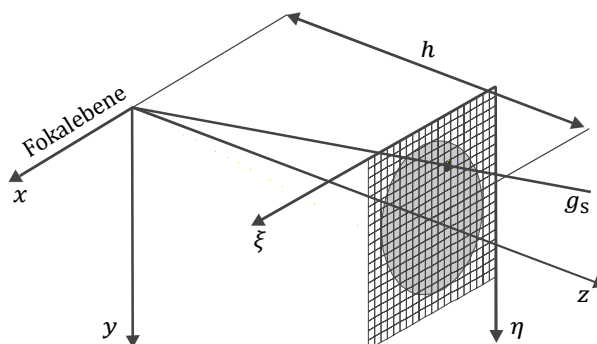


Abbildung 3.4: Berechnung der Zündortgeraden aus der Position der ersten Lichtemission im Bild [Sau07].

Größen ermittelt werden, so dass die Geraden für jeden Bildpunkt in einem lokalen Kamera-Koordinatensystem berechnet werden können. Zur Weiterverwendung werden diese in ein einheitliches Motor-Koordinatensystem transformiert.

Theoretisch lässt sich die Lage des Selbstzündorts im Raum ermitteln, indem der Schnittpunkt dieser Zündortgeraden berechnet wird [Dah10c]. In der Praxis ist dies jedoch in der Regel nicht möglich, da die Zündortgeraden aufgrund von Ungenauigkeiten in der Bestimmung des Orts der ersten Lichtdetektion windschief verlaufen. Ersatzweise wird daher der Ort mit dem kleinsten Abstand zu allen Geraden berechnet. Abbildung 3.5 zeigt beispielhaft zwei Kamerabilder sowie eine schematische Darstellung der Vorgehensweise bei der Rekonstruktion. In den Kamerabildern sind zur bessern Orientierung die sichtbaren Brennraumkonturen eingezeichnet.

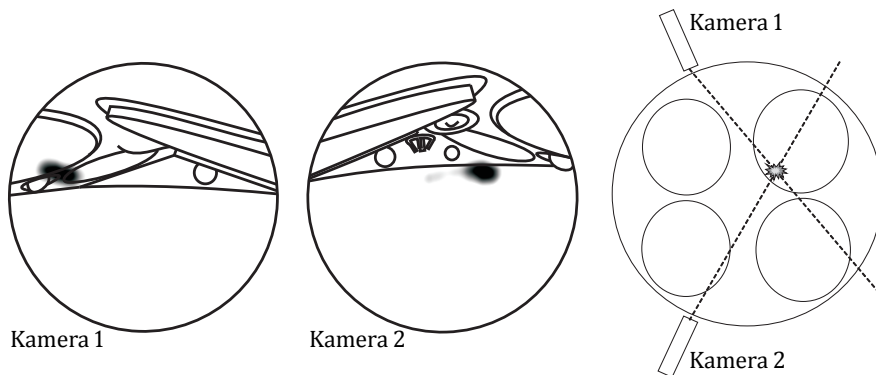


Abbildung 3.5: Bestimmung des Zündorts aus mehreren Zündortgeraden: Detektion des Zündorts in zwei Kamerabildern, Berechnung der räumlichen Lage.

Einspritzstrahlvisualisierung mit Mie-Streulicht

Ein wichtiger Schritt bei der Modellierung von Motoren mit Direkteinspritzung ist die Kalibrierung der verwendeten Einspritzmodelle. Diese Modelle werden anhand von Mie-Streulicht-Aufnahmen validiert [Mie08]. Die Kraftstoffstrahlen werden bei diesen Aufnahmen von einer Lichtquelle beleuchtet. Die flüssigen Kraftstofftropfen streuen das Licht, so dass die Ausbreitung der Flüssigphase in ihrem zeitlichen Verlauf verfolgt werden kann. Aus den Messdaten können Strahlöffnungswinkel und Eindringtiefen ermittelt werden, die zur Validierung der numerischen Modelle herangezogen werden können. Die Beleuchtung kann dabei entweder in Form eines Lichtschnitts oder global erfolgen. Für die Messungen im Rahmen dieser Arbeit wurden beide Verfahren verwendet.

Für den Abgleich der Strahlmodelle bietet es sich zunächst an, den Abgleich von Simulation und Experiment an Ersatzsystemen mit möglichst gut definierten Randbedingungen vorzunehmen. Aus diesem Grund werden Druckkammeruntersuchungen durchgeführt, bei denen Kammerdruck und -temperatur an die zu erwartenden Bedingungen im Motor angepasst werden, die Einspritzung jedoch in ruhendes Gas erfolgt. Für diese Untersuchungen wird in der Regel die Beleuchtung in Form eines Lichtschnitts gewählt, da man auf diese Weise quantitative Informationen über die Strahlausbreitung in einer eindeutig definierten Ebene erhält. Die gute optische Zugänglichkeit einer Einspritzkammer im Vergleich zum Motor erlaubt es dabei, optimale Beleuchtungsbedingungen einzustellen, indem der beleuchtende Lichtschnitt so ausgerichtet wird, dass er (im Falle eines Mehrlochinjektors) einen Einspritzstrahl in Längsrichtung mittig schneidet und zuvor nicht durch andere Kraftstoffstrahlen abgeschwächt wird. Die Kamera zur Erfassung des gestreuten Lichts wird im Idealfall orthogonal zur Beleuchtungsebene platziert, um eine verzerrungsfreie, scharfe Aufnahme zu gewährleisten.

Zusätzlich kann auch die Strahlausbreitung im Motorbetrieb visualisiert werden, um Rückschlüsse über die Wechselwirkung der Einspritzstrahlen mit der Zylinderinnenströmung oder Wandinteraktion ziehen zu können. Diese Messungen werden häufig mit globaler Beleuchtung durchgeführt, da Messungen mit Lichtschnitt Anforderungen an die Position der Zugänge stellen, die nur schwer zu erfüllen sind: Um zu aussagekräftigen Ergebnissen zu gelangen, wäre es auch hier erforderlich, den Lichtschnitt so einzukoppeln, dass er einen Kraftstoffstrahl in Längsrichtung schneidet, möglichst ohne zuvor durch andere Kraftstoffstrahlen abgeschwächt zu werden. Gerade bei Verwendung von Mehrlochinjektoren ist es kaum möglich, die Ausrichtung von Beleuchtung, Einspritzstrahl und Kamera optimal zu realisieren.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Strahlausbreitung sowohl in der Druckkammer als auch im Motor untersucht. Sowohl für die Druckkammer- als auch für die Motoraufnahmen wurde eine CCD-Einzelbildkamera vom Typ *ImagerCompact* der *LaVision GmbH* verwendet.

Für die Druckkammermessungen stand zur Beleuchtung ein frequenzverdoppelter Nd:YAG-Laser mit einer Wellenlänge von 532 nm zur Verfügung, dessen Licht mit einer speziellen Linsenoptik zum Lichtschnitt aufgeweitet werden kann. Das gestreute Licht konnte aufgrund der guten optischen Zugänglichkeit direkt aufgezeichnet werden.

Während der Untersuchungen am Motor wurde zur globalen Beleuchtung eine Blitzlampe verwendet, deren Licht über eine Lichtleitersonde in den Brennraum eingekoppelt wurde. Das Streulicht wurde mit einem starren Endoskop aus dem Brennraum ausgekoppelt und zur Kamera übertragen.

Aufgrund des Verzichts auf eine Hochgeschwindigkeitskamera musste der zeitliche Verlauf der Einspritzung jeweils aus Einzelbildern aus unterschiedlichen

Einspritzungen zusammengesetzt werden. Die Berechnung von phasengemittelten Bildern für jeden Zeitpunkt innerhalb der Einspritzung ermöglicht jedoch statistische Aussagen über die Strahlausbreitung.

3.3 Simulationsmodelle der Versuchsträger

Die Simulation der innermotorischen Verbrennung erfolgte im Kontext einer dreidimensionalen Strömungssimulation. Zu diesem Zweck wurden Rechennetze für beide Versuchsträger erstellt. Vernetzt wurde dabei jeweils der Brennraum sowie Teile der Einlass- und Auslasskanäle. Die Modellgrenzen an den Kanälen wurden dabei so gewählt, dass die Position der Einström- bzw. Ausströmrandbedingung etwa der Position der Niederdruckindizierung am Motor entsprach. Um eine ausreichend gute räumliche Auflösung sicherzustellen, wurde bei der Vernetzung eine Zellgröße von etwa 1 mm Kantenlänge angestrebt. Abbildung 3.6 zeigt die Netze für beide Motoren jeweils für die Kolbenstellung im unteren Totpunkt. Die Strömungssimulationen wurden mit dem kommerziellen CFD-Code *STAR-CD* von *CD-adapco* durchgeführt, der mit dem Modul *es-ice* auch ein Werkzeug zur Definition der Netzänderungen bei Kolben- und Ventilbewegung umfasst.

Die Simulationen wurden jeweils zum Zeitpunkt 180 °KW n. ZOT gestartet. Zu diesem Zeitpunkt sind bei beiden Motoren die Auslassventile bereits etwas geöffnet. Brennraum und Auslasskanal wurden daher mit heißem Abgas initialisiert, der Einlasskanal mit Luft. Die Randbedingungen an den Systemgrenzen wurden jeweils auf Basis der gemessenen Gastemperaturen und Drücke aus der Niederdruckindizierung definiert.

Zur Abbildung der kalorischen Eigenschaften der Zylinderfüllung wurden Stoffdaten von acht Spezies verwendet. Dieses Stoffmodell wird in Kapitel 4 genauer beschrieben. Die Turbulenz wurde in allen Berechnungen in Form des für industrielle Anwendungen üblichen k - ϵ -Modells mit RNG-Erweiterung modelliert [STA12].

Besondere Bedeutung für die Simulation von Ottomotoren mit Direkteinspritzung hat die Modellierung der Kraftstoffeinspritzung. Hierfür wurde ein Modellierungsansatz auf Basis der Euler-Lagrangeschen Betrachtungsweise gewählt [Sti03], bei der die kontinuierliche Phase (Gas) in einem globalen Koordinatensystem berechnet wird, die Elemente der dispersen Phase (Kraftstofftropfen) hingegen jeweils in einem mitbewegten System. Diese Herangehensweise bietet sich an, wenn der Volumenanteil der dispersen Phase vergleichsweise klein ist. Für den Primärzerfall ist diese Methode daher nicht geeignet. Stattdessen muss eine Tropfenverteilung, die als Ergebnis des Primärzerfalls betrachtet werden kann, explizit vorgegeben werden. Der Sekundärzerfall sowie die Tropfenverdampfung können dann mit der Lagrangeschen Betrachtungsweise berechnet werden. Zur Berechnung des Sekundärzerfalls wurde der vorimplementierte Ansatz von Reitz und Diwakar [Rei86] verwendet.

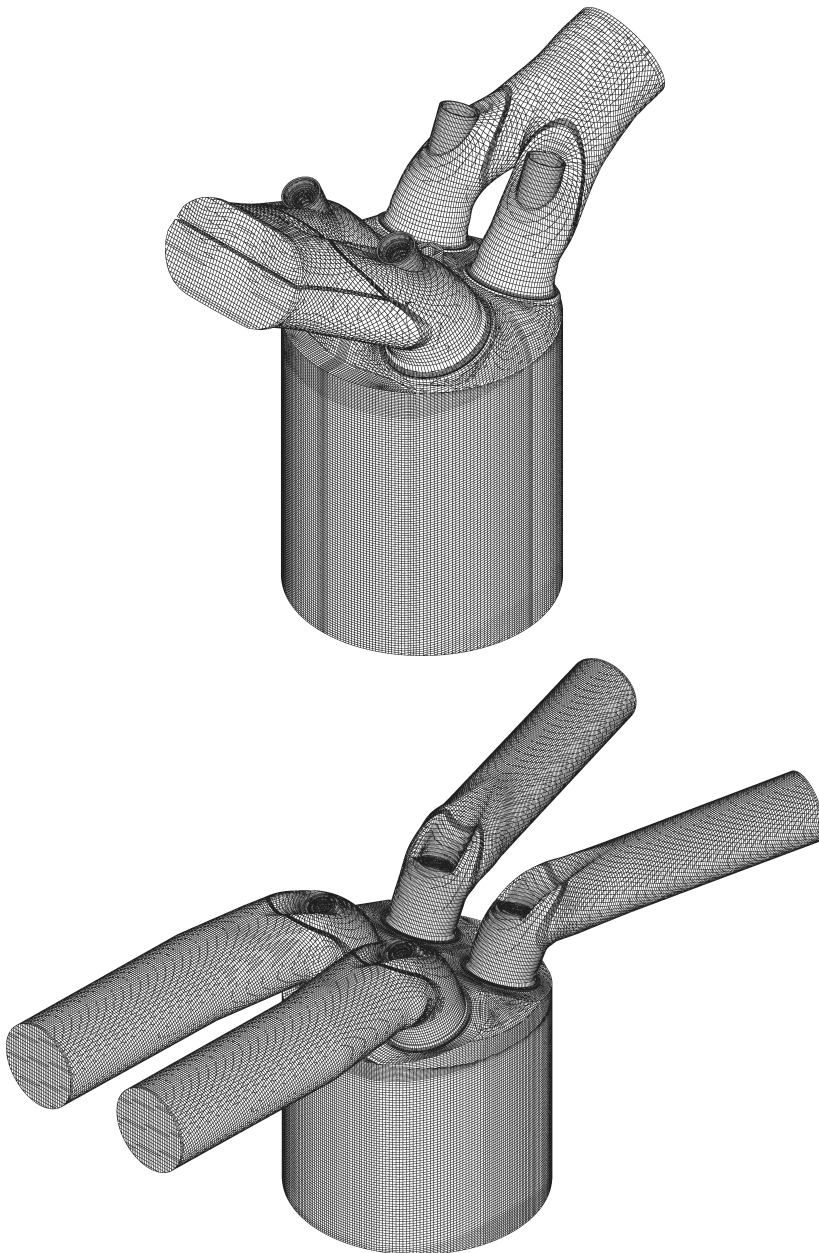


Abbildung 3.6: Vernetzung der verwendeten Versuchsmotoren für die CFD-Simulation: Vorentflammungs- (oben) und HCCI-Motor (unten).

Ein Problem bei der Simulation von Tropfenzerfall und Verdunstung ist, dass für reale Kraftstoffe praktisch keine Stoffdaten verfügbar sind. Es handelt sich um Gemische aus einer Vielzahl von Stoffen, deren Zusammensetzung stark variieren kann und im Allgemeinen unbekannt ist. Zur Darstellung der physikalischen Stoffeigenschaften für die Flüssigphase des Modellkraftstoffs wurde daher auf die Daten von iso-Oktan zurückgegriffen [Dyk99; Gil95; Som88; Wed97; Wil96; Woh97].

4 Numerische Modellierung der Verbrennung

Die Reaktionsmechanismen zur Beschreibung des Reaktionsverlaufs bei Zündung und Verbrennung von höheren Kohlenwasserstoffen enthalten, auch wenn sie bereits in reduzierter Form vorliegen (vgl. Abschnitt 2.2.2), eine große Anzahl an chemischen Spezies und Elementarreaktionen. Um die Gesamtreaktion berechnen zu können, muss ein Differentialgleichungssystem gelöst werden, das die Parameter dieser Elementarreaktionen enthält. Im Falle von Inhomogenitäten in Zustand und Zusammensetzung des Gemischs sowie in Flammen können zudem Transportprozesse signifikante Einflüsse haben. Die detaillierte Lösung des daraus resultierenden Gleichungssystems ist für einige Sonderfälle grundsätzlich möglich, für die Anwendung im Rahmen eines CFD-Codes jedoch aus Gründen der numerischen Handhabbarkeit kaum praktikabel. Stattdessen ist eine Reduktion der Modellierungstiefe erforderlich, um die chemische Reaktion mit der Strömungssimulation zu koppeln. Die Modellierungsstrategie, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurde, wird in den folgenden Abschnitten beschrieben.

4.1 Stoffmodell

Der erste Schritt bei der Modellierung reaktiver Strömungen ist die Auswahl eines geeigneten Ersatzmodells für die stoffliche Zusammensetzung des Arbeitsmediums. Dies ist zwingend erforderlich, da eine Lösung der Transportgleichungen für alle im Reaktionsmechanismus enthaltenen Spezies nur mit unverhältnismäßig hohem Rechenaufwand möglich wäre.

Ausgangspunkt dieser Modellierung ist der vollständige Zustandsvektor $\boldsymbol{\varphi}_{\text{ideal}}$, der den thermochemischen Zustand an einem Ort zu einer Zeit vollständig bestimmt. Neben den Massenbrüchen y_i aller auftretenden Spezies enthält dieser die Temperatur T sowie den Druck p :

$$\boldsymbol{\varphi}_{\text{ideal}} = (T, p, y_1, y_2, \dots, y_n)^T. \quad (4.1)$$

Für den praktischen Einsatz ist die Betrachtung einer derart großen Anzahl an Spezies nicht praktikabel, jedoch auch nicht erforderlich, da ein großer Anteil der Spezies nur in kleinen Mengen auftritt und daher vernachlässigt werden kann.

Dies ist möglich, wenn die stoffliche Zusammensetzung innerhalb des CFD-Codes ausschließlich zur Berechnung der Stoffeigenschaften zur Lösung der Transportgleichungen des Strömungsfelds verwendet wird und nicht zur Berechnung der Reaktionskinetik.

Im Rahmen des hier vorgestellten Modells erfolgt die Abbildung des Reaktionssystems durch acht Spezies: CO_2 , CO , O_2 , H_2O , CH_2O , H_2 , N_2 und Kraftstoff. Ihre Massenbrüche bilden zusammen mit Druck und Temperatur den Zustandsvektor $\boldsymbol{\varphi}$, der den lokalen Zustand des Gemischs auf der Seite des CFD-Codes beschreibt. Dieser Vektor wird im Folgenden als „vollständiger Zustandsvektor“ bezeichnet:

$$\boldsymbol{\varphi} = (T, p, y_{\text{CO}_2}, y_{\text{CO}}, y_{\text{O}_2}, y_{\text{N}_2}, y_{\text{Krst.}}, y_{\text{H}_2\text{O}}, y_{\text{H}_2}, y_{\text{CH}_2\text{O}})^T. \quad (4.2)$$

4.2 Übergeordnetes Verbrennungsmodell

Zur Simulation von Selbstzündung und Verbrennung wurde ein übergeordnetes Verbrennungsmodell eingeführt, das die Schnittstelle zwischen dem CFD-Code und den eigentlichen Verbrennungsmodellen bildet. Das Modell ist in Form eines Fortran-Moduls implementiert, das Subroutinen für unterschiedliche Arten der Verbrennung enthält. Aufgrund des modularen Programmaufbaus ist es möglich, je nach Anwendungsfall verschiedene Varianten der Verbrennungsmodelle zu nutzen. Außerdem kann das Gesamtmodell einfach um weitere Untermodelle ergänzt werden.

Der CFD-Code löst grundsätzlich die Erhaltungsgleichungen für Impuls, Energie und Gesamtmasse sowie Transportgleichungen für alle modellierten Spezies gemäß Abschnitt 4.1. Die Lösung dieser Gleichungen umfasst jedoch ausschließlich konvektive und diffusive Anteile, keine chemischen Quellterme. Um den Beitrag der chemischen Reaktion zu ermitteln, wird am Ende jedes CFD-Zeitschritts im übergeordneten Verbrennungsmodell geprüft, ob die Bedingungen für die Anwendung eines oder mehrerer der zur Verfügung stehenden Untermodelle erfüllt sind. Wenn dies der Fall ist, werden die entsprechenden Modelle aufgerufen. Als Ergebnis liefern diese einen neuen Zustandsvektor für die Zelle, in der die Reaktion stattfindet. Dieser überschreibt den bisherigen Zustandsvektor.

Um dem Umstand Rechnung zu tragen, dass die Zeitskalen der chemischen Reaktion deutlich kleiner sein können als die der Strömung, enthält das übergeordnete Verbrennungsmodell eine automatische Zeitschrittweitensteuerung, die die Größe des Zeitschritts der Strömungssimulation in Abhängigkeit vom größten auftretenden Quellterm im Rechengebiet schrittweise reduzieren kann. Dadurch soll gewährleistet werden, dass auch bei schnellen Zustandsänderungen durch chemische Reaktion die Rückwirkung auf das Strömungsfeld erhalten bleibt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zwei Untermodelle für die beiden hier untersuchten Verbrennungsarten implementiert: Die Selbstzündung wird in einem Fort-

schrittsvariablenmodell behandelt, die Flammenausbreitung in einem Flammenmodell. Beide Modelle werden in den folgenden Abschnitten beschrieben.

4.3 Fortschrittsvariablenmodell

Zur Vorausberechnung von Selbstzündvorgängen in homogenen oder näherungsweise homogenen Systemen wird ein Fortschrittsvariablenmodell verwendet. Dieses Modell wurde am Institut für Technische Thermodynamik am Karlsruher Institut für Technologie entwickelt und im Rahmen eines Kooperationsprojektes mit dem Institut für Kolbenmaschinen in den CFD-Code *STAR-CD* integriert, um Selbstzündvorgänge in einem HCCI-Motor zu simulieren [Sau08]. Das in diesem Abschnitt beschriebene Modell stellt eine Erweiterung des vorhandenen Fortschrittsvariablenmodells dar.

4.3.1 Modellierung

Das in Abschnitt 4.1 beschriebene Modell für die Zusammensetzung der reagierenden Strömung ist in dieser Form nicht geeignet, um die Reaktionskinetik direkt zu berechnen, da etwa die für den Reaktionsfortschritt wichtigen Radikale nicht abgebildet werden. Für die Modellierung der Verbrennung wird daher ein Ansatz gewählt, der auf einer Reduzierung der Dimensionalität des Problems beruht. Ausgangspunkt dieses Ansatzes ist die Überlegung, dass für reale Reaktionssysteme die Komponenten des vollständigen Zustandsvektors $\boldsymbol{\varphi}_{\text{ideal}}$ starke Abhängigkeiten aufweisen, so dass nur eine verhältnismäßig kleine Anzahl an Zuständen tatsächlich durchlaufen wird.

Um diese Zustände zu identifizieren, wird zunächst die vereinfachende Annahme getroffen, dass Zustandsänderungen im Reaktionssystem ausschließlich entlang von Reaktionstrajektorien stattfinden können, die sich anhand von detaillierter Reaktionskinetik in homogenen Reaktoren vorausberechnen lassen. Für ideal homogene Bedingungen hinsichtlich Temperatur und stofflicher Zusammensetzung ist diese Bedingung erfüllt.

Die Gesamtheit aller dieser Reaktionstrajektorien bildet dann einen niedrigdimensionalen Unterraum innerhalb des vollständigen Zustandsraums, der die zulässigen Zustände im Sinne der Modellierung enthält. Jeder Zustand in diesem Unterraum lässt sich eindeutig beschreiben [Hen09] durch den Zustand vor Reaktion – charakterisiert durch die Anfangstemperatur T_0 , den Druck p und das Verbrennungsluftverhältnis λ – sowie die Fortschrittsvariable χ , die die Position entlang der Trajektorie zwischen dem unverbrannten ($\chi = 0$) und dem verbrannten Zu-

stand ($\chi = 1$) beschreibt. Insgesamt lässt sich der Zustand des Reaktionssystems damit durch einen Vektor von reduzierten Koordinaten beschreiben:

$$\boldsymbol{\psi} = (\chi, T_0, p, \lambda)^T . \quad (4.3)$$

Die Definition der Fortschrittsvariable kann auf unterschiedliche Weise erfolgen, etwa anhand der Bogenlänge der Reaktionstrajektorie oder eines normierten Produktmassenbruchs. Allerdings erfordert die Implementierung des Fortschrittsvariablenmodells einen streng monotonen Verlauf der Fortschrittsvariable während der Reaktion, der nicht mit allen Definitionen sichergestellt ist. Für die in dieser Arbeit gezeigten Rechnungen wurde daher eine entropiebasierte Definition verwendet [Ben13]:

$$\chi = \frac{s(\mathbf{y}, T, p) - s_0(T_0, p, \lambda)}{s_{\text{eq}}(T_0, p, \lambda) - s_0(T_0, p, \lambda)} . \quad (4.4)$$

Der Referenzwert s_0 ist dabei die Entropie der Mischung vor der Reaktion, s_{eq} die Entropie im Gleichgewichtszustand am Ende der Reaktion.

Zusätzlich wird die Annahme getroffen, dass die Druckänderung während der Reaktion innerhalb des Diskretisierungszeitintervalls vernachlässigbar ist und somit die Enthalpie konstant bleibt. Die Reaktionstrajektorien, die die Mannigfaltigkeit der zulässigen Zustände bilden, können dann anhand von isobaren homogenen Reaktoren vorausberechnet werden. Unter der oben getroffenen Voraussetzung, dass Änderungen durch Reaktion ausschließlich entlang der Reaktionstrajektorien möglich sind, reduziert sich die Zustandsänderung bei Darstellung in reduzierten Koordinaten auf eine Änderung der Fortschrittsvariable. Zur Berechnung des Reaktionsfortschritts innerhalb eines Diskretisierungszeitschritts reicht es daher aus, die Änderungsrate der Fortschrittsvariable, die ebenfalls vorab berechnet werden kann, über das Zeitintervall zu integrieren.

Unter der Maßgabe einer für kurze Zeitintervalle zumindest näherungsweise isobaren Reaktion unter (lokal) homogenen Bedingungen lässt sich der Reaktionsfortschritt somit durch Zeitintegration der tabellierten Änderungsrate bei ansonsten konstantem Zustandsvektor ermitteln. Die Behandlung von Abweichungen von dieser Vorgabe, wie sie in realen Motoren auftreten, wird im folgenden Abschnitt beschrieben.

4.3.2 Implementierung

Zur Verwendung des beschriebenen Modells im Kontext der CFD-Simulation sind zunächst weitere Anpassungen erforderlich. Das Modell ist zwar in der Lage, Zustandsänderungen durch chemische Reaktion zu beschreiben, allerdings wird dafür eine Formulierung in generalisierten Koordinaten verwendet, die in der Strömungssimulation nicht direkt zur Verfügung stehen, da die Lösung der Erhaltungsgleichungen für das Strömungsfeld in physikalischen Koordinaten erfolgt.

Die Umrechnung zwischen beiden Koordinatensätzen ist Gegenstand der folgenden Abschnitte.

Tabellierung

Wie bereits beschrieben, basiert die Simulation der Selbstzündung auf der Vorausberechnung von Zündverläufen in homogenen Reaktoren [Maa88]. Um die Ergebnisse dieser Rechnungen im Verbrennungsmodell nutzen zu können, müssen sie in Form von Tabellen abgespeichert werden [Hen07; Ben13]. Dazu werden innerhalb des Tabellierungsbereichs zunächst Stützstellen für die Anfangswerte T_0 , p und λ festgelegt. Für alle Kombinationen aus diesen Werten werden dann Zündverläufe berechnet. Aus den Ergebnissen können durch Anwendung der Definition in Gleichung 4.4 jeweils Verläufe für die Fortschrittsvariable χ berechnet werden. Da der Wert der Fortschrittsvariable für jede Zündung monoton ansteigt, können die berechneten Zeitverläufe in Verläufe über der Fortschrittsvariable umgerechnet werden. Diese werden dann als Tabelle gespeichert.

Diese Tabelle umfasst einerseits die Änderungsrate der Fortschrittsvariable als Funktion der Anfangsbedingungen und des aktuellen Werts der Fortschrittsvariable, andererseits auch den vollständigen Zustandsvektor für jeden dieser Zustände, also die Beschreibung der Reaktionsmannigfaltigkeit α :

$$\varphi = \alpha(\psi_1, \psi_2, \dots), \quad (4.5)$$

$$\dot{\chi} = f(\psi_1, \psi_2, \dots). \quad (4.6)$$

Die Umrechnung von reduzierten Koordinaten in vollständige Koordinaten ist somit durch die Tabellierung gegeben.

Allerdings sind bei der Erstellung der Tabelle noch weitere Aspekte zu berücksichtigen. So erfordert die mehrdimensionale lineare Interpolation die Verwendung einer äquidistanten Verteilung der Gitterpunkte in der Tabelle. Da der Wertebereich des Verbrennungsluftverhältnisses $0 < \lambda < \infty$ unter dieser Maßgabe ungeeignet ist, wird in der Tabelle stattdessen die Ersatzgröße η verwendet:

$$\eta = \frac{\xi_{St}}{\xi + \xi_{St}}. \quad (4.7)$$

$$\xi = \frac{y_K}{y_K + y_L} = \frac{y_K}{y_{FG}}; \quad \xi_{St} = \left(\frac{y_K}{y_{FG}} \right)_{St} = \frac{1}{1 + L_{St}}. \quad (4.8)$$

In dieser Definition ist ξ der Kraftstoffmassenbruch ohne Verbrennung y_K , normiert auf den lokalen Frischgemischanteil y_{FG} . Dieser setzt sich wiederum aus den Massenbrüchen von Luft, also Sauerstoff und Stickstoff, und Kraftstoff zusammen. Unter stöchiometrischen Bedingungen nimmt ξ den Wert ξ_{St} an, der nur vom stöchiometrischen Luftbedarf L_{St} des Kraftstoffs abhängt. Der Wertebereich ist damit eingeschränkt auf $0 < \eta \leq 1$, Stöchiometrie liegt bei $\eta = 0,5$ vor.

Aus Gründen der geeigneteren Diskretisierung werden auch andere Eingangsgrößen in modifizierter Form verwendet: die Temperatur in der Form $1000\text{ K}/T$ und der Druck in logarithmierter Form. Damit hat der tatsächlich verwendete reduzierte Zustandsvektor die Form:

$$\boldsymbol{\psi} = \left(\chi, \frac{1000\text{ K}}{T_0}, \log\left(\frac{p}{\text{bar}}\right), \eta \right)^T. \quad (4.9)$$

Außerdem sind weitere Korrekturen erforderlich, die daraus resultieren, dass der tabellierte vollständige Zustandsvektor nicht alle Spezies berücksichtigt, die in der Vorausberechnung vorkommen. So ergibt sich aus dem Wegfall zahlreicher Spezies, dass die Summe der Speziesmassenbrüche nach Einsetzen der Reaktion kleiner ist als eins:

$$\sum_{i=1}^8 y_i < 1. \quad (4.10)$$

Daraus folgt unmittelbar, dass sich auch die Gesamthalpie, die für die isobare Reaktion konstant sein müsste, im Reaktionsverlauf ändert, was zur Folge hat, dass auch die Temperaturen im reagierenden Gemisch nicht richtig berechnet werden können.

$$\sum_{i=1}^8 h_i(T) \cdot y_i(\chi) \neq \sum_{i=1}^8 h_i(T = T_0) \cdot y_i(\chi = 0). \quad (4.11)$$

Schließlich ist aufgrund der begrenzten Speziesanzahl auch die Elementmassenerhaltung während der Reaktion nicht erfüllt.

Eine entsprechende Tabellenkorrektur, bei der die Speziesmassenbrüche derart korrigiert werden, dass die oben genannten Mängel bestmöglich beseitigt werden, kann mittels numerischer Optimierungsmethoden vorgenommen werden [Wen07]. Dadurch gehen zwar die Informationen über die tatsächliche Gaszusammensetzung verloren, dafür liefert die Tabelleninterpolation jedoch physikalisch sinnvolle Ergebnisse, die zudem eine korrekte Temperaturberechnung ermöglichen.

Schwieriger als die Umrechnung von reduzierten in vollständige Koordinaten ist der umgekehrte Weg. Dies liegt daran, dass eine direkte Umrechnung nur für den unverbrannten Zustand möglich ist. Zur Ermittlung des reduzierten Zustandsvektors zu späteren Zeitpunkten während der Reaktion gibt es zwei Möglichkeiten.

Transportansatz

Die erste Möglichkeit wird hier als Transportansatz bezeichnet. Dieser Ansatz wurde bereits in älteren Arbeiten eingesetzt [Hen09]. Das Problem der Umrechnung

von vollständigen in reduzierte Koordinaten wird hier dadurch gelöst, dass neben den acht Spezies, die das Verbrennungssystem abbilden, acht weitere Skalare eingeführt werden, die die Zusammensetzung ohne chemische Reaktion abbilden. Im CFD-Code werden diese als passive Skalare definiert, so dass zwar Transportgleichungen für sie gelöst werden, sie aber keinen Einfluss auf die Kalorik des Arbeitsmediums haben. Zusätzlich wird eine Transportgleichung für den konvektiven und diffusiven Transport der Fortschrittsvariable gelöst.

Aus der so verfügbaren Zusammensetzung des unverbrannten Gemischs und der Gesamtenthalpie kann für jede Zelle die Temperatur vor Verbrennung sowie das Verbrennungsluftverhältnis berechnet werden. Der Druck wird direkt der CFD-Berechnung entnommen. Zusammen mit dem Wert der ebenfalls transportierten Fortschrittsvariable ist damit der Zustand des Reaktionssystems in reduzierten Koordinaten definiert. Diese Methode basiert auf der Annahme, dass die Fortschrittsvariable im Strömungsfeld wie eine zusätzliche Spezies behandelt werden kann, für die eine zusätzliche Transportgleichung gelöst wird. Für homogene Bedingungen ist diese Annahme gerechtfertigt, da keine Gradienten im Skalarfeld auftreten. Diffusive Mischungsprozesse hingegen werden nur unzureichend abgebildet. Bei nicht perfekt homogenen Gemischen beeinflusst diffusiver Transport die Zusammensetzung des Gemischs. Bei Verwendung des Transportansatzes spiegelt sich diese Änderung in einer Änderung der angenommenen Anfangstemperatur vor Verbrennung und des Verbrennungsluftverhältnis wider. Die Fortschrittsvariable selbst wird als Skalar konvektiv und diffusiv mit dem umgebenden Strömungsfeld transportiert. Dass dies zu falschen Ergebnissen führen kann, lässt sich an einem einfachen Beispiel verdeutlichen: Für einen Fall, bei dem das Abgas ($\chi = 1$) mit reiner Luft ($\chi = 0$) mischt, würde sich nicht nur das Luft-Kraftstoff-Verhältnis ändern, sondern auch der Wert der Fortschrittsvariable. Dies würde einer Umkehr der bereits abgeschlossenen Reaktion entsprechen.

Projektionsansatz

Es wurde daher ein neuer Ansatz implementiert, der die Berechnung des reduzierten aus dem vollständigen Zustandsvektor verbessern soll. Anstatt zu jedem Zeitpunkt den reduzierten Zustandsvektor aus dem vollständigen zu berechnen, werden beide zu Beginn der Rechnung, wenn der Abgleich noch auf einfache Weise möglich ist, initialisiert und danach werden nur noch Änderungen in beiden Zustandsräumen berechnet und summiert.

Um die Zustandsänderung in reduzierten Koordinaten berechnen zu können, muss zunächst die Änderung im physikalischen Zustandsraum ermittelt werden. Zur Umrechnung in reduzierte Koordinaten sind dann zwei Schritte erforderlich: Eine Projektion und eine Transformation. Der konvektive und diffusive Transport, den der CFD-Code berechnet, kann prinzipiell zu einer beliebigen Zustandsänderung $\Delta\varphi$ in einer Zelle führen. Das Fortschrittsvariablenmodell unterstellt jedoch,

dass nur Änderungen innerhalb des tabellierten Unterraums, also tangential zur Reaktionsmannigfaltigkeit, zulässig sind. Die beliebige Zustandsänderung in vollständigen Koordinaten muss daher zunächst auf die Mannigfaltigkeit projiziert werden, bevor sie anschließend in reduzierte Koordinaten transformiert werden kann. Diese beiden Operationen werden in den folgenden Abschnitten genauer beschrieben.

Projektion Die erste Möglichkeit, beliebige Zustandsänderungen auf die gegebene Reaktionsmannigfaltigkeit zu projizieren, ist die orthogonale Projektion. Die entsprechende Projektionsmatrix \mathbf{P}_{orth} kann grundsätzlich als das Produkt aus der lokalen Jacobimatrix $\mathbf{J}_{\alpha}^{\psi}$ der Mannigfaltigkeit α bezüglich des reduzierten Zustandsvektors ψ und ihrer Pseudoinversen $\mathbf{J}_{\alpha}^{\psi+}$ berechnet werden [Sch08]:

$$\mathbf{P}_{\text{orth}} = \mathbf{J}_{\alpha}^{\psi} \cdot \mathbf{J}_{\alpha}^{\psi+} . \quad (4.12)$$

Die Verwendung der orthogonalen Projektion ist allerdings nicht physikalisch gerechtfertigt. Alternativ kann daher auch eine schräge Projektion verwendet werden. Die Richtung der Projektion kann in diesem Fall durch die Angabe von Nebenbedingungen gesteuert werden. Diese werden zunächst zu einer vektorwertigen Funktion zusammengefasst:

$$\mathbf{c}(\varphi_1, \varphi_2, \dots) = \text{const.} \quad (4.13)$$

Aus diesem Vektor der Nebenbedingungen wird zunächst die Hilfsmatrix \mathbf{J}_c^{φ} als Jacobimatrix bezüglich der vollständigen Koordinaten φ berechnet:

$$\mathbf{J}_c^{\varphi} = \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \varphi} . \quad (4.14)$$

Daraus kann mit Hilfe der Jacobimatrix der Mannigfaltigkeit die Projektionsmatrix berechnet werden [Sch08]:

$$\mathbf{P}_{\text{obl}} = \mathbf{J}_{\alpha}^{\psi} \cdot \left(\mathbf{J}_c^{\varphi} \cdot \mathbf{J}_{\alpha}^{\psi} \right)^+ \cdot \mathbf{J}_c^{\varphi} . \quad (4.15)$$

Aus der Definition der Projektionsmatrix ist direkt ersichtlich, dass die Anzahl der möglichen Nebenbedingungen der Anzahl der Koordinaten im reduzierten Zustandsvektor ψ entspricht.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden zunächst die Erhaltung der Elementmassen von Kohlenstoff, Sauerstoff und Wasserstoff als Nebenbedingungen verwendet:

$$\frac{y_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} \cdot 1 + \frac{y_{\text{CO}}}{M_{\text{CO}}} \cdot 1 + \frac{y_{\text{Krst.}}}{M_{\text{Krst.}}} \cdot c_{\text{Krst.}} + \frac{y_{\text{CH}_2\text{O}}}{M_{\text{CH}_2\text{O}}} \cdot 1 = \text{const.} \quad (4.16)$$

$$\frac{y_{\text{Krst.}}}{M_{\text{Krst.}}} \cdot h_{\text{Krst.}} + \frac{y_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{H}_2\text{O}}} \cdot 2 + \frac{y_{\text{H}_2}}{M_{\text{H}_2}} \cdot 2 + \frac{y_{\text{CH}_2\text{O}}}{M_{\text{CH}_2\text{O}}} \cdot 2 = \text{const.} \quad (4.17)$$

$$\frac{y_{\text{CO}_2}}{M_{\text{CO}_2}} \cdot 2 + \frac{y_{\text{CO}}}{M_{\text{CO}}} \cdot 1 + \frac{y_{\text{O}_2}}{M_{\text{O}_2}} \cdot 2 + \frac{y_{\text{Krst.}}}{M_{\text{Krst.}}} \cdot o_{\text{Krst.}} + \frac{y_{\text{H}_2\text{O}}}{M_{\text{H}_2\text{O}}} \cdot 1 + \frac{y_{\text{CH}_2\text{O}}}{M_{\text{CH}_2\text{O}}} \cdot 1 = \text{const.} \quad (4.18)$$

$c_{\text{Krst.}}$, $h_{\text{Krst.}}$ und $o_{\text{Krst.}}$ sind die stöchiometrischen Koeffizienten aus der theoretischen Summenformel des Kraftstoffs. Somit ist sichergestellt, dass bei der Projektion Änderungen im lokalen Verbrennungsluftverhältnis erhalten bleiben.

Da für die Tabellierung Reaktionen unter isobaren Bedingungen betrachtet werden, kann als weitere Bedingung die Erhaltung der Gesamthalpie der Mischung eingeführt werden:

$$H = \sum_i y_i \cdot h_i(T) = \text{const.} \quad (4.19)$$

In der Jacobimatrix erscheinen die Ableitungen der linken Gleichungsseite nach der Temperatur und den Speziesmassenbrüchen:

$$\frac{\partial H}{\partial T} = \sum_i y_i \cdot \frac{\partial h_i(T)}{\partial T} = \sum_i y_i \cdot c_{p,i}(T). \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial H}{\partial y_i} = h_i(T). \quad (4.21)$$

Somit stehen vier Nebenbedingungen zur Verfügung, die zur Definition der Projektionsmatrix verwendet werden könnten.

Auf die Verwendung der Erhaltung der Wasserstoff-Atomzahl kann jedoch verzichtet werden, da sie eine redundante Information darstellt. Da das Verhältnis von Kohlenstoff- und Wasserstoffatomzahl ausschließlich vom verwendeten Kraftstoff abhängt, der für die gesamte Tabelle unverändert bleibt, reicht eine der Informationen aus. Damit kann als weitere Nebenbedingungen die Behandlung von Druckänderungen aufgenommen werden.

Die Jacobimatrix der Vektorgleichung der Nebenbedingungen bezüglich Zustandsvektor $\boldsymbol{\varphi}$ lautet damit:

$$\mathbf{J}_C^\varphi = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \frac{1}{M_{\text{CO}_2}} & 0 & \frac{1}{M_{\text{CO}}} & 0 & \frac{c_{\text{Krst.}}}{M_{\text{Krst.}}} & 0 & 0 & \frac{1}{M_{\text{CH}_2\text{O}}} \\ 0 & 0 & \frac{2}{M_{\text{CO}_2}} & \frac{2}{M_{\text{O}_2}} & \frac{2}{M_{\text{CO}}} & 0 & \frac{o_{\text{Krst.}}}{M_{\text{Krst.}}} & \frac{1}{M_{\text{H}_2\text{O}}} & 0 & \frac{1}{M_{\text{H}_2\text{O}}} \\ \sum_i y_i c_{p,i} & 0 & h_{\text{CO}_2} & h_{\text{O}_2} & h_{\text{CO}} & h_{\text{N}_2} & h_{\text{Krst.}} & h_{\text{H}_2\text{O}} & h_{\text{H}_2} & h_{\text{CH}_2\text{O}} \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Ein Problem bei der Definition der Nebenbedingungen besteht darin, dass sich die Wertebereiche der verwendeten Größen teilweise um mehrere Größenordnungen unterscheiden. Dieses Problem lässt sich etwas entschärfen, indem bereits während der Tabellenerstellung die Ausgangsgrößen in skaliert Form verwendet

werden. Der Zustandsvektor $\boldsymbol{\varphi}$ enthält dann nicht mehr physikalische Größen, sondern skalierte Größen:

$$y_i = C_{y_i} \cdot \varphi_{y_i}, \quad (4.22)$$

$$T = C_T \cdot \varphi_T. \quad (4.23)$$

Dies muss auch bei der Berechnung der Jacobimatrix der Nebenbedingungen berücksichtigt werden:

$$\frac{\partial m_C}{\partial \varphi_{y_i}} = \frac{\partial m_C}{\partial y_i} \frac{\partial y_i}{\partial \varphi_{y_i}} = C_{y_i} \frac{\partial m_C}{\partial y_i}, \quad (4.24)$$

$$\frac{\partial m_O}{\partial \varphi_{y_i}} = \frac{\partial m_O}{\partial y_i} \frac{\partial y_i}{\partial \varphi_{y_i}} = C_{y_i} \frac{\partial m_O}{\partial y_i}, \quad (4.25)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi_{y_i}} = \frac{\partial H}{\partial y_i} \frac{\partial y_i}{\partial \varphi_{y_i}} = C_{y_i} \frac{\partial H}{\partial y_i} = C_{y_i} h_i(T), \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial H}{\partial \varphi_T} = \frac{\partial H}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial \varphi_T} = C_T \sum_i y_i \frac{\partial h_i}{\partial T} = C_T \sum_i y_i c_{p,i}(T). \quad (4.27)$$

Unabhängig von der Wahl der Projektion kann die projizierte Zustandsänderung $\Delta\boldsymbol{\varphi}^{\parallel}$ in vollständigen Koordinaten berechnet werden:

$$\Delta\boldsymbol{\varphi}^{\parallel} = \mathbf{P}\Delta\boldsymbol{\varphi}. \quad (4.28)$$

\mathbf{P} kann dabei entweder die Matrix für orthogonale Projektion \mathbf{P}_{orth} (siehe Gleichung 4.12) oder die für schräge Projektion \mathbf{P}_{obl} (siehe Gleichung 4.15) sein.

Transformation Anschließend wird die projizierte Zustandsänderung von vollständigen in reduzierte Koordinaten transformiert:

$$\Delta\boldsymbol{\psi} = \mathbf{J}_{\alpha}^{\varphi+} \Delta\boldsymbol{\varphi}^{\parallel}. \quad (4.29)$$

Einsetzen der Gleichungen 4.12 und 4.28 liefert für die Transformation bei Verwendung der orthogonalen Projektion insgesamt:

$$\Delta\boldsymbol{\psi} = \mathbf{J}_{\alpha}^{\varphi+} \mathbf{P}_{\text{orth}} \Delta\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{J}_{\alpha}^{\varphi+} \cdot \mathbf{J}_{\alpha}^{\varphi} \cdot \mathbf{J}_{\alpha}^{\varphi+} \Delta\boldsymbol{\varphi}. \quad (4.30)$$

Gemäß Definition gilt für die Pseudoinverse die Moore-Penrose-Bedingung:

$$\mathbf{A}^+ \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+. \quad (4.31)$$

Damit kann die explizite Berechnung der Projektionsmatrix \mathbf{P} für orthogonale Projektion entfallen:

$$\Delta\boldsymbol{\psi} = \mathbf{J}_{\alpha}^{\varphi+} \Delta\boldsymbol{\varphi}. \quad (4.32)$$

Integration

Sowohl die Transport- als auch die Projektionsmethode liefern als Ergebnis den Zustandsvektor nach dem CFD-Transportschritt (Konvektion und Diffusion) in reduzierten Koordinaten. Dieser Zustandsvektor kann verwendet werden, um mittels Interpolation aus der Tabelle den chemischen Quellterm zu bestimmen. Die Änderung des Zustands wird ermittelt, indem die Änderungsrate $\dot{\chi}$ der Fortschrittsvariable über den CFD-Zeitschritt integriert wird.

Grundsätzlich lässt sich die chemische Reaktion unter den angenommenen Voraussetzungen als Anfangswertproblem auffassen:

$$\dot{\chi}(t) = f(\boldsymbol{\psi}); \quad \chi(t_0) = 0. \quad (4.33)$$

Während der Integration ändert sich ausschließlich die Komponente des Zustandsvektors $\boldsymbol{\psi}$, die den Wert der Fortschrittsvariablen χ angibt:

$$\dot{\chi}(t) = f(\chi) \quad (4.34)$$

Dieser Funktionszusammenhang ist in der Tabelle gegeben, so dass das Anfangswertproblem mittels numerischer Integration gelöst werden kann. Dabei kommt das *Heun-Verfahren* zum Einsatz, ein einfaches Einschrittverfahren aus der Klasse der *Runge-Kutta-Verfahren* [Sch06]. Bei diesem Verfahren wird zunächst in einem expliziten Integrationsschritt eine vorläufige Lösung $\chi^P(t_{k+1})$ berechnet. An dieser Stelle wird die Änderungsrate $\dot{\chi}(\chi^P(t_{k+1}))$ ermittelt. Aus dieser und der aktuellen Änderungsrate $\dot{\chi}(\chi(t_k))$ wird dann durch Mittelung die Änderungsrate für den eigentlichen Integrationsschritt berechnet:

$$\chi^P(t_{k+1}) = \chi(t_k) + (t_{k+1} - t_k) \cdot \dot{\chi}(\chi(t_k)), \quad (4.35)$$

$$\chi(t_{k+1}) = \chi(t_k) + \frac{1}{2} (t_{k+1} - t_k) \cdot [\dot{\chi}(\chi(t_k)) + \dot{\chi}(\chi^P(t_{k+1}))]. \quad (4.36)$$

Um den kurzen chemischen Zeitskalen Rechnung zu tragen, wird jeder CFD-Zeitschritt Δt_{CFD} in mehrere Chemie-Zeitschritte Δt_{chem} unterteilt. Zur Verbesserung von Genauigkeit und Effizienz der Integration wird eine automatische Anpassung dieser Chemie-Zeitschrittweite durchgeführt. Dazu wird nach jedem Integrationschritt die berechnete Änderung der Fortschrittsvariable mit dem Abstand der Gitterpunkte in der Tabelle verglichen. Übersteigt die Änderung einen vorgegebenen Bruchteil der Gitterweite (in den hier gezeigten Rechnungen $1/8$), wird die Integration mit reduzierter Zeitschrittweite wiederholt.

Auf ähnliche Weise wird außerdem die Zeitschrittweite des CFD-Lösers in Abhängigkeit von der Dynamik der Reaktion reduziert, sodass die maximale Änderung des thermodynamischen Zustands aufgrund von chemischer Reaktion innerhalb eines Zeitschritts auf kleine Werte beschränkt bleibt.

Berücksichtigung von Restgas

Vorhandenes Restgas aus dem vorangegangenen Zyklus wird als Inertgas behandelt. Der Zellinhalt wird in einen Frischgemisch- und einen Restgasanteil zerlegt, wovon nur der Frischgemischanteil (Sauerstoff, entsprechende Menge Stickstoff und Kraftstoff) für die Berechnung der chemischen Reaktionskinetik herangezogen wird. Der Druck wird durch die Summe der Partialdrücke der Frischgemischkomponenten ersetzt und die Zusammensetzung des Frischgemischs auf den Wert $\sum y_i = 1$ normiert. Als Temperatur wird die Zelltemperatur verwendet.

4.4 Flammenmodell

Das Flammenmodell setzt auf das in Abschnitt 4.3 beschriebene 8-Spezies-Modell auf und wird – ebenso wie das Modell für die Selbstzündung – vom übergeordneten Verbrennungsmodell aufgerufen, sobald die Bedingungen für Flammenausbreitung gegeben sind. Diese kann entweder durch Fremdzündung oder durch lokale Selbstzündung eingeleitet werden.

4.4.1 Modellierung

Im Kontext der CFD-Simulation ist es nicht möglich, die Flammenstruktur räumlich und zeitlich aufgelöst zu betrachten. Der Grund hierfür liegt in der verglichen mit den Flammenskalen groben räumlichen Diskretisierung der Brennraumgeometrie und der Mittelwertbetrachtung, die aus der Turbulenzmodellierung resultiert. Unter diesen Bedingungen können die großen Gradienten, die an der Flammenfront auftreten, nicht richtig abgebildet werden, weshalb auch die Transportprozesse, die die Flammenausbreitung dominieren, nicht berechnet werden können. Im hier verwendeten Verbrennungsmodell wird die Flamme daher in Form eines Level-Set-Ansatzes berücksichtigt, bei dem die Flamme als Diskontinuität betrachtet wird, deren Bewegung mit einer zusätzlichen skalaren Transportgleichung berechnet wird.

Die Modellierung der Flammenausbreitung basiert auf den Arbeiten von Weller [Wel93; Wel94]. Das darin beschriebene Modell beschreibt die Flammenausbreitung zunächst anhand von zwei Größen, der Regressvariable b und der Flammenfaltung Ξ (*wrinkling factor*), für die jeweils eine Transportgleichung hergeleitet wird. Unter der Annahme lokalen Gleichgewichts von Produktion und Abbau der Flammenfaltung kann jedoch auf die Lösung der zweiten Transportgleichung verzichtet werden. Das resultierende Modell wird als Weller-Eingleichungsmodell

bezeichnet. Die Transportgleichung für die Regressvariable nimmt darin die Form einer diffusiven G -Gleichung an:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{b}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{v}} \tilde{b}) - \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{D}_b \nabla \tilde{b}) = -\rho_{uv} \Xi_{eq} s_L |\nabla \tilde{b}|. \quad (4.37)$$

4.4.2 Implementierung

Die Transportterme auf der linken Seite von Gleichung 4.37 können als skalare Transportgleichung im Rahmen der CFD-Simulation mitgelöst werden. Zur Formulierung des Quellterms auf der rechten Seite müssen jedoch zunächst der Faltungsparameter Ξ_{eq} und die laminare Flammengeschwindigkeit s_L berechnet werden. Aus der Betrachtung des Quellterms wird unmittelbar die Definition des Faltungsparameters Ξ_{eq} als Verhältnis der turbulenten zur laminaren Flammengeschwindigkeit ersichtlich:

$$\Xi_{eq} = \frac{s_T}{s_L}. \quad (4.38)$$

Die laminare Flammengeschwindigkeit kann gemäß Gleichung 2.14 aus der Flammendicke l_F und der Flammenzeitskala t_F berechnet werden:

$$s_L = \frac{l_F}{t_F}. \quad (4.39)$$

Die Flammendicke l_F kann aus der Wärmeleitfähigkeit λ , der spezifischen Wärmekapazität c_p und der laminaren Flammengeschwindigkeit abgeschätzt werden [Göt92]:

$$l_F = \frac{\lambda_F}{c_{p,F} \rho_{uv} s_L}. \quad (4.40)$$

Mit dem Index F werden in diesem Zusammenhang Werte in der inneren Flammenschicht bezeichnet, der Index uv kennzeichnet den unverbrannten Zustand. Für die laminare Flammengeschwindigkeit ergibt sich daraus der Zusammenhang:

$$s_L = \sqrt{\frac{\lambda_F}{c_{p,F} \rho_{uv} t_F}}. \quad (4.41)$$

Da die Wärmeleitfähigkeit λ nur schwer zugänglich ist, wird die Definition der Prandtlzahl Pr zur Umformung der Gleichung herangezogen. Diese gibt das Verhältnis von kinematischer Viskosität ν und Temperaturleitfähigkeit $a = \lambda/(\rho c_p)$ an:

$$Pr = \frac{\nu}{a} = \frac{\nu \rho c_p}{\lambda}. \quad (4.42)$$

Gleichung 4.41 kann damit umgeformt werden zu:

$$s_L = \sqrt{\frac{\nu_F \rho_F}{Pr_F t_F \rho_{uv}}}. \quad (4.43)$$

Die Prandtl-Zahl Pr kann unter Ausnutzung der Näherung nach Eucken abgeschätzt werden [Ber06]. Diese besagt:

$$\frac{\lambda}{\nu \rho c_V} \approx 1 + \frac{9(\kappa - 1)}{4}. \quad (4.44)$$

Durch Einsetzen der Näherungsgleichung in die Definition der Prandtl-Zahl (Gleichung 4.42) lässt sich auch diese abschätzen:

$$Pr = \frac{4\kappa}{9\kappa - 5}. \quad (4.45)$$

Für die Berechnung der laminaren Flammgeschwindigkeit werden neben der chemischen Zeitskala t_F somit die kinematische Viskosität ν , die Dichte ρ und der Isentropenexponent κ benötigt. Alle diese Stoffwerte können vorab berechnet und in tabellierter Form bereitgestellt werden.

Als letzte Unbekannte verbleibt letztlich die Flammenzeitskala. Diese kann aus vorab berechneten REDIM-Tabellen (*Reaction Diffusion Manifold*) abgelesen werden. Diese Tabellen sind ähnlich aufgebaut wie die, die für das Selbstzündungsmodell verwendet werden. Anders als diese beschreiben sie allerdings Reaktionssysteme, in denen neben der chemischen Reaktion auch diffusive Mischungsprozesse auftreten [Maa11]. Die Flammenzeitskala kann abgeschätzt werden, indem für den lokalen Gemischzustand die Inverse der maximalen Änderungsrate der REDIM-Fortschrittsvariable gebildet wird.

Auf diese Weise lässt sich für jede Zelle des Brennraumnetzes die lokale laminare Flammgeschwindigkeit in Abhängigkeit von Druck, Temperatur und Verbrennungsluftverhältnis berechnen.

Als weitere wichtige Einflussgröße bei der Berechnung der Flammenausbreitung im Motor muss außerdem rückgehaltenes oder rückgeführtes Restgas berücksichtigt werden. Dazu wurde ein Ansatz nach Meier [Mei97] verwendet:

$$s_L(p, T, \lambda, y_{AGR}) = \left(1 - \frac{y_{AGR}}{\lambda_H}\right)^n \cdot s_L(p, T, \lambda = \lambda_{\text{äq}}). \quad (4.46)$$

Der Exponent n liegt dabei im Bereich $1 < n < 2$ und wurde nach Meier auf $n = 1,5$ gesetzt. Bei der Berechnung des verwendeten Hilfs-Verbrennungsluftverhältnisses λ_H wird eine Fallunterscheidung getroffen:

$$\lambda_H = \begin{cases} 1,0 & \text{für } \lambda \leq 1 \\ \lambda & \text{für } \lambda > 1 \end{cases}. \quad (4.47)$$

Das äquivalente Luftverhältnis $\lambda_{\text{äq}}$ ist definiert als:

$$\lambda_{\text{äq}} = \frac{\lambda}{1 - y_{AGR}}. \quad (4.48)$$

Zusätzlich zu diesen Einflüssen wird die laminare Flammgeschwindigkeit durch Flammenstreckung beeinflusst. In diesem Fall sind je nach Verbrennungsluftverhältnis die Diffusionseigenschaften des im Mangel vorhandenen Reaktanden ausschlaggebend dafür, ob sich die Geschwindigkeit erhöht oder verringert. Entscheidend ist das Verhältnis der Temperaturleitfähigkeit a zum Diffusionskoeffizienten D , das als Lewis-Zahl Le bezeichnet wird:

$$Le = \frac{a}{D} = \frac{\lambda}{\rho \cdot c_p \cdot D}. \quad (4.49)$$

Für Lewiszahlen $Le > 1$ nimmt die Flammgeschwindigkeit mit wachsender Streckrate ab, für $Le < 1$ zu. Mit wachsender Streckrate wird die Flamme dünner, die Gradienten steiler. Bei $Le < 1$ kompensiert die stärkere Diffusion des im Mangel vorhandenen Reaktanden den erhöhten Wärmeabfluss, so dass die Reaktivität sich insgesamt erhöht, bei $Le > 1$ sind die Verhältnisse genau umgekehrt [Mei97].

Zur quantitativen Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Flammenstreckung und laminarer Flammgeschwindigkeit wurde ein Ansatz nach Law verwendet [Law88]:

$$I_0 = \frac{s_L}{s_L^0} = 1 - \frac{Ka}{Le} + \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \cdot Ka \cdot \frac{T_a}{2T_{ad}}. \quad (4.50)$$

Zahlenwerte für die Aktivierungstemperatur T_a , die adiabate Verbrennungstemperatur T_{ad} und die Lewiszahl Le stehen für unterschiedliche Verbrennungsluftverhältnisse zur Verfügung [Abd84]. Die fehlende Karlovitzzahl Ka , die das Verhältnis der Flammenzeitskala zur Kolmogorov-Zeitskala beschreibt, kann aus der Flammendicke l_F und der laminaren Flammgeschwindigkeit s_L berechnet werden [Law88]:

$$Ka = \frac{K \cdot l_F}{s_L}. \quad (4.51)$$

Zur Berechnung des Streckungsfaktors K wurde ein Ansatz nach Taylor verwendet [Tay35]:

$$K = \sqrt{\frac{\varepsilon}{15\nu}}. \quad (4.52)$$

In dieser Formel steht ε für die Dissipationsrate der Turbulenz, ν für die kinematische Viskosität.

Anhand dieser Größen lässt sich die turbulente Flammgeschwindigkeit berechnen. Für freie Flammen gilt nach Herweg et al. [Her92]:

$$\frac{s_T}{s_L} = I_0 + I_0^{1/2} \cdot \left(\frac{v'}{v' + s_L} \right)^{1/2} \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{r}{l}\right) \right]^{1/2} \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{v' + s_L}{l} \cdot t\right) \right]^{1/2} \cdot \left(\frac{v'}{s_L} \right)^{5/6}. \quad (4.53)$$

In die Berechnung fließt neben I_0 (siehe Gleichung 4.50) auch das integrale Längenmaß der Turbulenz l , der Radius des Flammenkerns r und die seit der Zündung verstrichene Zeit t sowie die Turbulenzintensität v' ein.

4.5 Eingangsdaten für den Einsatz des Modells

Für alle Rechnungen, die in den nächsten Kapiteln gezeigt werden, wurde ein semidetaillierter Mechanismus für einen TRF-Kraftstoff (*Toluene Reference Fuel*) verwendet [And09]. Dieser umfasst 137 Spezies und 633 Reaktionen. Das Mischungsverhältnis der Kraftstoffbestandteile iso-Oktan, n-Heptan und Toluol wurde so gewählt, dass sich eine Oktanzahl von ROZ = 95 ergab (siehe Tabelle 4.1). Dieser Wert entspricht dem des in den experimentellen Untersuchungen verwendeten Kraftstoffs.

Tabelle 4.1: Zusammensetzung des TRF-Modellkraftstoffs.

Komponente	Anteil
iso-Oktan	81,5 Vol.-% (l)
n-Heptan	8,5 Vol.-% (l)
Toluol	10,0 Vol.-% (l)

Für diesen Kraftstoff wurden am Institut für Technische Thermodynamik Tabellen für beide Untermodelle des Verbrennungsmodells erstellt. Während der Erstellung der Tabelle für das Fortschrittsvariablenmodell wurden die erforderlichen Zündverläufe mit Hilfe des am Institut entwickelten Berechnungstools *HOMREA* berechnet [Maa88].

Bei den folgenden Berechnungen zur Selbstzündung wurde das Fortschrittsvariablenmodell mit orthogonaler Projektion verwendet. Das Verfahren mit schräger Projektion erwies sich in der Anwendung als weniger stabil, was sich in unplausiblen Zündverläufen äußerte. Zur praktischen Verwendung des Modells sind Verbesserungen an der Wahl der Nebenbedingungen sowie der vorgenommenen Tabellenkorrekturen erforderlich.

5 Validierung

Zur Validierung des Selbstzündungsmodells wurden zahlreiche Testrechnungen durchgeführt, bei denen jeweils unterschiedliche Aspekte der Modellierung im Vordergrund standen. In den folgenden Abschnitten werden exemplarische Validierungsrechnungen zur Qualität des verwendeten Integrationsverfahrens, zur Realitätsnähe der berechneten Zündverzugszeiten unter ideal homogenen Bedingungen und zum Einfluss von Luft-Kraftstoff-Verhältnis und Restgasgehalt auf diese Rechnungen vorgestellt.

5.1 Integration

Zur Validierung des eingesetzten Integrators für den Quellterm der Fortschrittsvariable wurden zunächst Zündverläufe mit unterschiedlichen Integrator-Konfigurationen berechnet. Zu diesem Zweck wurden physikalisch sinnvolle Anfangsbedingungen gewählt, in den hier gezeigten Fällen eine Temperatur von 1000 K, ein Druck von 35 bar und stöchiometrische Zusammensetzung. Für diese Anfangsbedingungen wurde dann ausschließlich die Fortschrittsvariable integriert, alle weiteren Parameter gemäß der Definition des reduzierten Zustandsvektors (Gleichung 4.9) wurden unverändert belassen. Die Änderungsrate der Fortschrittsvariable wurde dabei analog zum implementierten Verbrennungsmodell aus Tabellenwerten interpoliert. Die hier gezeigten Temperaturwerte wurden nach der Integration ebenfalls mittels Tabelleninterpolation aus den vorausberechneten Daten ermittelt.

Als erstes wurde das im Verbrennungsmodell implementierte Heun-Verfahren (siehe Gleichung 4.35) bei unterschiedlichen Zeitschrittweiten mit dem expliziten Euler-Verfahren verglichen. Die zusätzlich implementierte dynamische Anpassung der Integrationszeitschrittweite wurde dabei zunächst deaktiviert. Abbildung 5.1 zeigt Zündverläufe, die mit dem Euler-Verfahren berechnet wurden. Eingezeichnet sind Verläufe, die mit den Zeitschrittweiten $1 \cdot 10^{-3}$ s, $1 \cdot 10^{-4}$ s und $1 \cdot 10^{-5}$ s berechnet wurden, zudem als Referenz ein Verlauf mit $1 \cdot 10^{-7}$ s. Entsprechende Rechnungen wurden unter Verwendung des Heun-Verfahrens mit identischen Zeitschrittweiten durchgeführt (siehe Abbildung 5.2). Bei beiden Verfahren nähern sich die Zündverläufe mit kleiner werdender Zeitschrittweite erwartungsgemäß an den Referenzverlauf an. Es ist jedoch deutlich zu erkennen, dass diese Annäherung bei Verwendung des Heun-Verfahrens deutlich schneller erfolgt.

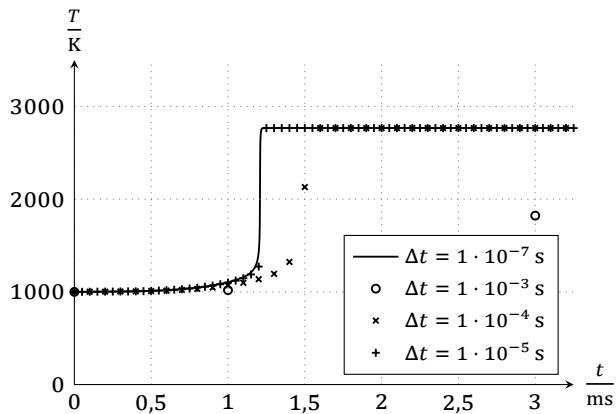


Abbildung 5.1: Abhängigkeit der Integrationsgüte von der Zeitschrittweite: Euler-Verfahren (explizit) ohne Zeitschrittweitenanpassung.

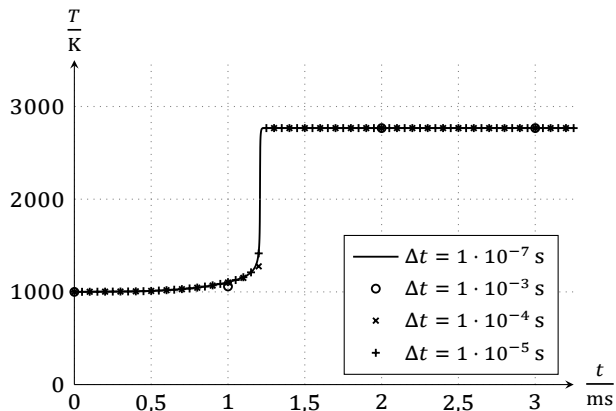


Abbildung 5.2: Abhängigkeit der Integrationsgüte von der Zeitschrittweite: Heun-Verfahren ohne Zeitschrittweitenanpassung.

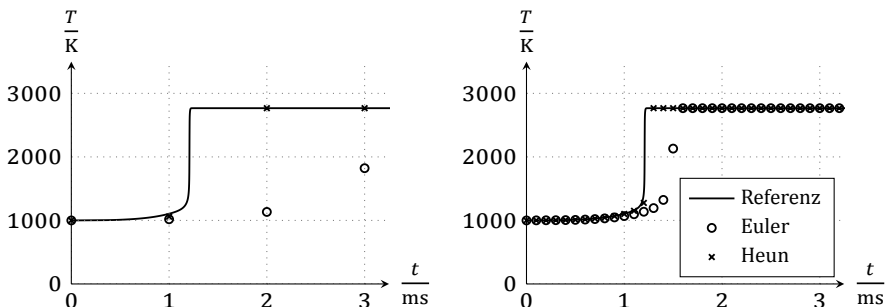


Abbildung 5.3: Abhängigkeit der Integrationsgüte vom Integrationsverfahren: Vergleich von Euler-Verfahren und Heun-Verfahren für konstante Zeitschrittweiten $\Delta t = 1 \cdot 10^{-3}$ s (links) und $\Delta t = 1 \cdot 10^{-4}$ s (rechts).

Abbildung 5.3 zeigt einen direkten Vergleich zwischen beiden Integrationsverfahren bei den Zeitschrittweiten $1 \cdot 10^{-3}$ s und $1 \cdot 10^{-4}$ s. Es ist deutlich zu erkennen, dass das Heun-Verfahren bereits bei dieser groben zeitlichen Diskretisierung deutlich bessere Ergebnisse liefert als das Euler-Verfahren. Bereits bei einer Zeitschrittweite von $1 \cdot 10^{-4}$ s sind die Abweichungen vom Referenzverlauf sehr klein, bei $1 \cdot 10^{-5}$ s (nicht dargestellt) liegen sie innerhalb einer Strichstärke.

Neben dem Integrationsverfahren wurde auch der Einfluss der automatischen Zeitschrittweitenanpassung untersucht. Dazu wurden die oben gezeigten Berechnungen mit identischen Basis-Zeitschrittweiten wiederholt. Zusätzlich wurde bei diesen Untersuchungen der im Verbrennungsmodell implementierte Mechanismus zur automatischen Anpassung der Integrationszeitschrittweite in Abhängigkeit der Reaktionsdynamik aktiviert. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 5.4 und 5.5 zu sehen. Es ist deutlich zu erkennen, dass bereits das Euler-Verfahren mit großer Basis-Zeitschrittweite recht gute Ergebnisse liefert. Durch Verwendung des Heun-Verfahrens kann jedoch auch hier eine weitere Steigerung der Integrationsqualität erreicht werden.

Für die Simulation des Motorbetriebs wurde im CFD-Code durchgehend eine Rechenschrittweite von $0,1^\circ\text{KW}$ verwendet. Bei Drehzahlen von 1750 1/min bzw. 2000 1/min entspricht dies einer Basiszeitschrittweite von weniger als $1 \cdot 10^{-5}$ s. Wie in Kapitel 4 beschrieben, wird diese Zeitschrittweite der Strömungssimulation in Abhängigkeit von der Dynamik der Reaktion reduziert, zudem greift die oben beschriebene Anpassung der Integrationszeitschrittweite. Insgesamt kann daher angenommen werden, dass die Integration mit den resultierenden kleinen Schrittweiten zufriedenstellende Ergebnisse liefert.

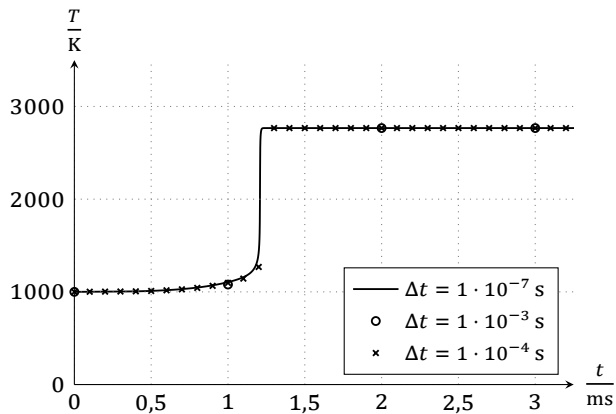


Abbildung 5.4: Abhängigkeit der Integrationsgüte von der Basis-Zeitschrittweite: Euler-Verfahren (explizit) mit Zeitschrittweitenanpassung.

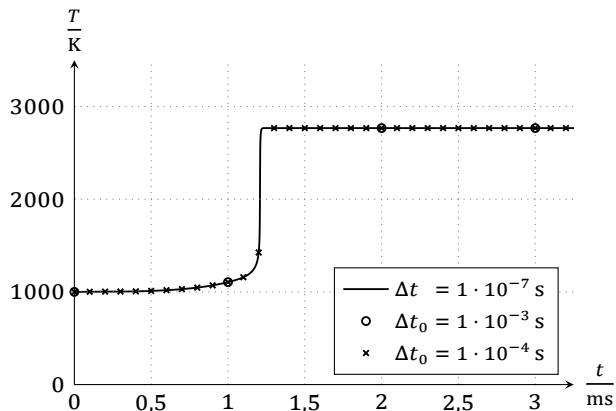


Abbildung 5.5: Abhängigkeit der Integrationsgüte von der Basis-Zeitschrittweite: Heun-Verfahren mit Zeitschrittweitenanpassung.

5.2 Zündverzugszeit

Die Funktion des gesamten Selbstzündungsmodells wurde validiert, indem Zündverläufe unter identischen Bedingungen sowohl in der Strömungssimulation mit zugeschaltetem Verbrennungsmodell als auch detailliert mit dem Simulationsprogramm *HOMREA* berechnet wurden. Die *HOMREA*-Berechnung wurde als Referenz für die Validierung gewählt, da sie auch die Basis der Tabellierung ist, die dem Fortschrittsvariablenmodell zugrunde liegt (siehe Abschnitt 4.3). Das in den CFD-Code eingebettete Modell bildet daher im Idealfall die detaillierte Berechnung exakt nach. Da der zugrundeliegende Mechanismus anhand von Messdaten für den HCCI-Betrieb als Anwendungsfall validiert ist, ist allerdings zu erwarten, dass das Verbrennungsmodell dann auch valide Daten für die Motorrechnung liefert. Für die detaillierten Rechnungen wurde der gleiche reduzierte Reaktionsmechanismus verwendet, mit dem auch die Tabellen für das Fortschrittsvariablenmodell erstellt wurden.

Da die CFD-Simulationen reale Geometrien mit sinnvoller räumlicher Ausdehnung erfordern, wurde für diese Rechnungen eine einfache Ersatzgeometrie in Würfel-form mit Zellgrößen ähnlich denen in den Motormodellen (siehe Abschnitt 3.3) verwendet. Für die Validierungsrechnungen für isobare Bedingungen wurden Druckrandbedingungen an allen Oberflächen angebracht, an denen durchgehend der Anfangsdruck aufgeprägt wurde. Durch diese Konstellation bildete sich in den Rechnungen nach Einsetzen der Reaktion ein dreidimensionales Strömungsfeld aus, in dem die Druckerhöhung aufgrund der Reaktion durch Abströmen aus dem Simulationsgebiet ausgeglichen wurde. Auf diese Weise konnten annähernd isobare Bedingungen dargestellt werden. Für die isochoren Berechnungen wurden die Druckrandbedingungen durch adiabate Wandrandbedingungen ersetzt.

Die im Folgenden dargestellten Diagramme zeigen jeweils die ermittelte Zündverzugszeit aus dem Verbrennungsmodell sowie der detaillierten Simulation aufgetragen über der Anfangstemperatur für ausgewählte Kombinationen aus Luft-Kraftstoff-Verhältnis und Druck. Die ersten Vergleichsrechnungen wurden für isobare Bedingungen durchgeführt. Dies ist der einfachste Anwendungsfall, da der Reaktionsverlauf unmittelbar dem tabellierten Verlauf entspricht. Abbildung 5.6 zeigt den Vergleich von detaillierter Simulation und Verbrennungsmodell für stöchiometrisches Gemisch ohne rückgehaltenes Abgas bei zwei unterschiedlichen Drücken. Es ist zu erkennen, dass die berechneten Zündverzugszeiten über weite Temperaturbereiche gut übereinstimmen.

Da bei der Selbstzündung und Verbrennung im Motor eher das Volumen als der Druck als konstant betrachtet werden kann, wurde auch der isochore Fall untersucht. Abbildung 5.7 zeigt entsprechende Ergebnisse in identischer Darstellung. Die Unterschiede zwischen den Kurven sind im isochoren Fall etwas größer als im isobaren, die berechneten Zündverzugszeiten werden im CFD-Verbrennungsmodell

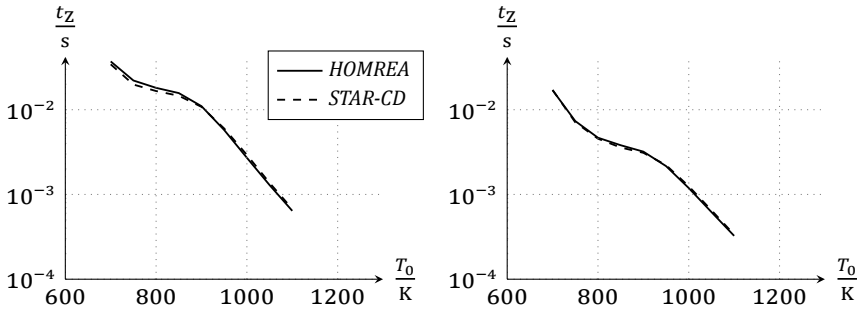


Abbildung 5.6: Vergleich der Zündverzugszeiten in der detaillierten Simulation und der Berechnung im CFD-Code. Isobare homogene Selbstzündung bei $\lambda = 1,0$; $p = 15$ bar (links) bzw. $p = 35$ bar (rechts); $y_{AGR} = 0$ m.-%.

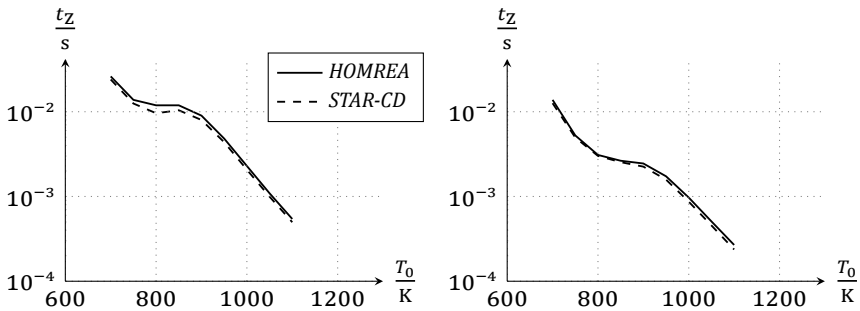


Abbildung 5.7: Vergleich der Zündverzugszeiten in der detaillierten Simulation und der Berechnung im CFD-Code. Isochore homogene Selbstzündung bei $\lambda = 1,0$; $p_0 = 15$ bar (links) bzw. $p_0 = 35$ bar (rechts); $y_{AGR} = 0$ m.-%.

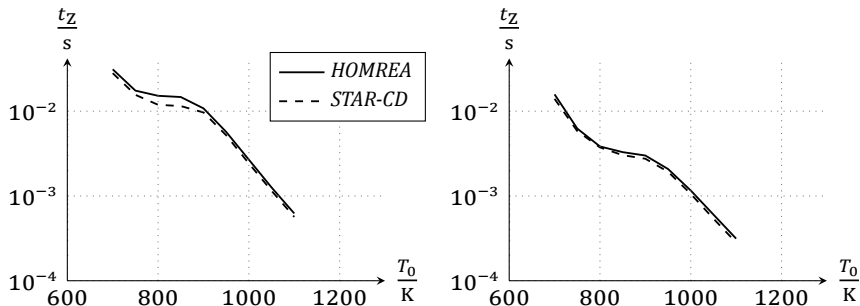


Abbildung 5.8: Vergleich der Zündverzugszeiten in der detaillierten Simulation und der Berechnung im CFD-Code. Isochore homogene Selbstzündung bei $\lambda = 1,3$; $p_0 = 15$ bar (links) bzw. $p_0 = 35$ bar (rechts); $y_{AGR} = 0$ m.-%.

dell tendentiell leicht unterschätzt. Gleichwohl bewegen sich die Fehler in einem akzeptablen Bereich.

Mit dem HCCI-Betrieb wurde auch ein Magerbrennverfahren als Anwendungsfall untersucht, daher wurde die Zündverzugszeit nicht nur für stöchiometrische Gemischzusammensetzung, sondern auch für einen Fall mit magerem Gemisch validiert. Abbildung 5.8 zeigt die entsprechenden Verläufe für ein Gemisch mit $\lambda = 1,3$. Auch hier werden in der 3D-CFD-Simulation geringfügig kürzere Zündverzugszeiten berechnet als in der detaillierten Simulation, die Verläufe stimmen jedoch insbesondere bei hohen Temperaturen recht gut überein.

Für die Simulation des HCCI-Betriebs ist darüber hinaus die Behandlung des Einflusses von zurückgehaltenem Abgas von entscheidender Bedeutung. Da bei dem realisierten Brennverfahren die erforderlichen Bedingungen zur Selbstzündung durch Rückhaltung von internem Restgas mittels negativer Ventilüberschneidung erzielt werden (siehe Abschnitt 3.1.1), muss diesem Aspekt besondere Aufmerksamkeit gewidmet werden.

Zur Validierung des implementierten Restgasmodells wurden entsprechende Vergleichsrechnungen mit dem CFD-Verbrennungsmodell sowie mit detaillierter Kinetik durchgeführt. Dabei wurden identische Anfangsbedingungen zugrunde gelegt, wobei dem Frischgemisch jeweils ein vorgegebener Massenanteil an entsprechendem Abgas mit Gleichgewichtszusammensetzung zugemischt wurde. Die angegebenen Anfangstemperaturen beziehen sich auf den Zustand nach Mischung.

Abbildung 5.9 zeigt einen Vergleich der ermittelten Zündverzugszeiten bei stöchiometrischer Frischgemischzusammensetzung und einem Abgasanteil von 20 m.-%, Abbildung 5.10 bei einem Abgasgehalt von 50 m.-%. In beiden Fällen stimmen die mit dem gesamten Verbrennungsmodell berechneten Zündverzugszeiten gut mit denen aus der detaillierten Simulation überein.

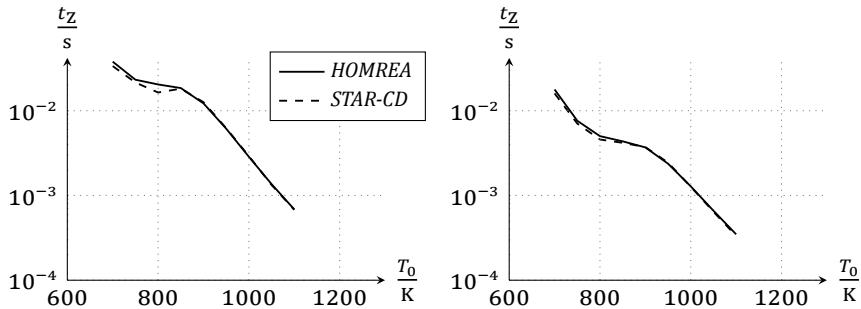


Abbildung 5.9: Vergleich der Zündverzugszeiten in der detaillierten Simulation und der Berechnung im CFD-Code. Isochore homogene Selbstzündung bei $\lambda = 1,0$; $p_0 = 15$ bar (links) bzw. $p_0 = 35$ bar (rechts); $y_{AGR} = 20$ m.-%.

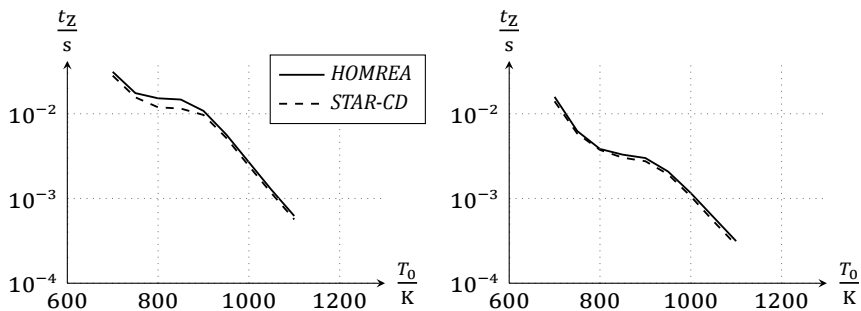


Abbildung 5.10: Vergleich der Zündverzugszeiten in der detaillierten Simulation und der Berechnung im CFD-Code. Isochore homogene Selbstzündung bei $\lambda = 1,0$; $p_0 = 15$ bar (links) bzw. $p_0 = 35$ bar (rechts); $y_{AGR} = 50$ m.-%.

6 Anwendungsbeispiele

Als Anwendungsbeispiele für das vorgestellte Verbrennungsmodell wurden drei Fälle untersucht: Die reguläre, funkengezündete Verbrennung, die HCCI-Verbrennung und die Vorentflammung. Zu jedem dieser Anwendungsfälle wurden sowohl experimentelle Untersuchungen als auch Simulationen durchgeführt. In den folgenden Abschnitten werden die Ergebnisse dieser Untersuchungen vorgestellt.

6.1 Reguläre ottomotorische Verbrennung

Für die Untersuchungen zur regulären ottomotorischen Verbrennung wurde der Versuchsträger verwendet, an dem auch die Versuche zur Vorentflammung durchgeführt wurden. Eine Beschreibung von Motor und Messtechnik kann Abschnitt 3.1.2 entnommen werden.

6.1.1 Betriebspunktauswahl

Auch der Betriebspunkt entsprach dem der Vorentflammungs-Untersuchungen. Wie in Abschnitt 2.3.3 beschrieben, tritt dieses Phänomen nahezu ausschließlich bei sehr kleinen Drehzahlen und hoher Last auf. Aus diesem Grund wurde die Drehzahl auf $n = 1750 \text{ 1/min}$ festgelegt. Die Motorlast konnte aufgrund der Verwendung von modifizierten Nockenwellen deutlich über das Niveau des Serienmotors hinaus auf 360 Nm angehoben werden. Dies entspricht einem effektiven Mitteldruck p_{me} von etwa 22,8 bar. Um bei dieser hohen Last Klopfen zu vermeiden, wurde der Zündzeitpunkt auf $\alpha_z = 5^\circ \text{KW n. ZOT}$ angepasst. Aufgrund der späten Zündung ergibt sich der charakteristische Druckverlauf von aufgeladenen Motoren bei Vollast. Das Gemisch wird bis zum oberen Totpunkt verdichtet und dann zunächst wieder leicht expandiert, bevor nach der Funkenzündung die Verbrennung einsetzt. Dadurch ergibt sich ein erstes lokales Druckmaximum am oberen Totpunkt und ein zweites, durch die Verbrennung verursachtes Druckmaximum in der Expansionsphase.

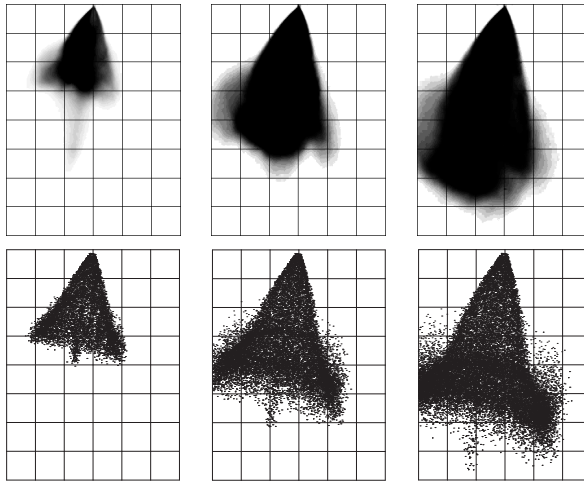


Abbildung 6.1: Validierung des Einspritzmodells anhand von Druckkammeraufnahmen: Experiment (oben) und Simulation (unten). Ansteuerdauer: 2,5 ms. Aufnahmen bei 1,1 ms, 1,9 ms und 2,6 ms nach Ansteuerbeginn.

6.1.2 Abstimmung des Simulationsmodells

Wie in Abschnitt 3.3 beschrieben, ist die für die Simulationen verwendete Lagrange-sche Betrachtungsweise bei der Berechnung des Sprays als Zweiphasenströmung nicht geeignet, um Strahlaufbruch und Primärzerfall zu berechnen. Stattdessen muss eine anfängliche Tropfengrößenverteilung vorgegeben werden.

Zur Berechnung dieser Tropfengrößen wurde bei den Untersuchungen zur regulären Verbrennung ein empirisches Modell für den Primärzerfall verwendet, der Sekundärzerfall und die Verdunstung wurden mit den vorimplementierten Modellen berechnet (siehe Abschnitt 3.3).

Für die Validierung des Einspritzmodells wurden durch den Motorhersteller optische Aufnahmen von Einspritzversuchen an einer Druckkammer bei unterschiedlichen Temperatur- und Druckrandbedingungen zur Verfügung gestellt. Die verwendeten Aufnahmen zeigen Mittelwertbilder für die Einspritzung von Kraftstoff mit der Temperatur $T_K = 25 \text{ °C}$ und dem Raildruck $p_K = 130 \text{ bar}$ in die Druckkammer mit der Kammertemperatur $T_{DK} = 25 \text{ °C}$ und dem Druck $p_{DK} = 1,6 \text{ bar}$. Diese Kombination von Werten stellte unter den verfügbaren Messdaten die beste Annäherung an die Verhältnisse im Motor dar. Die Einspritzung in den Motor erfolgte während der Messungen im Saughub. Der Ladedruck betrug $p_L = 2 \text{ bar}$, die Ladelufttemperatur $T_L = 20 \text{ °C}$.

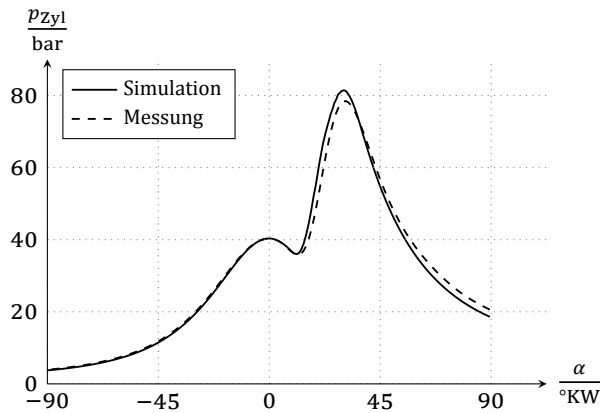


Abbildung 6.2: Zylinderdruckverläufe für reguläre Verbrennung. Vergleich zwischen Messung und Simulation.

Um das Primärzerfallsmodell anzupassen, konnten die Austrittsrichtung der Kraftstofftropfen sowie der effektive Austrittsquerschnitt des Injektors variiert werden. Beide Größen wurden so eingestellt, dass die resultierenden Strahlbilder bestmöglich mit den Aufnahmen aus der Druckkammer übereinstimmten.

Abbildung 6.1 zeigt beispielhaft Einzelbilder zu verschiedenen Zeitpunkten während der Einspritzung aus Versuch und Simulation. Es ist zu erkennen, dass sowohl die Eindringtiefe als auch die Form des Strahlkegels gut übereinstimmen.

6.1.3 Ergebnisse

Abbildung 6.2 zeigt den berechneten und einen gemessenen Druckverlauf. Als repräsentativer Einzelzyklus wurde der Zyklus ausgewählt, bei dem die relative Abweichung des indizierten Mitteldrucks p_{mi} und der Verbrennungsschwerpunkt-lage α_{H50} von den mittleren Werten der Messreihe minimal ist. Für die Bewertung der Einzelzyklen wurde ein Kriterium auf Basis der Summe der Abweichungsquadrate verwendet.

$$E = \sqrt{\left(\frac{p_{mi} - \bar{p}_{mi}}{\bar{p}_{mi}}\right)^2 + \left(\frac{\alpha_{H50} - \bar{\alpha}_{H50}}{\bar{\alpha}_{H50} - \alpha_{ZOT}}\right)^2}. \quad (6.1)$$

Die überstrichenen Werte in der Gleichung sind jeweils die Mittelwerte der entsprechenden Größen über alle Zyklen der Messreihe.

Der Vergleich der Druckverläufe zeigt, dass die Simulation wesentliche Aspekte des Motorprozesses plausibel wiedergibt. Sowohl im Ladungswechsel (nicht dargestellt) als auch in der Kompression ist der Unterschied zwischen den Druck-

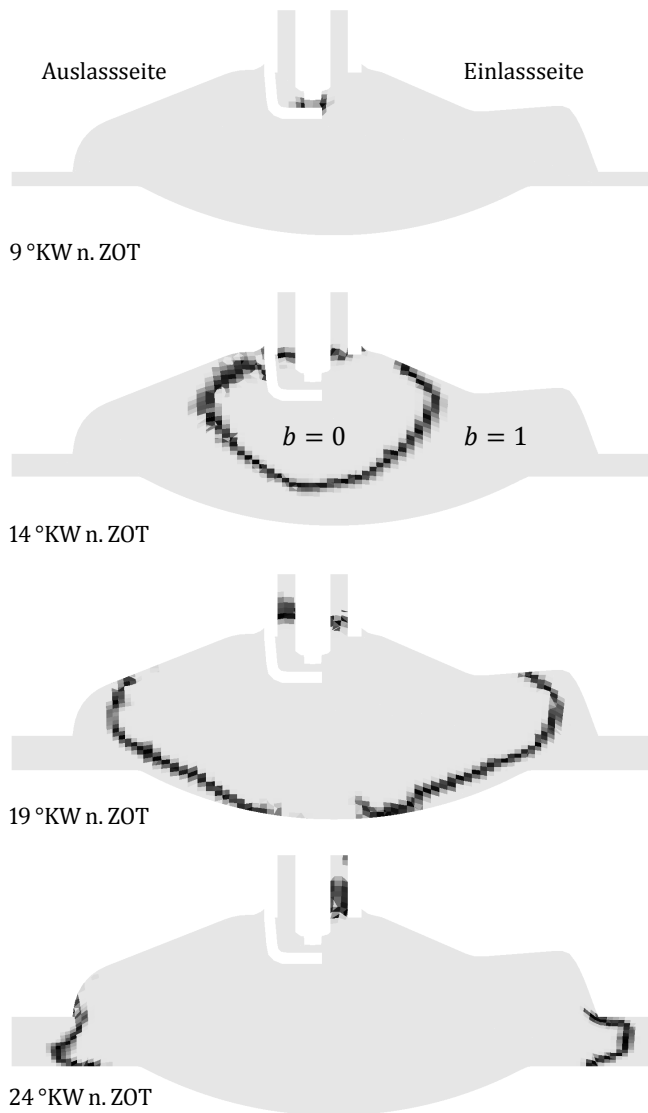


Abbildung 6.3: *Flammenausbreitung bei regulärer Verbrennung in der Simulation. Schnitt durch die Zylindermittlebene. Zündzeitpunkt: $\alpha_z = 5$ °KW n. ZOT*

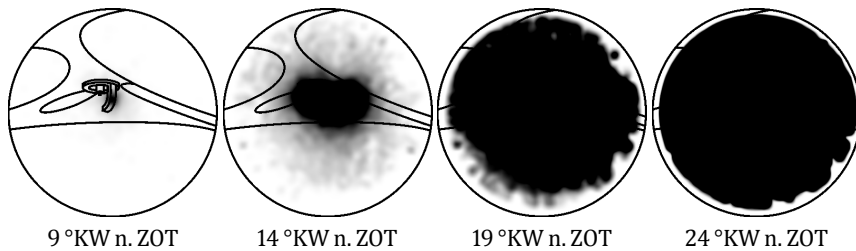


Abbildung 6.4: *Flammenausbreitung bei regulärer Verbrennung im Experiment. Zündzeitpunkt: $\alpha_z = 5^\circ\text{KW n. ZOT}$*

verläufen sehr klein. Während der Verbrennung sind die Abweichungen etwas größer, aber immer noch gering. Die Abweichung in der Lage des Verbrennungsbegins liegt im Bereich der Zyklenstreuung. Erst in der Expansionsphase zeigen sich größere Abweichungen zwischen den Druckverläufen. Diese sind vermutlich auf einen zu hoch berechneten Wandwärmestrom in der Simulation zurückzuführen.

Abbildung 6.3 zeigt die Flammenausbreitung im Brennraum in der Simulation. Es ist deutlich zu erkennen, dass sich die Flamme vom Zündkerzenspalt zunächst annähernd sphärisch ausbreitet. Innerhalb von 15°KW erreicht sie den Rand des Brennraumdachs, dann folgt ein langsamer Ausbrand bis hin zur Zylinderwand.

In Abbildung 6.4 ist zum Vergleich die Flammenausbreitung dargestellt, wie sie mit dem in Abschnitt 3.2.2 beschriebenen Kamerasystem aufgenommen wurden. Für die Aufnahmen wurde der rechte Zugang an der Stirnseite verwendet (siehe Abbildung 3.2). Trotz des beschränkten Sichtbereichs des Endoskops und der Verzerrung des Bildes durch die Endoskopoptik ist auch hier eine annähernd kugelförmige Kontur der Flamme zu erkennen.

Ebenso kann die Geschwindigkeit der Flammenausbreitung in Simulation und Experiment verglichen werden. In beiden Fällen ist im ersten Bild (9°KW n. ZOT) ein kleiner Flammenkern zu erkennen. Im dritten Bild (19°KW n. ZOT) nimmt die Flamme bereits einen Großteil des Brennraums ein, im letzten Bild den gesamten sichtbaren Bereich.

Insgesamt liefert die Simulation somit plausible Ergebnisse für die Flammenausbreitung.

6.2 HCCI-Verbrennung

Als zweites Anwendungsbeispiel wurde die HCCI-Verbrennung betrachtet. Auch zu dieser Form der Verbrennung wurden sowohl experimentelle als auch numerische

Untersuchungen durchgeführt. Für die experimentellen Arbeiten wurde der in Abschnitt 3.1.1 vorgestellte Versuchsmotor verwendet.

6.2.1 Betriebspunktauswahl

Zu Beginn der Untersuchungen wurde zunächst ein Referenzbetriebspunkt festgelegt. Da das HCCI-Brennverfahren in erster Linie für Betriebspunkte in der unteren Teillast geeignet ist, wurde eine Last von $p_{mi} = 2,0$ bar bei $n = 2000$ 1/min gewählt. Aufgrund der hohen Empfindlichkeit des HCCI-Verfahrens gegenüber Änderungen der Umgebungsbedingungen wurden außerdem Sollwerte und Toleranzbereiche für die Konditionierung der Betriebsstoffe festgelegt. Eine Übersicht über diese Werte ist in Tabelle 6.1 angegeben.

Tabelle 6.1: Randbedingungen für den HCCI-Betrieb.

Größe	Sollwert	Toleranz
Drehzahl	2000 1/min	± 5 1/min
Ind. Mitteldruck	2,0 bar	$\pm 0,02$ bar
Temp. Luftfass	25,0 °C	$\pm 1,0$ °C
Druck Luftfass	1050 mbar	± 2 mbar
Rel. Feuchte Luftfass	35,0 %	$\pm 1,0$ %
Temp. Kühlwasser	95,0 °C	$\pm 1,0$ °C
Raildruck	100 bar	± 2 bar

Prinzipiell besteht im Zeitpunkt der Direkteinspritzung ein weiterer Freiheitsgrad für die Betriebspunktdefinition, der insbesondere auf die Lage des Verbrennungsschwerpunkts einen deutlichen Einfluss hat [Gün04]. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde jedoch darauf verzichtet, diesen Parameter zu variieren. Stattdessen wurden Einstellungen gewählt, bei denen eine Interaktion der flüssigen Kraftstoffstrahlen mit der Kolbenoberfläche weitgehend vermieden werden konnte. Der Ansteuerbeginn der Einspritzung wurde für alle Untersuchungen auf einen Wert von 300 °KW v. ZOT festgelegt. Die Dauer der Einspritzung wurde angepasst, um die vorgegebene Motorlast einzustellen.

Aufgrund der Variabilitäten im Ventiltrieb, die sich durch die Verwendung der ein- und auslassseitigen Phasensteller ergeben (siehe Abschnitt 3.1.1), kann der Motor jedoch auch an diesem Betriebspunkt noch mit einer großen Bandbreite an Einstellungen betrieben werden. Aus diesem Grund wurde zunächst eine Steuerzeitenvariation durchgeführt, um die Einflüsse der Ein- und Auslasssteuerzeit auf die Verbrennung zu untersuchen. Die Ergebnisse der Parametervariation sind in den Abbildungen 6.5 bis 6.7 zu sehen. Diese enthalten jeweils Kennfelder von unterschiedlichen Größen in Abhängigkeit von den Ventilsteuerzeiten. Auf der Abszisse ist jeweils die Phasenlage der Einlassnockenwelle angegeben, auf der

Ordinate die der Auslassnockenwelle. Als Bezugswert für die Phasenlage wurde jeweils die Schließzeit der Ventile gewählt. Die Kreuze in den Kennfeldern markieren die tatsächlich durchgeführten Messungen, zwischen denen interpoliert wurde. Für die Messreihe wurde handelsüblicher EuroSuper-Kraftstoff verwendet.

Die Ergebnisse zeigen deutlich den großen Einfluss der Ventilsteuerzeiten auf den Motorbetrieb. Besonders über die Verdrehung der Auslassnockenwelle lässt sich das Verhältnis von Luft- und Abgasverdünnung einstellen. Je früher das Auslassventil schließt, umso mehr Abgas wird im Brennraum zurückgehalten und umso weniger Luft kann im folgenden Saugtakt angesaugt werden. Diese Abgasverdünnung schlägt sich in einem kleineren Wert für das Luft-Kraftstoff-Verhältnis λ nieder (siehe Abbildung 6.6b). Da das zurückgehaltene Abgas deutlich heißer ist als die angesaugte Frischluft, ist auch die Temperatur der Füllung zum Beginn der Kompression höher. Dies hat zur Folge, dass gegen Kompressionsende früher Selbstzündung einsetzt, was wiederum zu früheren Verbrennungsschwerpunktlagen führt (siehe Abbildung 6.5b). Aufgrund der hohen Temperaturen kommt es zu einer raschen Umsetzung des gesamten Gemischs, die sich in Form von großen Druckgradienten bemerkbar macht (siehe Abbildung 6.5b). Auch die Spitztemperatur während der Reaktion ist wegen der schnellen Verbrennung und der Schwerpunktlage nahe dem oberen Totpunkt in diesen Betriebspunkten besonders hoch. Dies hat vergleichsweise hohe Stickoxidemissionen zur Folge (siehe Abbildung 6.7a).

Aus dem Zusammenhang zwischen der Schließzeit der Auslassventile und der Restgasmenge im Brennraum lassen sich auch die Grenzen der gezeigten Kennfelder erklären. An der oberen Grenze (Auslass schließt spät) ist das Gemisch im Brennraum stark mit Luft verdünnt, der Restgasgehalt ist vergleichsweise gering. Dies führt zu einem niedrigen Temperaturniveau, was die Selbstzündung tendenziell behindert. Im Motorbetrieb macht sich dies durch hohe Laufunruhe bis hin zu Zündaussetzern bemerkbar. Als Maß für die Laufunruhe kann der Variationskoeffizient des indizierten Mitteldrucks angesehen werden (siehe Abbildung 6.6c). Für noch spätere Steuerzeiten als die in den Diagrammen gezeigten ist kein stabiler Motorbetrieb mehr möglich.

In den Kennfeldbereichen mit dem größten Restgasgehalt links unten in den Diagrammen kommt es aufgrund der hohen Verdünnung mit Inertgas trotz insgesamt hoher Laufunruhe zu Verbrennungsaussetzern, die ein Zusammenbrechen des HCCI-Betriebs zur Folge haben. Aufgrund des fehlenden heißen Restgases setzt auch in den Zyklen nach dem Verbrennungsaussetzer keine Selbstzündung mehr ein.

In weiten Bereichen des gezeigten Kennfelds konnten niedrige Schadstoffrohmissionen ($\text{NO}_{x,i} < 0,04 \text{ g/kWh}$; $\text{CO}_i < 8,0 \text{ g/kWh}$; $\text{HC}_i < 5,0 \text{ g/kWh}$) bei gleichzeitig niedrigem Kraftstoffverbrauch ($b_i < 260 \text{ g/kWh}$) erzielt werden. Die Kennfelder für die NO_x -, CO- und HC-Rohmissionen sind in Abbildung 6.7 dargestellt.

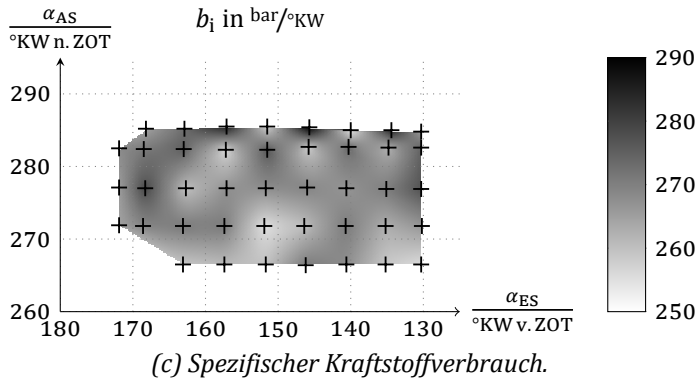
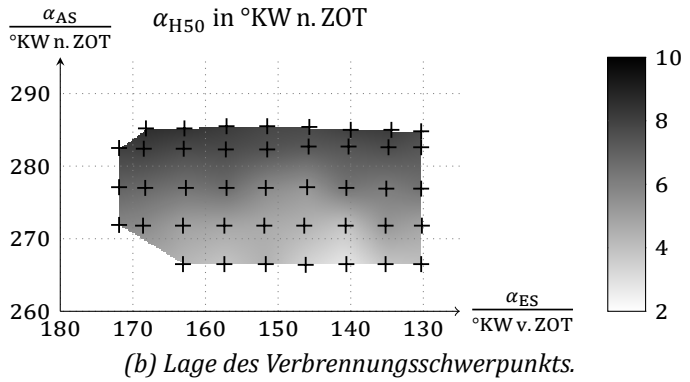
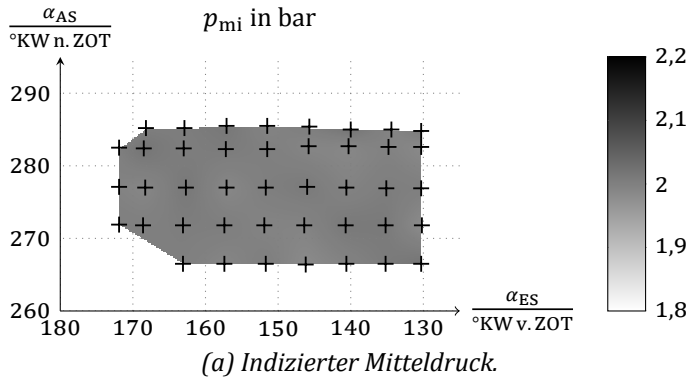


Abbildung 6.5: Kennfelder in Abhängigkeit von den Ventilsteuerzeiten:
Thermodynamische Daten.

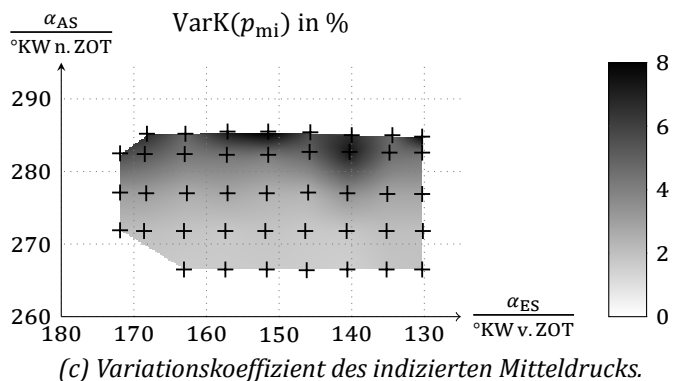
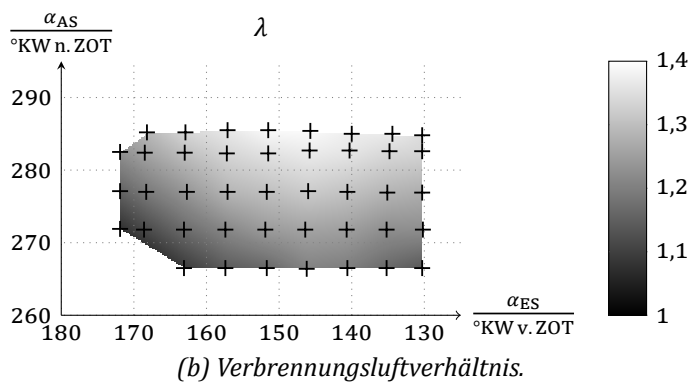
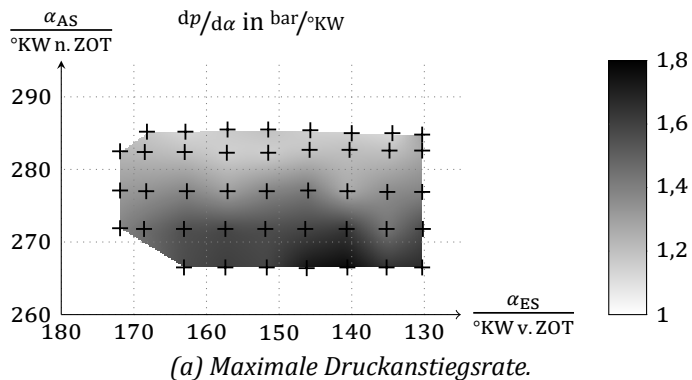


Abbildung 6.6: Kennfelder in Abhängigkeit von den Ventilsteuerezeiten: Motorbetrieb.

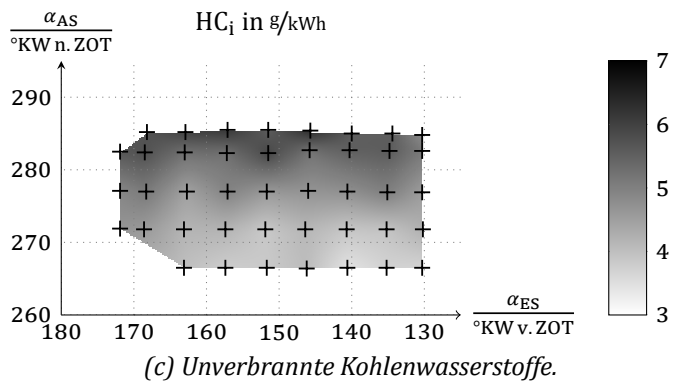
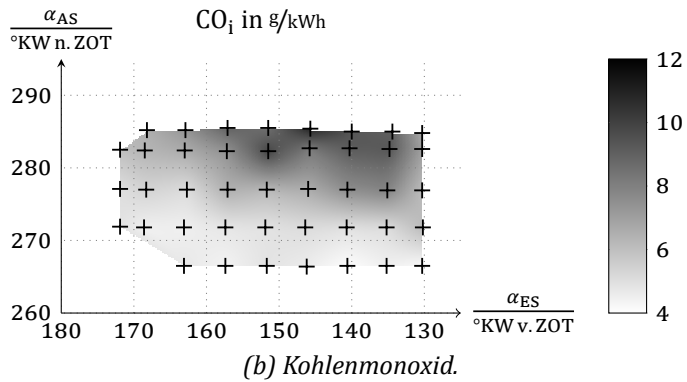
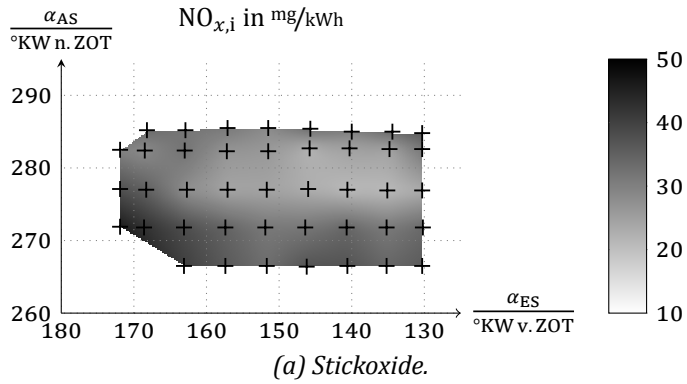


Abbildung 6.7: Kennfelder in Abhängigkeit von den Ventilsteuerzeiten:
Spezifische Schadstoffemissionen.

Basierend auf diesen Kennfeldmessungen wurden die Steuerzeiten für die folgenden Messungen festgelegt (siehe Tabelle 6.2). Für die gewählte Kombination

Tabelle 6.2: Ventilsteuerzeiten am Referenzbetriebspunkt.

Steuerzeit	Wert
Auslass schließt	271,8 °KW n. ZOT
Einlass schließt	151,9 °KW v. ZOT

von Steuerzeiten weist der Motor einerseits eine hohe Laufruhe auf, andererseits liegen die Druckanstiegsraten in einem akzeptablen Bereich und die Schadstoffrohmissionen bewegen sich insgesamt auf einem niedrigen Niveau. Abbildung 6.8 zeigt exemplarisch die Ventilhubkurven sowie einen zugehörigen Zylinderdruckverlauf für diese Referenzkonfiguration.

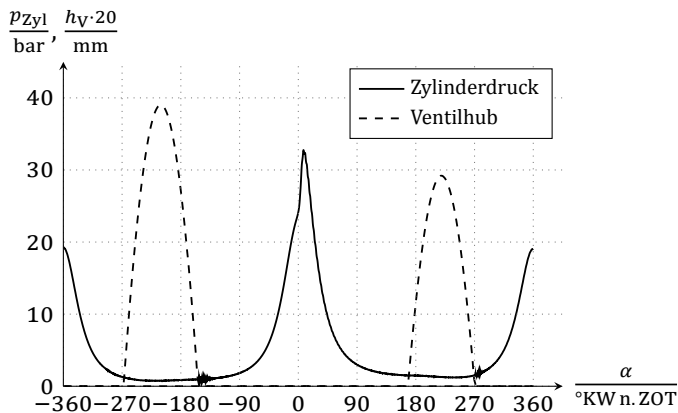


Abbildung 6.8: Ventilhubkurven und Zylinderdruckverlauf im HCCI-Betrieb.

6.2.2 Kraftstoffvergleich

Beim HCCI-Brennverfahren wird der Verlauf der Verbrennung in hohem Maße vom Zeitpunkt der Selbstzündung des homogenen Kraftstoff-Luft-Gemischs bestimmt. Die korrekte Berechnung der Selbstzündung ist daher für die Simulation der Verbrennung von entscheidender Bedeutung. Als Problem erweist sich dabei, dass für übliche Kraftstoffe keine Reaktionsmechanismen existieren. Wie in Abschnitt 4.5 beschrieben, wurde daher ein aus drei Komponenten bestehender TRF-Ersatzkraftstoff definiert, für den die Reaktionskinetik detailliert berechnet werden kann. Als Maß für das Selbstzündverhalten des Kraftstoffs wurde bei der Festlegung der Kraftstoffzusammensetzung die Oktanzahl herangezogen.

Um zu überprüfen, ob dieser Ersatzkraftstoff auch im HCCI-Betrieb ein ähnliches Verhalten zeigt wie der während der Kennfeldvermessung verwendete EuroSuper-Kraftstoff, wurden Vergleichsmessungen mit beiden Kraftstoffen durchgeführt. Dabei zeigte sich, dass mit den oben definierten Referenzeinstellungen bei Verwendung des Ersatzkraftstoffs kein stabiler Motorbetrieb möglich war.

Um den Unterschied zwischen beiden Kraftstoffen zu quantifizieren, wurde bei ansonsten unveränderten Einstellungen eine Variation des Einspritzzeitpunkts durchgeführt. Abbildung 6.9 zeigt die Lage des Verbrennungsschwerpunkts sowie den Variationskoeffizienten des indizierten Mitteldrucks in Abhängigkeit vom Ansteuerbeginn der Einspritzung. Dargestellt sind jeweils die Ergebnisse der Einspritzzeitpunktvariation für den TRF-Kraftstoff sowie der Referenzbetriebspunkt bei Verwendung von EuroSuper. Es ist deutlich zu erkennen, dass sich bei Verwendung des Ersatzkraftstoffs der Verbrennungsschwerpunkt zu späteren Lagen verschiebt. Damit einher geht eine Verschlechterung der Verbrennungsstabilität, erkennbar am deutlich ansteigenden Variationskoeffizienten des indizierten Mitteldrucks. Bei einem Einspritzbeginn nach 315 °KW v. ZOT war aufgrund von Verbrennungsschwankungen und Aussetzern kein Messbetrieb mehr möglich.

Um einen stabilen Motorbetrieb mit ähnlicher Verbrennungscharakteristik wie bei Verwendung des EuroSuper-Kraftstoffs zu gewährleisten, wurde der Zeitpunkt der Injektoransteuerung von 300 °KW v. ZOT auf 340 °KW v. ZOT verschoben. Diese Einstellung stellt einen Kompromiss dar zwischen zwei konkurrierenden Anforderungen: Einerseits sollte das Betriebsverhalten dem Motor der EuroSuper-Referenzmessung möglichst ähnlich sein, andererseits die Einspritzung aber möglichst spät erfolgen, um eine Benetzung des Kolbens mit Kraftstoff zu vermeiden.

Für die folgenden optischen Messungen wurde im Hinblick auf die Vergleichbarkeit von Experiment und Simulation ausschließlich der Dreikomponentenkraftstoff verwendet.

6.2.3 Abstimmung des Einspritzmodells

Experimentelle Untersuchung der Strahleindringtiefe

Zur Validierung des verwendeten Einspritzmodells wurden zunächst optische Messungen an einer Einspritzkammer durchgeführt. Die Randbedingungen wurden dabei so gewählt, dass sie den Bedingungen im Motor zum Zeitpunkt der Einspritzung möglichst nah kamen, wobei jedoch die Betriebsgrenzen der Einspritzkammer beachtet werden mussten. Die Messungen wurden bei einer Temperatur von 380 °C und einem Kammerdruck von 5 bar durchgeführt. Die Ansteuerdauer von 760 µs wurde gemäß den Einstellungen im Motorbetrieb gewählt.

Zur Bestimmung der Strahleindringtiefen wurde das Mie-Streulicht-Verfahren (siehe Abschnitt 3.2.2) eingesetzt. Zu diesem Zweck wurde das Spray mit einem Laser-

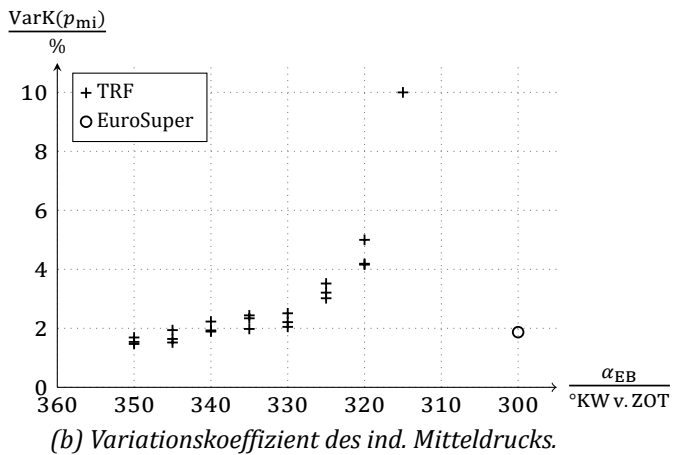
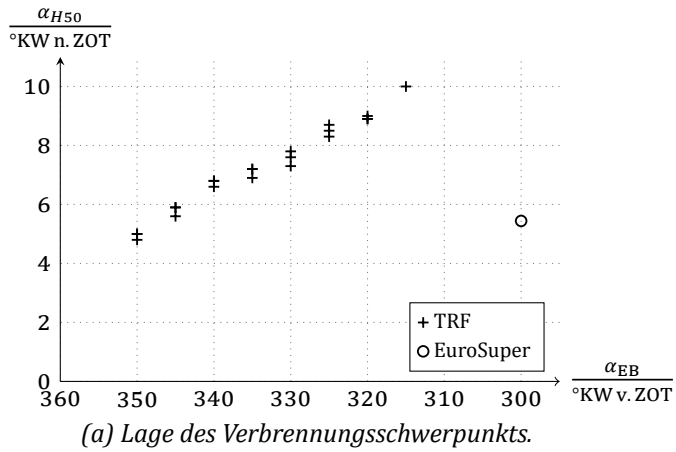


Abbildung 6.9: Kraftstoffvergleich: Einspritzzeitpunktvariation mit TRF-Kraftstoff, Referenzwert mit EuroSuper.

Lichtschnitt beleuchtet. Injektor und Lichtschnitt wurden dabei so zueinander ausgerichtet, dass eine Strahlkeule des Sechslochinjektors in der Lichtschnittebene lag. Da zur Aufnahme nur eine Einzelbildkamera zur Verfügung stand, mussten die Einspritzverläufe aus Bildern unterschiedlicher Einspritzungen zusammengesetzt werden. Dazu wurde die Einspritzung mit einer Schrittweite von $100\ \mu\text{s}$ zeitlich gerastert. Von jedem dieser Zeitpunkte wurden 30 Aufnahmen aus aufeinanderfolgenden Einspritzungen gemacht, die anschließend gemittelt wurden. Die Mittelwertbilder wurden durch Abziehen eines Dunkelbildes korrigiert. Aus den korrigierten Bildern wurde dann durch Binarisierung anhand eines Schwellenwerts die Ausbreitung der Flüssigphase extrahiert. Die daraus ermittelten Eindringtiefen in den Bildern konnten anhand von Kalibrieraufnahmen in geometrische Längen umgerechnet werden [Sch14].

Anpassung des Simulationsmodells

Für die Abbildung des Primärzerfalls in der Simulation wurde eine anfängliche Tropfenverteilung vorgegeben. Diese basiert auf einer Verteilungsfunktion, die an einem ähnlichen Mehrlochinjektor anhand von Phasen-Doppler-Anemometrie-Messungen ermittelt wurde [Nau05]. Die tatsächlich verwendete Verteilung ergab sich aus einer Skalierung dieser gemessenen Verteilung. Als Parameter für den Abgleich des Strahlmodells mit den experimentellen Daten wurden der Sauterdurchmesser der skalierten Verteilung sowie der Strahlöffnungswinkel am Düsenaustritt verwendet. Abbildung 6.10 zeigt einen Vergleich der Strahleindringtiefen aus Experiment und Simulation für die ausgewählte Parameterkombination, bei der Strahlform und Eindringtiefe bestmöglich übereinstimmen.

Validierung des Simulationsmodells am Motor

Zusätzlich zur Kalibrierung des Einspritzmodells anhand der Druckkammeraufnahmen wurden die Strahlausbreitung im Motor untersucht. Für die Messungen wurde das Licht einer Blitzlampe über eine Lichtleitersonde in den einlassseitigen Endoskopzugang eingekoppelt. Die Detektion erfolgte ebenfalls endoskopisch durch den optischen Zugang auf der Kettenseite (siehe Abbildung 3.1). Abbildung 6.11 zeigt einen Vergleich der Strahlbilder in Experiment und Simulation. Die Ansicht des Simulationsmodells wurde entsprechend der Orientierung des Beobachtungszugangs am Versuchsmotor gewählt. Die Zeitreihen zeigen jeweils die sich entwickelnden Einspritzstrahlen kurz nach Einspritzbeginn ($335\ \text{°KW v. ZOT}$), das entwickelte Spray ($330\ \text{°KW v. ZOT}$) und den Zusammenbruch des Sprays nach Einspritzende ($325\ \text{°KW v. ZOT}$).

Der Vergleich der Bilder zeigt, dass sowohl die Sprayform als auch die Eindringtiefen in der Simulation realistisch wiedergegeben werden. Sowohl in der Messung als auch in der Simulation kommt es zu einem leichten Kontakt der Strahlenden mit

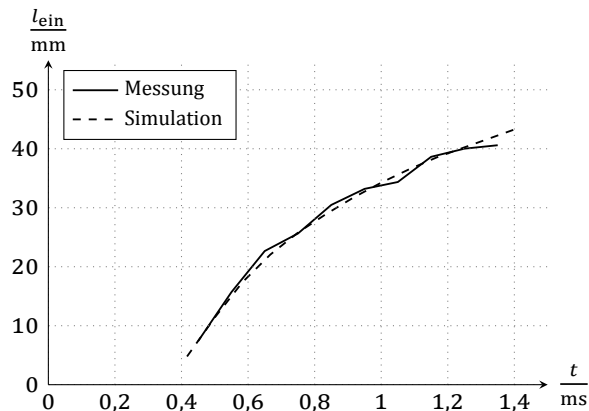


Abbildung 6.10: Vergleich der Strahleindringtiefen in Messung und Simulation. Einspritzung in die Druckkammer bei einem Gegendruck von 5 bar und einer Kammertemperatur von 380 °C.

der Kolbenoberfläche. Auch die schnelle Verdampfung des eingespritzten Kraftstoffs wird in der Simulation plausibel nachgebildet. Der Zeitpunkt, ab dem kein flüssiger Kraftstoff mehr zu erkennen ist, stimmt in Simulation und Messung gut überein.

6.2.4 Untersuchung der Zündortverteilung

Die richtige Berechnung der Selbstzündorte ist ein wichtiger Indikator für die Qualität von Simulationsmodellen für die HCCI-Verbrennung. Da Zeitpunkt und Position der Selbstzündung sowohl von der Gemischbildung als auch von der Reaktionskinetik abhängen, müssen beide realitätsnahe Ergebnisse liefern, damit die Zündung richtig simuliert werden kann.

Zur optischen Bestimmung der bevorzugten Selbstzündorte wurde das in Abschnitt 3.2.2 beschriebene Hochgeschwindigkeitskamerasystem auf Basis von Photomultiplierteknik eingesetzt. Die Anordnung der Endoskopzugänge im Zylinderkopf ist in Abbildung 3.1 zu erkennen. Für die Messungen wurden zwei synchronisierte Kameras eingesetzt. Auf die Verwendung der dritten Kamera wurde verzichtet, da der einlassseitige Endoskopzugang aufgrund der geometrischen Gegebenheiten im Zylinderkopf einen deutlich eingeschränkten Sichtbereich aufweist, insbesondere bei Kolbenstellungen in der Nähe des oberen Totpunkts. Die Verwendung einer Kamera in diesem Zugang hätte zu erheblichen Schwierigkeiten bei der Berechnung der Selbstzündorte geführt, da der Ort der ersten Zündung mit hoher Wahrscheinlichkeit außerhalb des Sichtfelds der Kamera gelegen hätte.

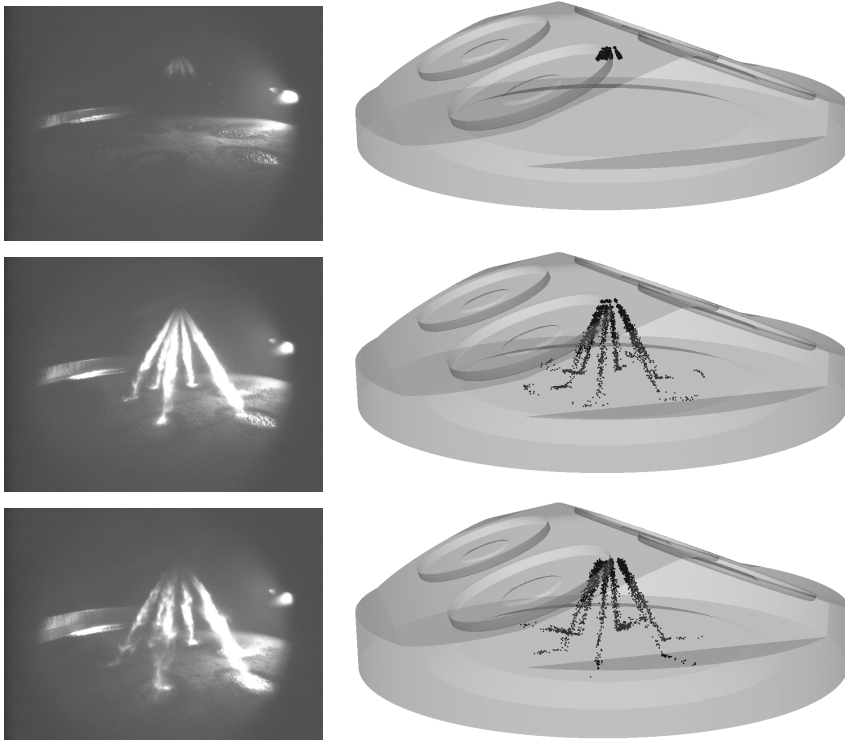


Abbildung 6.11: Vergleich der Strahlbilder in Messung (links) und Simulation (rechts). Dargestellte Zeitpunkte (von oben nach unten): 335 °KW v. ZOT, 330 °KW v. ZOT und 325 °KW v. ZOT.

Abbildung 6.12 zeigt die räumliche Verteilung der Zündorte, die sich bei der Auswertung der Bilddaten nach der in Abschnitt 3.2.2 beschriebenen Methode ergibt. Dazu wurden Bilddaten von etwa 150 Motorzyklen gespeichert. Für jeden dieser Zyklen wurde der Zeitpunkt der ersten Lichtemission in beiden Kamerabildern identifiziert. Aus der Lage der Zündorte im Bild konnte jeweils eine Zündortgerade für jede Kamera berechnet werden. Für jeden Zyklus wurde daraus der Punkt im Raum mit minimalem Abstand zu beiden Geraden bestimmt. Für die Darstellung in den Abbildungen wurden die 100 Zyklen mit der geringsten Unschärfe, das heißt mit dem geringsten Abstand zwischen beiden Geraden ausgewählt.

Es fällt auf, dass einige der berechneten Zündorte unterhalb der Kolbenoberfläche liegen. Die Kolbenstellung in den hinterlegten Brennraummasken entspricht der am oberen Totpunkt der Kolbenbewegung. Da die Selbstzündung in allen Fällen sehr nah am oberen Totpunkt auftrat und die Kolbenwegfunktion in die-

sem Bereich sehr flach verläuft, Änderungen der Kurbelstellung also nur kleine Positionsänderungen des Kolbens bewirken, ist davon auszugehen, dass diese Kolbenstellung die wahren Verhältnisse annähernd richtig wiedergibt. Die Ursache für die fehlerhafte Lage der berechneten Zündorte ist daher in Ungenauigkeiten in der Ausrichtung der Endoskope oder in der Auswertung zu suchen. Einerseits kann es zu Winkelfehlern in vertikaler Richtung kommen, wenn die Endoskopspitze nicht exakt im optischen Zugang zentriert ist. Andererseits ist aber auch die Detektion der ersten Lichtemission während der Auswertung fehlerbehaftet. Gleichwohl kann eine signifikante Häufung der berechneten Zündorte in einem relativ kleinen Brennraumbereich festgestellt werden. Dieser ist von der Brennraummitte aus zur Einlassseite hin verschoben. Ein zeitlicher Trend in der Lage der Zündorte im Verlauf der Messreihe konnte nicht festgestellt werden.

Abbildung 6.13 zeigt den berechneten Zündbereich aus der 3D-CFD-Simulation, dargestellt als Isofläche der Fortschrittsvariable. Der Vergleich mit der experimentell ermittelten Verteilung zeigt eine recht gute Übereinstimmung. Auch in der Simulation liegt der Zündbereich nur knapp oberhalb der Kolbenoberfläche, außermittig unterhalb der Einlassventile.

6.3 Vorentflammung

Eine weitere Form der Selbstzündung in Ottomotoren stellt die Vorentflammung dar (siehe Abschnitt 2.3.3). Da dieses Phänomen mit der zunehmenden Verbreitung von aufgeladenen Downsizing-Motoren immer stärker an Bedeutung gewinnt, steigt auch die Nachfrage nach Erklärungsansätzen, die helfen können, Maßnahmen zur Vermeidung der Vorentflammung zu definieren.

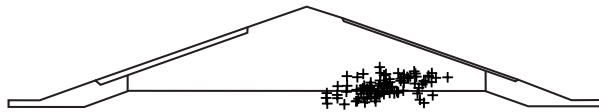
Da zu Beginn der Arbeiten nur sehr wenig Literatur zu diesem Phänomen verfügbar war [Hof08; Zah08], wurden zunächst experimentelle Untersuchungen über die Charakteristik des Auftretens und des Ablaufs von Vorentflammung durchgeführt, um dann mit Hilfe von Parametervariationen mögliche Ursachen zu identifizieren.

6.3.1 Experimentelle Untersuchungen

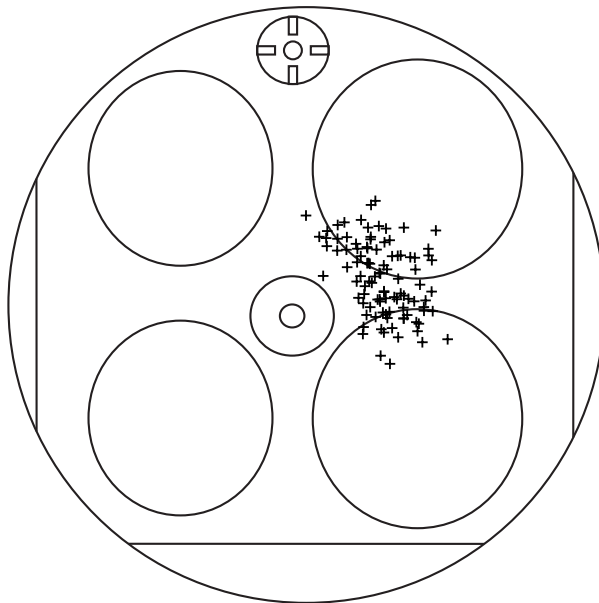
Für die experimentellen Untersuchungen zur Vorentflammung wurde der in Abschnitt 3.1.2 beschriebene Motor verwendet. Die vorgestellten Ergebnisse sowie deren Bewertung wurden in einem Forschungsprojekt in Zusammenarbeit mit dem Institut für Technische Thermodynamik erarbeitet [Dah10b; Dah10a].



(a) *y-z-Ebene.*

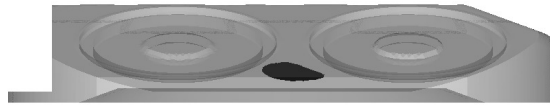


(b) *x-z-Ebene.*



(c) *x-y-Ebene.*

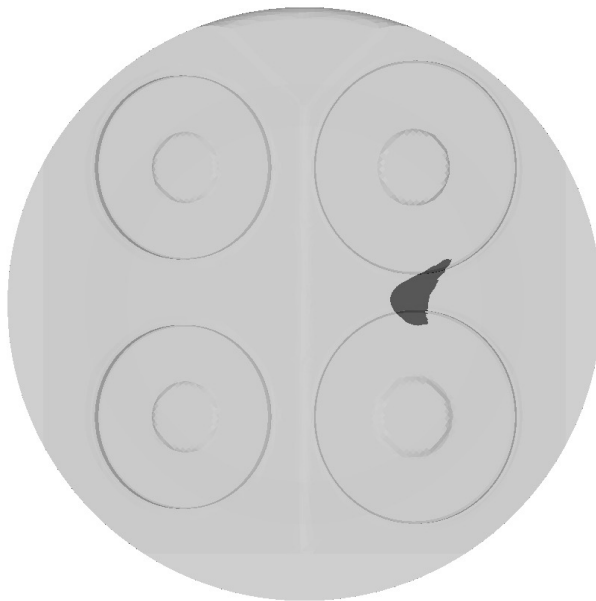
Abbildung 6.12: Räumliche Verteilung der Zündorte – Experiment.



(a) *y-z-Ebene.*



(b) *x-z-Ebene.*



(c) *x-y-Ebene.*

Abbildung 6.13: Räumliche Lage des Zündgebietes – Simulation.

Auftreten

Vorentflammung tritt generell sehr selten auf. Während der Messungen im Rahmen dieser Arbeit konnten als langfristiger Mittelwert nur etwa vier Vorentflam-mungen pro 10 000 Zyklen¹ und Zylinder beobachtet werden, obwohl der Motor gezielt unter Bedingungen betrieben wurde, die das Auftreten von Vorentflam-mung begünstigen sollten. Das Phänomen tritt stochastisch verteilt auf und kann auch anhand der Signale der am Prüfstand zur Verfügung stehenden Messtech-nik wie Druckindizierung an Ein- und Auslasskanal sowie im Brennraum nicht zuverlässig vorausgesagt werden.

Bemerkenswert an der Charakteristik des Auftretens von Vorentflammung ist je-doch, dass das Phänomen häufig in kleinen Gruppen von mehreren Ereignissen auftritt. Unterbrochen werden diese Serien in der Regel durch Zyklen mit regulärer Verbrennung. Ein Beispiel für eine derartige intermittierende Vorentflam-mungsse-

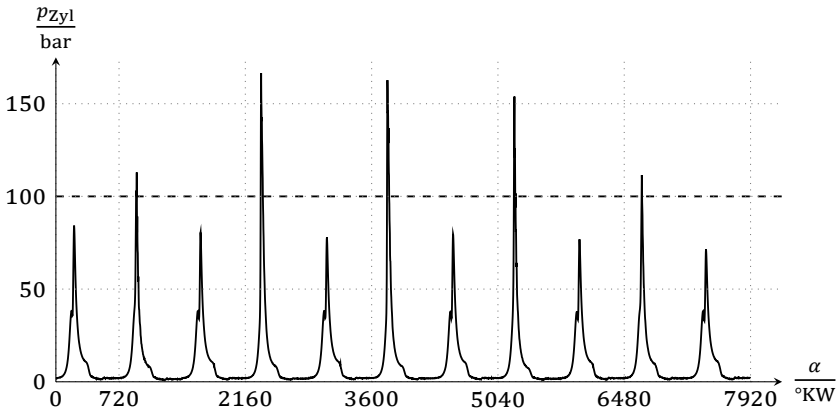


Abbildung 6.14: Typisches Auftreten von Vorentflammung in Form ei-ner intermittierenden Serie [Dah10b].

rie ist in Abbildung 6.14 zu sehen. Dargestellt ist der Zylinderdruckverlauf für elf aufeinanderfolgende Motorzyklen. Die Zyklen mit Vorentflam-mung sind deutlich an den Spitzendrücken von über 100 bar zu erkennen.

Die Diagramme in Abbildung 6.15 unterstreichen die Bedeutung des Phänomens der Vorentflam-mungsseries: Das linke Diagramm zeigt ein Histogramm der Häufigkeit von Vorentflam-mungsseries unterschiedlicher Länge. Zwar enthalten die meisten Gruppen nur eine einzige Vorentflam-mung, wenn jedoch anstatt der Anzahl der Serien die Anzahl der darin enthaltenen Vorentflam-mungen betrachtet wird, so wird deutlich, dass über 75 % der Vorentflam-mungen in Gruppen von

¹Alle Zyklusangaben im folgenden Abschnitt beziehen sich auf einen Zylinder, d. h. beim Vierzylinder-motor wird jede Umdrehung der Kurbelwelle als zwei Zyklen gezählt.

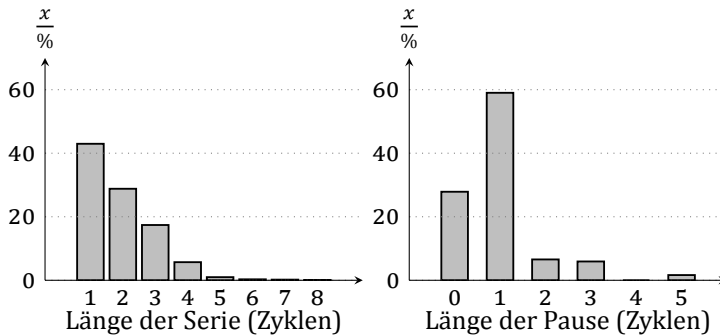


Abbildung 6.15: Vorentflammungsserien: Länge der Serien (links) und Länge der Pausen (rechts) [Dah10b].

mindestens zwei auftraten. Das rechte Diagramm zeigt eine Auswertung der Regelmäßigkeit der beobachteten Vorentflammungsserien in Form eines Histogramms, das die Häufigkeit von Pausen unterschiedlicher Länge innerhalb der Serien angibt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die meisten Pausen eine Länge von einem Zyklus haben. Etwa halb so häufig folgen zwei Vorentflammungen unmittelbar aufeinander, längere Pausen sind sehr selten.

Ablauf

Der Ablauf von Vorentflammungen wurde sowohl anhand von thermodynamischen Untersuchungen als auch mit Hilfe optischer Messtechnik untersucht. Zu diesem Zweck kam das in Abschnitt 3.2.2 beschriebene Hochgeschwindigkeitskamarasystem zum Einsatz. Der eingebaute Ringspeicher ermöglicht eine Triggerung auf Vorentflammungsereignisse im optisch zugänglichen Zylinder, so dass trotz des seltenen Auftretens von Vorentflammung eine große Anzahl von Ereignissen aufgezeichnet werden konnte. Für die optischen Untersuchungen wurde der rechte stirnseitige Endoskopzugang verwendet (siehe Abbildung 3.2).

In Abbildung 6.16 ist eine Bilderreihe dargestellt, die den typischen Ablauf einer Vorentflammung zeigt. Bereits etwa 20 °KW vor dem Zeitpunkt der Funkenzündung ist links von der Zündkerze ein Zündherd zu erkennen. Ausgehend von diesem breitet sich eine Flamme aus, die innerhalb von kurzer Zeit nahezu das gesamte Sichtfeld des Endoskops einnimmt.

Auf Basis der Kameraaufnahmen konnte außerdem die Verteilung der Orte bestimmt werden, an denen in Zyklen mit Vorentflammung Selbstzündung auftrat. Abbildung 6.17 zeigt jeden Zündort als schwarzes Kreuz im Sichtfeld des Endoskops. Zur besseren Orientierung sind im Hintergrund die sichtbaren Brennraumkonturen eingezeichnet. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Zündorte über einen

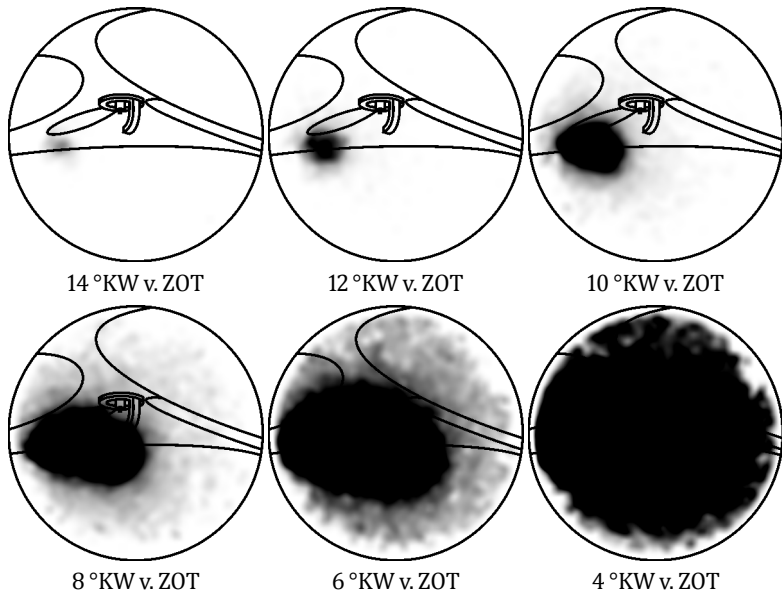


Abbildung 6.16: Optische Aufnahmen der Flammenausbreitung bei Vorentflammung. Zündzeitpunkt: $\alpha_z = 5^\circ\text{KW n. ZOT}$

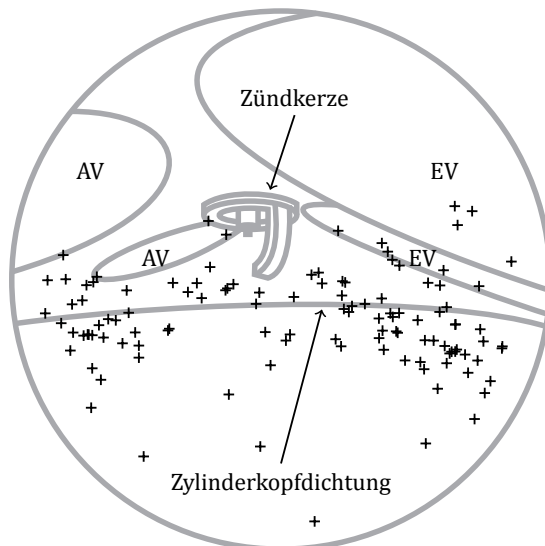


Abbildung 6.17: Verteilung der Selbstzündorte bei Vorentflammung [Dah10b].

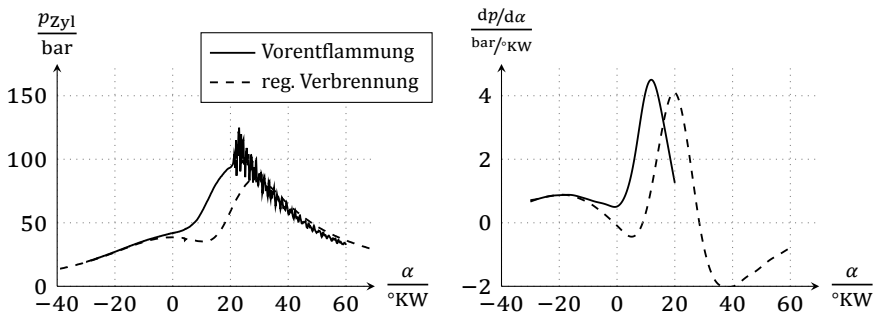


Abbildung 6.18: Reguläre Verbrennung und Vorentflammung: Druckverläufe (links) und Druckänderungsraten (rechts) [Dah10b].

großen Brennraumbereich verteilt sind. Eine Häufung an einzelnen Komponenten, wie sie beispielsweise bei Glühzündung zu erwarten wäre, konnte nicht festgestellt werden. Ebenso war innerhalb der oben beschriebenen Vorentflammungsserien zwischen den Orten der Selbstzündung keine Regelmäßigkeit erkennbar.

Aus der Auswertung der aufgezeichneten Flammenstrahlung können Rückschlüsse über die Geschwindigkeit der Flammenausbreitung vor Einsetzen des Klopfens gezogen werden. Quantitative Aussagen sind zwar nicht möglich, da der Abstand der Flamme von der Endoskopoptik nicht bekannt ist, jedoch zeigen Vergleiche mit der Flammenausbreitung nach Funkenzündung keine wesentlichen Geschwindigkeitsunterschiede. Die Flammenausbreitung in der ersten Phase der Vorentflammung kann somit als Deflagration charakterisiert werden. Gestützt wird diese Aussage auch durch die Auswertung von aufgezeichneten Druckverläufen. Abbildung 6.18 zeigt beispielhaft die Druckverläufe und daraus berechneten Druckänderungsraten je eines Zyklus mit regulärer Verbrennung und Vorentflammung. Es ist deutlich sichtbar, dass die maximal erreichten Druckänderungsraten sich nicht wesentlich unterscheiden. Dies ist ein weiterer Hinweis darauf, dass die Verbrennung in der ersten Phase der Vorentflammung deflagrativ abläuft. Erst in der zweiten Phase geht die Verbrennung in starkes Klopfen über.

Ursachen

Zu Beginn der Untersuchungen wurde eine systematische Analyse der möglichen Ursachen für Vorentflammung durchgeführt. Die Baumstruktur der identifizierten Mechanismen ist in Abbildung 6.19 dargestellt.

Zur Bewertung der in Frage kommenden Mechanismen wurden neben numerischen Grundlagenuntersuchungen zur Selbstzündung in der Gasphase und an Tropfen auch experimentelle Parametervariationen durchgeführt.

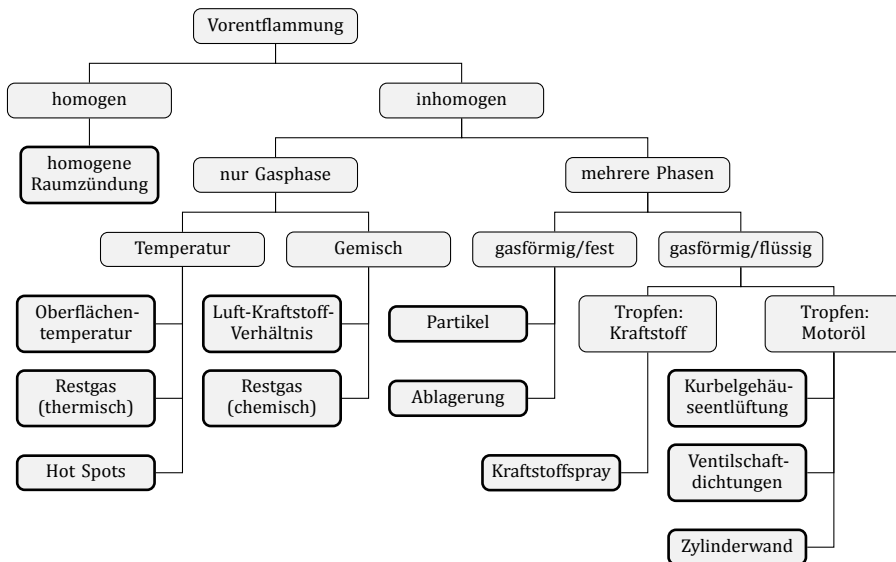


Abbildung 6.19: Mögliche Ursachen für Vorentflammung [Dah10b].

Temperaturvariation In einer ersten Versuchsreihe wurden die Temperaturen von Ladeluft und Kühlwasser unabhängig voneinander variiert. Die Kühlwassertemperatur T_{KW} wurde – ausgehend vom Ausgangswert von 85 °C – auf 75 °C abgesenkt und auf 95 °C erhöht. Die Werte beziehen sich jeweils auf die Temperaturmessstelle am Kühlwasseraustritt aus dem Motor. Gleichzeitig wurde die Ladelufttemperatur T_L , die für die übrigen Messungen auf 20 °C eingestellt war, auf 13 °C und 30 °C geändert.

Der Parameterbereich für die Variation wurde bewusst relativ klein gehalten, um sicherzustellen, dass zwischen den Messpunkten vergleichbare Betriebsbedingungen – etwa im Hinblick auf die Klopfgrenze oder die Zylinderfüllung – herrschen. So konnte zwischen den Messpunkten Zündwinkel, Last und Luft-Kraftstoff-Verhältnis konstant gehalten werden. Die Last wurde während der Variationsmessung durch Anpassung des Ladedrucks mit Hilfe des Wastegates eingestellt.

Der Einfluss der Temperaturänderung auf die Häufigkeit der Vorentflammung ist in Abbildung 6.20 dargestellt. Den Ergebnissen liegt eine Datenbasis von etwa 400 000 Zyklen pro eingezeichnetem Messpunkt zugrunde. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Kühlwassertemperatur einen großen Einfluss auf das Auftreten von Vorentflammung hat. Bei Steigerung der Temperatur nahm im untersuchten Wertebereich die Vorentflammungshäufigkeit um etwa 50 % ab. In Bezug auf den Einfluss der Ladelufttemperatur konnte während der Messungen kein einheitlicher Trend beobachtet werden.

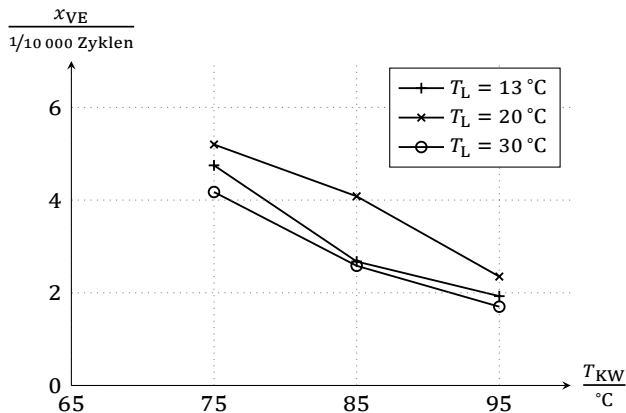


Abbildung 6.20: Abhängigkeit der Vorentflammungshäufigkeit von Kühlwasser- und Ladelufttemperatur [Dah10b].

Kraftstoffvariation Um den Einfluss des verwendeten Kraftstoffs auf die Vorentflammungshäufigkeit zu untersuchen, wurden Kraftstoffe mit unterschiedlichen Oktanzahlen eingesetzt. Neben dem sonst verwendeten Kraftstoff mit Oktanzahl ROZ 98 wurden handelsübliche Kraftstoffe mit den Oktanzahlen ROZ 95 und ROZ 100 in Tankstellenqualität verwendet. Außerdem kam ein Kraftstoff mit ROZ 100 zum Einsatz, der zuvor bereits mehrere Jahre gelagert worden war. Abweichend zu den übrigen Untersuchungen wurde der Zündzeitpunkt während der Kraftstoffvariation an die Klopfgrenze des Kraftstoffs mit Oktanzahl ROZ 95 angepasst, so dass alle Messungen im klopfreien Betrieb durchgeführt werden konnten. Die Ergebnisse der Kraftstoffvariation sind in Abbildung 6.21 dargestellt. Auch während der Kraftstoffvariation wurden für jeden Kraftstoff etwa 400 000 Zyklen ausgewertet. Es ist deutlich zu erkennen, dass der verwendete Kraftstoff einen großen Einfluss auf die Vorentflammungshäufigkeit hat. Bei den aktuellen Kraftstoffen scheint sich zunächst der Trend zu zeigen, dass bei zunehmender Oktanzahl die Häufigkeit abnimmt. Der gelagerte Kraftstoff mit ROZ 100 widerspricht mit seiner hohen Vorentflammungsneigung diesem Trend jedoch deutlich.

Bewertung

Die zuvor identifizierten möglichen Ursachen für Vorentflammung (siehe Abbildung 6.19) wurden anhand der beschriebenen experimentellen Befunde bewertet. Neben der Charakteristik des Auftretens und den Ergebnissen der Temperatur- und Kraftstoffvariationen wurden für die Bewertung grundlegende Simulationen zum Zündverhalten von Gasmischungen, Tropfen und Partikeln herangezogen, die am Institut für Technische Thermodynamik durchgeführt wurden [Dah10b; Mag09; Mag11]. Auf diese Weise konnten einige Ursachen ausgeschlossen werden, andere

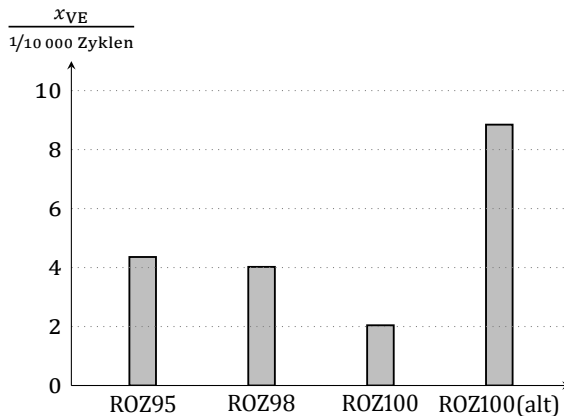


Abbildung 6.21: Abhängigkeit der Vorentflammungshäufigkeit vom verwendeten Kraftstoff [Dah10b].

wurden als unwahrscheinlich eingestuft. Abbildung 6.22 zeigt die Ergebnisse der Analyse.

Insgesamt wurde ein Mechanismus als wahrscheinlichste Ursache für die beobachteten Vorentflammungen identifiziert, bei dem Öl aus dem Feuerstegbereich in den Brennraum gelangt und dort Selbstzündung auslöst [Dah10b]. Abbildung 6.23 zeigt eine schematische Darstellung des Vorgangs. Kurz vor Erreichen des oberen Totpunkts wirken Trägheitskräfte auf das von der Wand abgestreifte Öl im Feuerstegbereich, die zur Ablösung von Tropfen führen können [Ran74]. Die entscheidenden Einflussgrößen hierfür sind Viskosität und Oberflächenspannung des Ölfilms. Beide können durch stärkere Verdünnung mit Kraftstoff reduziert werden, was die Wahrscheinlichkeit für eine Tropfenablösung erhöht.

Im verwendeten Versuchsmotor gelangt aufgrund des seitlich angeordneten Drallinjektors eine große Menge flüssigen Kraftstoffs an die dem Injektor gegenüber liegende Wand. Der vorgeschlagene Mechanismus basiert auf der Annahme, dass dieser Kraftstoff den Ölfilm an der Zylinderwand abhängig von den Umgebungsbedingungen unterschiedlich stark verdünnt und somit mehr oder weniger Vorentflammungen verursacht.

Die Ergebnisse der Temperatur- und Kraftstoffvariationen lassen sich mit Hilfe eines einfachen Modells für die Kraftstoffverdünnung mit dem beschriebenen Mechanismus in Einklang bringen. Dazu wird angenommen, dass die Menge an Kraftstoff, die in flüssiger Form an der Zylinderwand verbleibt und so zur Ölverdünnung beiträgt, von der Temperatur des Ölfilms auf der Wand abhängt. Die Öltemperatur wird dazu mit der Siedelinie des verwendeten Kraftstoffs in Beziehung gesetzt. Je höher im Sieverlauf der verdampfte Kraftstoffanteil bei der jeweiligen Öltem-

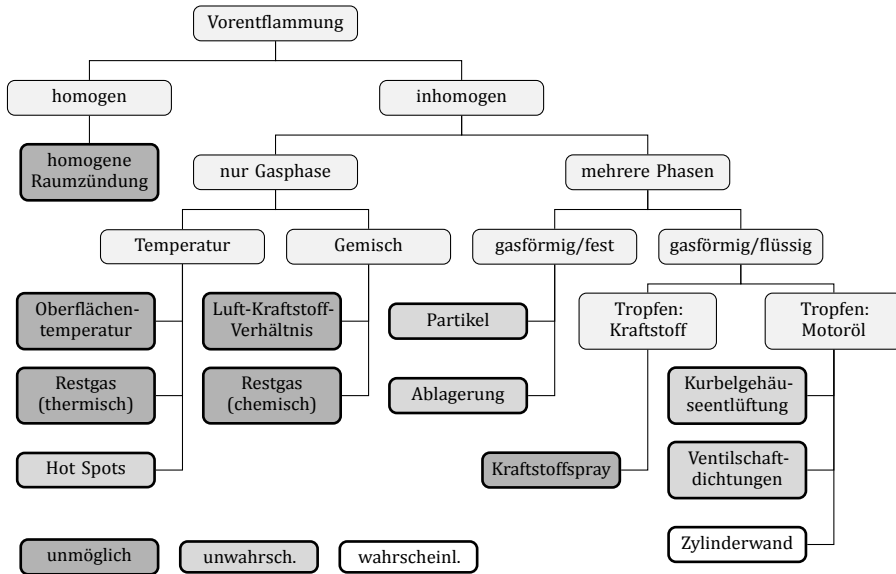


Abbildung 6.22: Bewertung der möglichen Ursachen für Vorentflammung [Dah10b].

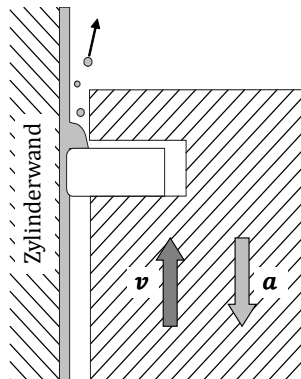


Abbildung 6.23: Ablösung von Öltropfen von der Zylinderwand vor dem oberen Totpunkt [Dah10b].

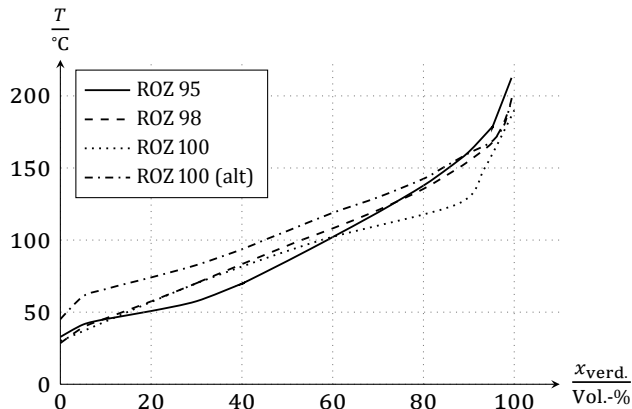


Abbildung 6.24: Siedelinien der verwendeten Kraftstoffe: Vergleich aller Kraftstoffe [Dah10b].

peratur ist, um so geringer die resultierende Ölverdünnung. Abbildung 6.24 zeigt einen Überblick über die Siedelinien aller verwendeten Kraftstoffe.

Bei den Untersuchungen mit der Standardkühlwassertemperatur von 85°C betrug die Temperatur des Motoröls in der Ölwanne etwa 100°C . Die Temperatur des Ölfilms an der Zylinderwand kann unter diesen Bedingungen auf etwa 120°C bis 130°C geschätzt werden. Es kann außerdem angenommen werden, dass sich Änderungen der Kühlwassertemperatur in vergleichbarer Größe auch in der Ölfilmtemperatur niederschlagen [Yil04].

Diese Abschätzung kann herangezogen werden, um den vorgeschlagenen Mechanismus hinsichtlich der Ergebnisse der Temperaturvariation zu bewerten. Abbildung 6.25 zeigt beispielhaft anhand der Siedelinie des ROZ 98-Kraftstoffs, wie sich eine Erhöhung der Temperatur auf den Anteil an unverdampftem Kraftstoff auswirkt: Bei einer Temperaturerhöhung um 20°C vergrößert sich im betrachteten Temperaturbereich der verdampfte Kraftstoffanteil um etwa 14 Vol.-%, was einer Abnahme der flüssigen Kraftstoffmenge um 43 % entspricht. Gemäß dem vereinfachten Modell für die Ölverdünnung kann daher angenommen werden, dass die Ölverdünnung bei höherer Kühlwasser- und damit auch Öltemperatur erheblich geringer ausfällt. Dies steht in gutem Einklang mit der beobachteten Abnahme der Vorentflammungshäufigkeit mit steigender Kühlwassertemperatur und bestätigt somit den vorgeschlagenen Mechanismus.

Ähnliche Überlegungen können auch zur Interpretation der Ergebnisse der Kraftstoffvariation angestellt werden. Betrachtet man die Siedeverläufe im Bereich der Öltemperatur, also von 120°C bis 130°C , so fällt auf, dass der Anteil an unverdampftem Kraftstoff bei der entsprechenden Temperatur sehr gut mit der Vorentflammungshäufigkeit korreliert. Abbildung 6.26 verdeutlicht diesen Zusammenhang.

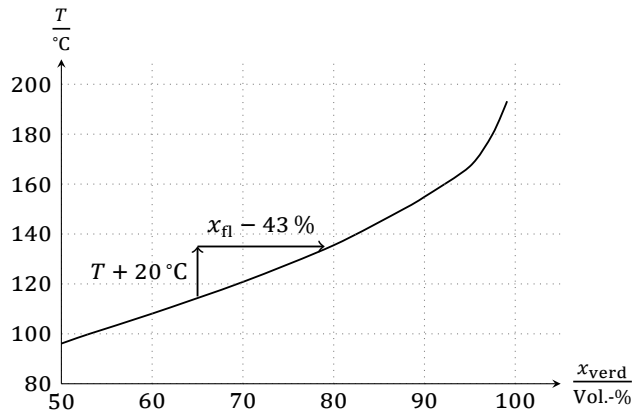


Abbildung 6.25: Einfluss der Öltemperatur auf die Ölverdünnung am Beispiel des ROZ 98-Kraftstoffs [Dah10b].

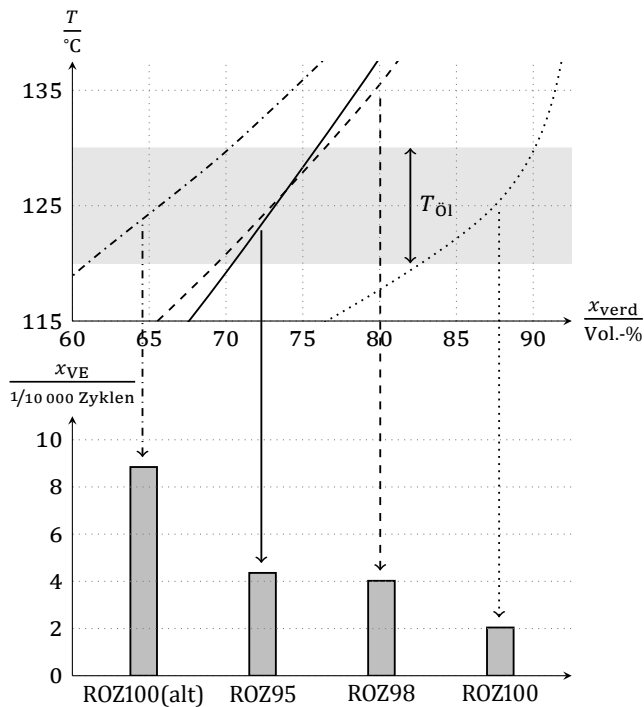


Abbildung 6.26: Zusammenhang von Siedeverhalten und Vorentflammungshäufigkeit [Dah10b].

Der gealterte ROZ 100-Kraftstoff, der einen deutlich höheren Siedeverlauf als die anderen Kraftstoffe aufweist, hat auch eine erheblich höhere Vorentflammungsneigung. Die Kraftstoffe mit ROZ 95 und ROZ 98 mit ihren annähernd identischen Siedeverläufen liegen auch hinsichtlich der Vorentflammungshäufigkeit auf vergleichbarem Niveau. Auch der aktuelle ROZ 100-Kraftstoff mit seinem flachen Siedeverlauf bestätigt den Trend. Es kann somit festgestellt werden, dass auch die Ergebnisse der Kraftstoffvariation mit der Vorstellung vereinbar sind, dass erhöhte Ölverdünnung die Neigung zur Tropfenablösung steigert, die wiederum Selbstzündung auslösen kann.

Seit der Veröffentlichung dieser Ergebnisse haben zahlreiche weitere Forschergruppen Beiträge zum Thema Vorentflammung publiziert. Diese bestätigen die Befunde zum Ablauf der Vorentflammung und zum Auftreten in Form von Serien [Zac10b; Ama11a; Ama11b]. Auch die Vermutung, dass der Siedeverlauf des Kraftstoffs entscheidenden Einfluss auf die Vorentflammungsneigung hat, wird von mehreren Autoren bestätigt [Zah11; Pal13a; Cha14]. Einige Veröffentlichungen kommen zu ähnlichen Schlussfolgerungen über die Wechselwirkung von Kraftstoffspray und Ölfilm als Ursache für Vorentflammung [Rot10; Zac10a; Zah11; Ama12; Pal13a; Wel14; Din14]. Es wird jedoch auch deutlich, dass bei anderen Motoren auch andere Mechanismen dominieren können. So wird von Fällen berichtet, in denen die Vorentflammungsorte lokal konzentriert auftreten [Spi12], was mit der Theorie der Öltröpfchen nicht vereinbar ist.

Neuere Forschungsergebnisse deuten darauf hin, dass auch feste Partikel – etwa Rußteilchen oder abgelöste Brennraumablagerungen – Vorentflammung auslösen können [Oka14]. Dieser Mechanismus scheint insbesondere zur Erklärung des Auftretens von Vorentflammung in Form von Serien von Bedeutung zu sein. Palaveev et al. [Pal13b] beschreiben ein Verfahren, mit dem sich durch frühe Funkenzündung Vorentflammungsserien auslösen lassen. Die Schlussfolgerung der Autoren, dass heiße Partikel die späteren Vorentflammungen der Serien auslösen, deckt sich mit Ergebnissen von Schünemann et al. [Sch13] und Okada et al. [Oka14], die ebenfalls von der Flamme aufgeheizte Partikel für das Auftreten von Vorentflammung verantwortlich machen.

Einen Hinweis auf eine mögliche Verknüpfung der Mechanismen liefert eine Publikation von Döhler et al. [Döh13]. Darin wird beschrieben, dass Öltröpfchen, die aus dem Feuersteg in den Brennraum gelangen, nicht unmittelbar zur Vorentflammung führen, sondern in der regulären Flamme unter Bildung von heißen Partikeln verbrennen, die dann im folgenden Zyklus Selbstzündung auslösen.

Möglicherweise werden die ersten Vorentflammungen einer Serie durch abgelöste Öltröpfchen oder durch die daraus entstandenen Partikel ausgelöst. Dies würde die starke Abhängigkeit der Vorentflammungshäufigkeit von Faktoren, die die Wechselwirkung zwischen Kraftstoffspray und Ölfilm beeinflussen, erklären. Die folgenden Vorentflammungen innerhalb der Serien könnten dann entweder von Brennraumablagerungen [Sch13] oder von Öltröpfchen [Din14], die infolge des star-

ken Klopfens von der Wand bzw. aus dem Feuersteg gelöst wurden, verursacht werden.

6.3.2 Simulation

Bei der Vorentflammung handelt es sich um ein seltenes, stochastisch auftretendes Phänomen, das zudem offenkundig von noch unbekanntem Störungen wie Öltröpfen, Partikeln oder Ähnlichem ausgelöst wird. Im Gegensatz zur HCCI-Verbrennung mit ihren niedrigen Zyklenschwankungen und der damit einhergehenden hohen Reproduzierbarkeit der Ergebnisse kann die Selbstzündung in diesem Fall daher nicht mit mittelwertbasierten Verfahren im Rahmen einer 3D-CFD-Simulation berechnet werden.

Trotzdem leistet auch die numerische Simulation einen wertvollen Beitrag zur Entschlüsselung des Phänomens der Vorentflammung. Einerseits können Simulationen von grundlegenden Vorgängen wie der homogenen Selbstzündung unterschiedlicher Stoffe unter verschiedenen Randbedingungen Informationen liefern, anhand derer sich einzelne Mechanismen ausschließen lassen. Andererseits liefern aber auch 3D-CFD-Simulationen Einblicke in Details des Motorprozesses, anhand derer die Ergebnisse aus dem Versuch besser interpretiert werden können.

Simulation der Gemischbildung

Als Beispiel für den Beitrag der CFD-Simulation zur Interpretation von Versuchsergebnissen kann die Simulation der Gemischbildung genannt werden. Abbildung 6.27 zeigt die Ergebnisse einer Variation des Einspritzbeginns bei identischen Randbedingungen. Links ist die Verteilung der flüssigen Kraftstofftropfen im Brennraum am Einspritzende bei früher Einspritzung (310 °KW v. ZOT) dargestellt, rechts bei später Einspritzung (270 °KW v. ZOT). Es ist deutlich zu erkennen, dass der Kraftstoffstrahl bei früher Einspritzung hauptsächlich den Kolben benetzt, während er bei später Einspritzung großflächig auf die dem Injektor gegenüberliegende Brennraumwand trifft.

Im Prüfstandsversuch wurde bei der späten Einspritzung eine deutlich höhere Vorentflammungshäufigkeit festgestellt. Angesichts der Simulationsergebnisse kann vermutet werden, dass eine erhöhte Ölverdünnung aufgrund der stärkeren Wandbenetzung für diesen Anstieg der Vorentflammungsneigung verantwortlich ist.

Aus den experimentellen Untersuchungen liegen keine quantitativen Daten für die unterschiedliche Vorentflammungshäufigkeit vor, da die Versuche in einer frühen Phase des Forschungsprojektes durchgeführt wurden, in der die modifizierten Nockenwellen (siehe Abschnitt 3.1.2) noch nicht zur Verfügung standen. Die ermittelten Vorentflammungshäufigkeiten waren insgesamt deutlich niedriger als die in

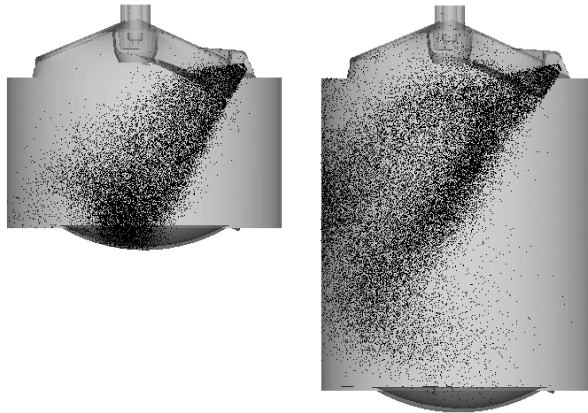


Abbildung 6.27: Verteilung der Kraftstofftropfen bei Einspritzende. Einspritzbeginn früh (310 °KW v. ZOT, links) und spät (270 °KW v. ZOT, rechts).

den bisher beschriebenen Untersuchungen und können aufgrund der unterschiedlichen Motorkonfiguration nicht direkt mit diesen verglichen werden. Ähnliche Resultate konnten aber in späteren Untersuchungen auch für den Betrieb desselben Motors mit einem Mehrlochinjektor erzielt werden. Auch hier korrelierte die in der Simulation ermittelte Wandbenetzung innerhalb einer Einspritzbeginn-Variation sehr gut mit der im Experiment ermittelten Vorentflammungshäufigkeit [Pal13a].

Quantifizierung der Zündwilligkeit

Die Simulation kann dazu beitragen, eine Datengrundlage für allgemeine Überlegungen zu schaffen. Da die Ursachen für Vorentflammung noch nicht abschließend und allgemeingültig geklärt sind, soll in den folgenden Abschnitten der Versuch unternommen werden, das Problem losgelöst von konkreten Auslösemechanismen zu behandeln. Zu diesem Zweck wird zunächst eine Formulierung vorgestellt, die es erlaubt, die Vorentflammung auf anschauliche Weise in den Kontext der bekannten Verbrennungsanomalien einzuordnen.

Konzept der Ignition Delay Fraction Zur Untersuchung von Selbstzündprozessen in Motoren ist die Quantifizierung des Zündverhaltens zwingend erforderlich. Zu diesem Zweck wird häufig die Zündverzugszeit des verwendeten Kraftstoffs oder eines Ersatzstoffs mit definierter Zusammensetzung in Abhängigkeit von den Umgebungsbedingungen ermittelt. Sowohl bei der experimentellen Bestimmung als auch bei der Berechnung dieser Zündverzugszeiten werden in der Regel konstante

Bedingungen zugrunde gelegt. Für Selbstzündung im Motor ist eine derartige Betrachtung jedoch nicht aussagekräftig, da die resultierenden Zündverzugszeiten für die während eines Motorzyklus auftretenden Druck- und Temperaturbedingungen innerhalb von kurzer Zeit mehrere Größenordnungen durchlaufen.

Bei der Berechnung des Zeitpunkts der Selbstzündung bei Motorklopfen wird dem starken Einfluss der Temperatur-Druck-Historie auf das Zündverhalten häufig durch Anwendung des Livengood-Wu-Integrals [Liv55] Rechnung getragen:

$$I(t) = \int_0^t \frac{1}{\tau(t')} dt'. \quad (6.2)$$

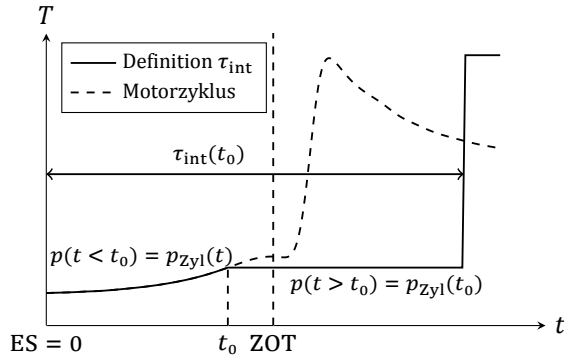
Der Wert des Integrals beschreibt zu jedem Zeitpunkt t den Reaktionsfortschritt in Abhängigkeit von den aktuellen Bedingungen im unverbrannten Gemisch. Als Basis dienen Zündverzugszeiten τ für konstante Bedingungen, die für alle durchlaufenen Kombinationen aus Druck und Temperatur ermittelt werden müssen.

Zur Untersuchung von Vorentflammung ist das Livengood-Wu-Integral allerdings nur bedingt geeignet. Aus der mathematischen Form der Definition folgt zwingend ein streng monoton zunehmender Verlauf des Integralwerts, da die eingesetzten Zündverzugszeiten stets positive Werte haben. Bei der Betrachtung von Saugmotoren ist dies anschaulich, da auch die Verläufe von Zylinderdruck und Temperatur im relevanten Kurbelwinkelbereich monoton ansteigen. Ein grundlegend anderes Verhalten ist bei aufgeladenen Motoren in Vollastbetriebspunkten zu beobachten: Zur Vermeidung von Klopfen wird die Zündung bei diesen Motoren auf sehr späte Zeitpunkte eingestellt, bei Vollast häufig deutlich nach dem oberen Totpunkt. Dadurch entsteht in den Verläufen von Druck und Temperatur ein lokales Maximum am oberen Totpunkt (siehe Abbildung 6.2). In der nachfolgenden Expansionsphase vor Einsetzen der regulären Verbrennung sinkt die Temperatur im Gemisch ab, was zu einer deutlichen Abnahme der Zündwilligkeit führt.

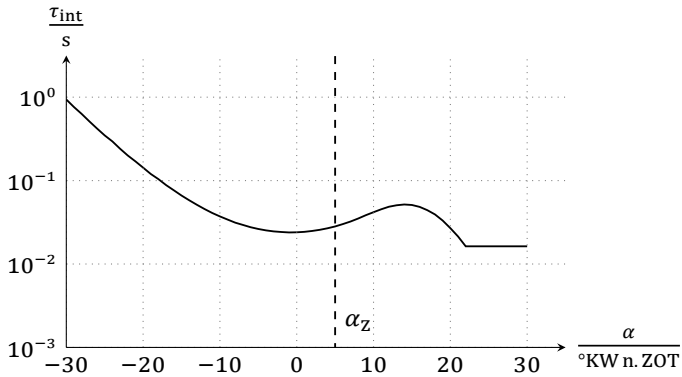
Da der Wert des Livengood-Wu-Integrals den Reaktionsfortschritt beschreibt, flacht sich sein Verlauf deutlich ab, bleibt aber gemäß Definition streng monoton ansteigend. Für die Betrachtung des Reaktionsfortschritts ist dies plausibel, da die Vorreaktionen zur Zündung nicht rückwärts ablaufen, sondern eingefroren werden. Allerdings lässt der Verlauf des Integralwerts keine Rückschlüsse darüber zu, wie weit sich der thermodynamische Zustand vom Wiedereinsetzen der Reaktionen entfernt hat.

Anschaulicher kann die Kritikalität der Zustände in Bezug auf Selbstzündung stattdessen anhand der *Ignition Delay Fraction* Γ [Dah10d; Dah11] dargestellt werden. Diese ist definiert als der bereits verstrichene Anteil der Zeit, die unter Berücksichtigung der bisherigen Temperatur-Druck-Historie zur Selbstzündung führt:

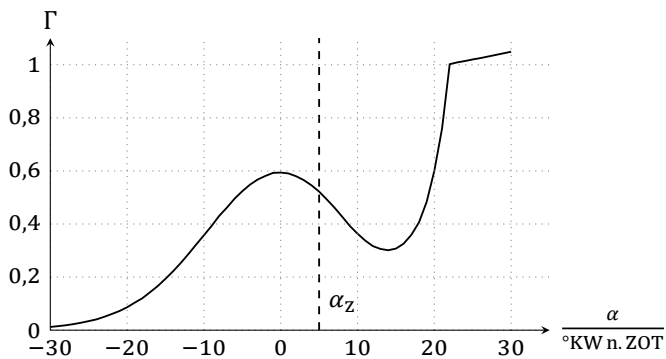
$$\Gamma = \frac{t - t_{ES}}{\tau_{int}}. \quad (6.3)$$



(a) Definition der Integralen Zündverzugszeit.



(b) Verlauf der Integralen Zündverzugszeit.



(c) Verlauf der Ignition Delay Fraction.

Abbildung 6.28: Definition der Ignition Delay Fraction [Dah11]. Aufgeladener Motor bei Vollast.

Alle Zeiten werden auf die Schließzeit des Einlassventils bezogen, da das System ab diesem Zeitpunkt als geschlossen betrachtet werden kann.

Zur Berechnung der Ignition Delay Fraction zu einem beliebigen Zeitpunkt t_0 muss zunächst die integrale Zündverzugszeit $\tau_{\text{int}}(t_0)$ ermittelt werden. Dazu wird für Zeiten $t < t_0$ die Temperatur-Druck-Historie am jeweiligen Ort angenommen, für Zeiten $t > t_0$ der Druck $p = p(t_0) = \text{const.}$ Für diese Kombination aus Temperatur- und Druckverlauf wird dann mit Hilfe detaillierter Reaktionskinetik die verbleibende Zeit bis zur Selbstzündung berechnet. Die integrale Zündverzugszeit ist definiert als die Zeitspanne vom Schließen der Einlassventile bis zum Einsetzen der Zündung. Abbildung 6.28a verdeutlicht diese Definition. In einer ersten Näherung wurden dabei der gemessene Zylinderdruck und die daraus mittels einer zweizonigen Druckverlaufsanalyse berechnete Massenmitteltemperatur des noch unverbrannten Gemischs als Temperatur-Druck-Historie angenommen.

Wenn die integrale Zündverzugszeit für jeden Zeitpunkt im Zyklus ausgewertet wird, können die Ergebnisse über dem Kurbelwinkel α aufgetragen werden. Eine entsprechende Kurve für einen aufgeladenen Ottomotor ist in Abbildung 6.28b zu sehen. Abbildung 6.28c zeigt den daraus gemäß Gleichung 6.3 berechneten Verlauf der Ignition Delay Fraction. Im gezeigten Beispiel findet Selbstzündung statt, was daran zu erkennen ist, dass die Kurve den Wert $\Gamma = 1, 0$ erreicht. Der Wert der Integralen Zündverzugszeit ändert sich nach Auftreten der Selbstzündung nicht mehr, daher ergibt sich für die Ignition Delay Fraction ein linearer Verlauf, dessen Steigung durch die Motordrehzahl vorgegeben ist.

Abgrenzung der Verbrennungsanomalien Anhand des Verlaufs der Ignition Delay Fraction lassen sich die unterschiedlichen Verbrennungsanomalien anschaulich voneinander abgrenzen. Das Kriterium für diese Abgrenzung ist der Zeitpunkt, zu dem Selbstzündung auftritt, das heißt zu dem die Ignition Delay Fraction den Wert $\Gamma = 1$ erreicht. Der Zeitpunkt der Funkenzündung α_z bildet dabei die Grenze zwischen Klopfen und Vorentflammung bzw. Glühzündung. Gemäß der Definition des Klopfens (siehe Abschnitt 2.3.1) tritt dabei Selbstzündung im unverbrannten Gemisch vor der regulären Flammenfront auf. Daher wird jede Selbstzündung nach dem Zündzeitpunkt als Klopfen bezeichnet. Tritt die Selbstzündung bereits vor dem Zündzeitpunkt auf, dann kann es sich entweder um Glühzündung oder um Vorentflammung handeln. Die Unterscheidung zwischen beiden Phänomenen muss anhand des zeitlichen Ablaufs mehrerer aufeinanderfolgender Zyklen beurteilt werden.

Abbildung 6.29 zeigt beispielhaft Verläufe der Ignition Delay Fraction für einen Saugmotor und einen aufgeladenen Motor, jeweils bei Volllast. Es ist deutlich zu erkennen, dass der Saugmotor zum Zeitpunkt der Zündung noch weit von der Selbstzündung entfernt ist. Dies liegt einerseits daran, dass die Zündung bereits relativ weit vor dem oberen Totpunkt eingeleitet wird, andererseits daran, dass die

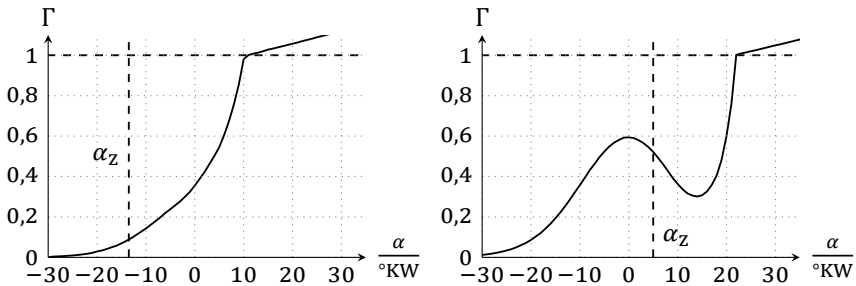


Abbildung 6.29: Verlauf der Zündwilligkeit für Saugmotoren (links) und Turbomotoren (rechts).

Zündwilligkeit sich insgesamt auf einem niedrigen Niveau bewegt. Der Vergleich der Werte am oberen Totpunkt zeigt, dass der Saugmotor weiter von der Selbstzündgrenze entfernt ist als der aufgeladene Motor, obwohl bei diesem die Verbrennung noch nicht eingesetzt hat. Das Auftreten von spontaner Selbstzündung vor der elektrischen Funkenzündung, wie sie bei der Vorentflammung beobachtet wird, ist beim Saugmotor daher nahezu ausgeschlossen.

Im Falle von Glühzündung kann zwar Selbstzündung zu derart frühen Zeitpunkten auftreten, jedoch nicht spontan. Da die Glühzündung auf der Erwärmung von Bauteiloberflächen beruht, weist das Phänomen ein charakteristisches Zeitverhalten auf. In den ersten Zyklen einer sich anbahnenden Glühzündung steigt das Niveau der Zündwilligkeit sukzessive an. Dies macht sich dadurch bemerkbar, dass es zunächst zu immer stärkerem Klopfen und in der Folge zu immer früherer Selbstzündung kommt (siehe Abschnitt 2.3.2). Der Verlauf der Ignition Delay Fraction verschiebt sich somit über mehrere Zyklen hinweg nach oben, bis schließlich Selbstzündung vor der Funkenzündung auftritt.

Einbindung in die CFD-Simulation Das Konzept der Ignition Delay Fraction lässt sich anwenden, um die Zündwilligkeit im Brennraum räumlich und zeitlich aufgelöst zu betrachten. Zu diesem Zweck wurde das in Kapitel 4 beschriebene Verbrennungsmodell um die Möglichkeit erweitert, in jedem Zeitschritt für jede Zelle des CFD-Rechengebiets die Ignition Delay Fraction zu berechnen. Dazu musste die Tabellierung der Reaktionskinetik um eine Ausgabegröße erweitert werden. Da die Tabellenerstellung auf der Vorausberechnung von Zündverläufen bei konstantem Druck beruht, kann in dieser Phase mit geringem Aufwand für jeden Tabellenpunkt eine Restzeit bis zur Selbstzündung ermittelt und als Ausgabegrößen in der Tabelle gespeichert werden.

Die Berechnung der Ignition Delay Fraction aus diesen Werten erfolgt dann zur Laufzeit im CFD-Code. Dabei wird ausgenutzt, dass in der Simulation der Einfluss

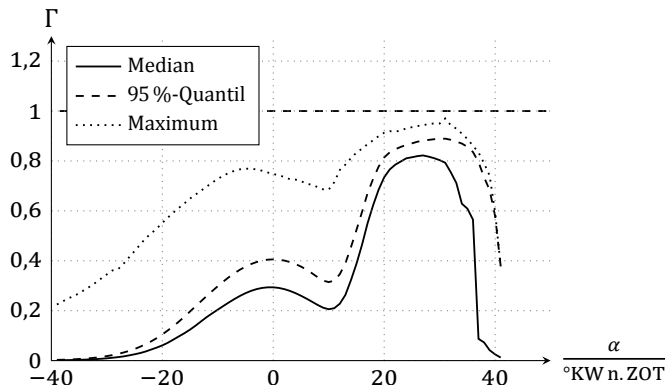


Abbildung 6.30: Verlauf der Zündwilligkeit für Direkteinspritzung.

der gesamten bisherigen Temperatur-Druck-Historie auf den aktuellen Reaktionsfortschritt in den Koordinaten des reduzierten Zustandsvektors enthalten ist. Die Integrale Zündverzugszeit kann daher einfach durch Summation der verstrichenen Zeit und der tabellierten Restzeit bis zur Selbstzündung berechnet werden.

Anwendung auf Vorentflammung Die Berechnung der lokalen Ignition Delay Fraction kann genutzt werden, um Aussagen über das Auftreten von Vorentflammung zu treffen. Dazu ist es erforderlich, das Phänomen auf einer abstrakteren Ebene zu betrachten. Wie die Analyse der Zündwilligkeit zeigt, können die Zustände im Brennraum, die unter Berücksichtigung von Ladungswechsel und Gemischbildung ermittelt wurden, nicht zur Selbstzündung in der Gasphase führen. Neben den bekannten Mechanismen müssen demnach in einzelnen Zyklen Effekte auftreten, die bisher in der Simulation nicht berücksichtigt werden können. Sowohl die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten experimentellen Untersuchungen als auch Veröffentlichungen von anderen Forschergruppen legen nahe, dass es sich um Vorgänge in Wandnähe handelt, die stark mit der Interaktion des Kraftstoffsprays mit dem Ölfilm an der Zylinderwand verknüpft sind. Ob die Vorentflammung aber von flüssigen Tropfen, von festen Partikeln aus Brennraumablagerungen oder durch einen anderen Mechanismus ausgelöst wird, ist weiterhin nicht geklärt.

Alle in Frage kommenden Auslösemechanismen können als Störungen interpretiert werden, die die Zündwilligkeit lokal stark herabsetzen. Anhand der Ignition Delay Fraction lässt sich die Größe einer Störung abschätzen, die zum Auslösen einer Vorentflammung nötig ist. Abbildung 6.30 zeigt zur Veranschaulichung Ignition Delay Fraction-Verläufe, die sich aus der statistischen Auswertung der Verläufe aller Zellen in der CFD-Simulation ergeben. Dargestellt sind der Medianverlauf und der 95 %-Quantil-Verlauf für die massengewichtete Ignition Delay Fraction (es haben also 50 % bzw. 95 % der Masse an unverbranntem Gemisch im Brennraum

eine kleinere Ignition Delay Fraction) sowie der Maximalwert aus allen Zellen. Die Minima der Streubänder sind in dieser Auswertung nicht aussagekräftig, da immer Zellen existieren, die formal zum Brennraum zählen, die aber nicht zünden können, etwa Zellen in den Ventilspalten der Auslassventile, in die kein Kraftstoff gelangt.

Auch die Verläufe in Abbildung 6.30 zeigen wie erwartet einen Anstieg bis zum ersten Maximum im Bereich des oberen Totpunkts, dann ein Abfallen bis zum Zündzeitpunkt und zuletzt einen raschen Anstieg nach Einsetzen der regulären Verbrennung. Zu Beginn weist der Verlauf einen sehr großen Streubereich auf, der dann aber nach Einsetzen der regulären Verbrennung schnell kleiner wird. Dieser Effekt ist auf die Ausbreitung der Flamme zurückzuführen. Da bereits verbrannte Bereiche in der Auswertung nicht mehr berücksichtigt werden, wird das Streuband schmaler, wenn überdurchschnittlich zündwillige Zellen verbrennen.

Ebenso ist sichtbar, dass es im berechneten Betriebspunkt nicht zur Selbstzündung kommt. Die Flamme verzehrt das gesamte unverbrannte Gemisch noch bevor der Verlauf des Maximalwerts die Selbstzündgrenze erreicht. Der starke Abfall der Kurven gegen Ende der Verbrennung deutet darauf hin, dass die letzten verbleibenden Frischgemischbereiche extrem zündunwillig sind. Dies lässt sich damit erklären, dass es sich um wandnahe Bereiche handelt, die im Vergleich zum übrigen Brennraum eine deutlich niedrigere Temperatur aufweisen.

Zu beachten ist bei dieser Betrachtung natürlich, dass die tatsächlichen Verläufe im Motor auch Zyklusschwankungen unterworfen sind. Dies betrifft gerade den Zeitbereich der Verbrennung. Da die Entflammung und Verbrennung im Ottomotor starken Schwankungen unterliegt, können für einzelne Zyklen auch die Verläufe der Zündwilligkeit anders verlaufen.

Für die Betrachtung der Vorentflammungsneigung sind diese Zyklenschwankungen weniger bedeutend. Aufgrund der frühen Einspritzung und der daraus resultierenden langen Zeitspanne, die für die Gemischbildung zur Verfügung steht, kann angenommen werden, dass Unterschiede beim Einströmen oder in der Einspritzung bis zum Erreichen des oberen Totpunkts weitgehend durch turbulente Mischungsprozesse ausgeglichen werden.

In dem für Vorentflammung entscheidenden Kurbelwinkelbereich um den oberen Totpunkt erreicht die Zündwilligkeit im Mittel nur einen Wert von etwa 0,3. Allerdings weist die räumliche Verteilung sehr große Streuungen auf, es werden Maximalwerte von fast 0,8 erreicht. Die Betrachtung des 95 %-Quantil-Verlaufs offenbart jedoch, dass diese großen Werte auf sehr kleine Brennraumbereiche beschränkt sind. Für 95 % der Zylinderfüllung liegt der Wert bei unter 0,4.

Zur Auslösung der Vorentflammung kommen somit zwei Möglichkeiten in Betracht: Es können entweder kleine Störungen auftreten, die einen Brennraumbereich mit großer Zündwilligkeit betreffen, oder starke Störungen, die praktisch unabhängig von den Umgebungsbedingungen immer zur Selbstzündung führen.

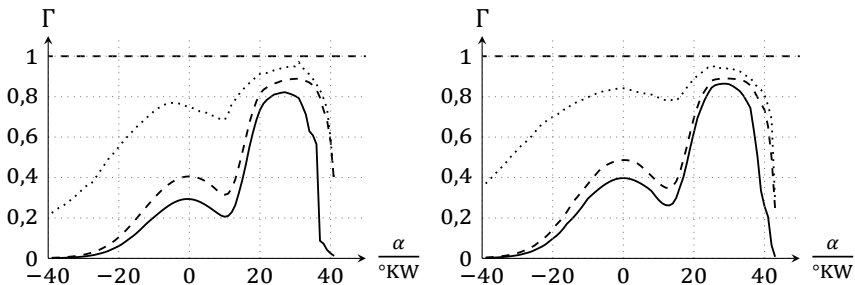


Abbildung 6.31: Verlauf der Zündwilligkeit für Direkteinspritzung (links) und Saugrohreinspritzung (rechts).

Welche der beiden Möglichkeiten zutrifft, hängt somit vom konkreten Auslösemechanismus ab. Wenn es sich beispielsweise um sehr heiße Partikel handelt, ist die resultierende Störung möglicherweise so groß, dass die Selbstzündwilligkeit keine Rolle spielt. Bei Tropfen als Zündauslöser kann der lokale Zustand aber durchaus eine Rolle spielen [Dah10a].

Zur Bewertung des Risikos unerwünschter Selbstzündung ist es erforderlich, neben der Zündwilligkeit auch den Einfluss möglicher Störungen zu quantifizieren. Dies erweist sich in der Praxis als schwierig, da zur Bewertung einzelner Störungen die zugrundeliegenden Mechanismen genau bekannt sein müssen. So ist es beispielsweise recht einfach, die Zündwilligkeit bei lokal erhöhter Temperatur zu berechnen. Im Motor treten allerdings Effekte auf, die in derartigen Simulationen nur schwer zu erfassen sind. Tropfen aus Motoröl oder Kraftstoff-Öl-Gemischen können während der Kompressionsphase weite Strecken im Brennraum zurücklegen. Während dieser Bewegung verdunstet einerseits Flüssigkeit, andererseits wird dem Gas Verdunstungswärme entzogen, was zu einer Abkühlung führt. Beide Prozesse werden zudem überlagert durch turbulente Mischungsprozesse. Um zu aussagekräftigen Ergebnissen zu kommen, müssen daher konkrete Fälle in der 3D-Simulation berechnet werden.

Die Methode kann jedoch auch eingesetzt werden, um unterschiedliche Betriebsstrategien zu vergleichen. Beispielsweise kann die in den experimentellen Untersuchungen verwendete Betriebsstrategie mit Direkteinspritzung mit einer Strategie mit Saugrohreinspritzung verglichen werden. Dazu wurde die Direkteinspritzung in der Simulation deaktiviert und durch eine homogene Zumischung des Kraftstoffs zur Ansaugluft ersetzt. Der Kraftstoffmassenbruch im Gemisch wurde dabei so gewählt, dass sich das in den Experimenten gemessene Luft-Kraftstoff-Verhältnis ergab. Drücke und Temperaturen wurden aus den Messungen mit Direkteinspritzung übernommen.

Abbildung 6.31 zeigt einen Vergleich der ermittelten Zündwilligkeiten für beide Fälle. Die Darstellung entspricht der in Abbildung 6.30, angegeben sind jeweils der

Median- der 95 %-Quantil- und der Maximumverlauf. Es ist deutlich zu erkennen, dass im Falle der Saugrohreinspritzung insgesamt höhere Werte der Ignition Delay Fraction erreicht werden, die Streuung aber etwas kleiner ausfällt. Der höhere Mittelwert kann durch den fehlenden Kühlungseffekt der Direkteinspritzung erklärt werden. Dieser Effekt beruht darauf, dass bei der Direkteinspritzung die Wärme, die zur Verdunstung des eingespritzten Kraftstoffs aufgebracht werden muss, der Zylinderfüllung entzogen wird, was zu einer Absenkung der Temperatur führt. In den Simulationsergebnissen ist diese Innenkühlung erkennbar. Der Unterschied in der Massenmitteltemperatur zwischen Saugrohr- und Direkteinspritzung am Ende der Kompression beträgt ca. 15 °C.

Die geringere Schwankungsbreite der Ignition Delay Fraction bei Saugrohreinspritzung ist auf den deutlich höheren Homogenisierungsgrad zurückzuführen. Abbildung 6.32a zeigt die räumliche Verteilung am oberen Totpunkt für beide Betriebsstrategien. Während im Falle der Saugrohreinspritzung die Zündwilligkeit im gesamten Brennraum nahezu konstant ist, ist bei der Direkteinspritzung ein deutlicher Unterschied zwischen Ein- und Auslassseite zu erkennen.

Die Ursache für diesen Unterschied wird aus den Abbildungen 6.32b und 6.32c ersichtlich. Diese zeigen die räumlichen Verteilungen von Temperatur und Kraftstoffmassenbruch jeweils für beide Betriebsstrategien. Bei der Saugrohreinspritzung ist der Kraftstoff homogen im gesamten Brennraum verteilt. Inhomogenitäten, die beispielsweise aus einer Ungleichverteilung von rückgehaltenem Restgas resultieren könnten, sind nicht zu erkennen. Ebenso ist die Temperaturverteilung nahezu homogen. Einzig durch den Wärmeübergang an die Brennraumwände kommt es zu Temperaturunterschieden, die wandnahen Bereiche sind durchweg kälter als das freie Gas.

Völlig anders stellt sich die Situation bei der Benzindirekteinspritzung dar. Beide Größen weisen hier deutliche Ungleichverteilungen auf, die über den Prozess der Verdampfung miteinander verknüpft sind. Auf der Einlassseite ist offensichtlich deutlich mehr Kraftstoff verdunstet als auf der Auslassseite. Dies macht sich einerseits durch einen höheren Kraftstoffmassenbruch, andererseits aber auch durch eine niedrige Temperatur bemerkbar. Ursache für diesen Zusammenhang ist der bereits genannte Kühlungseffekt der Verdunstung.

Die Auswirkungen der Verdunstung auf die Zündwilligkeit sind, wie Abbildung 6.32a zeigt, nicht einheitlich. Generell weisen Gemische mit hohen Temperaturen und fetten Zusammensetzungen kürzere Zündverzugszeiten auf. Somit treten weder in den fetten, aber kühlen Bereiche auf der Einlassseite noch in den heißen, aber mageren Bereiche unter den Auslassventilen besonders hohe Zündwilligkeiten auf. Stattdessen liegt der kritische Bereich für das Auftreten von Selbstzündung in einem Bereich mit mittleren Temperaturen und mittlerem Kraftstoffmassenbruch. Auch dieser Effekt hat zur Folge, dass der räumliche Mittelwert der Zündwilligkeit beim Betrieb mit Direkteinspritzung unter dem Niveau der Saugrohreinspritzung bleibt.

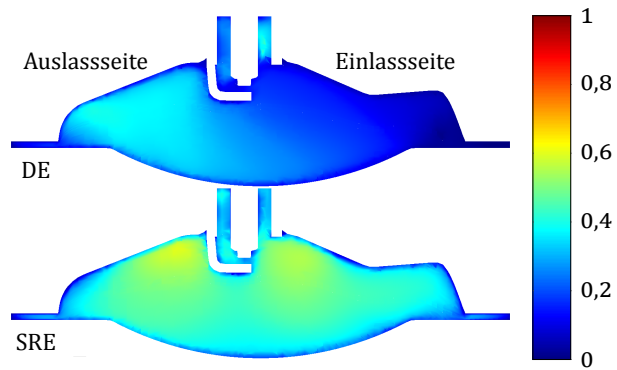
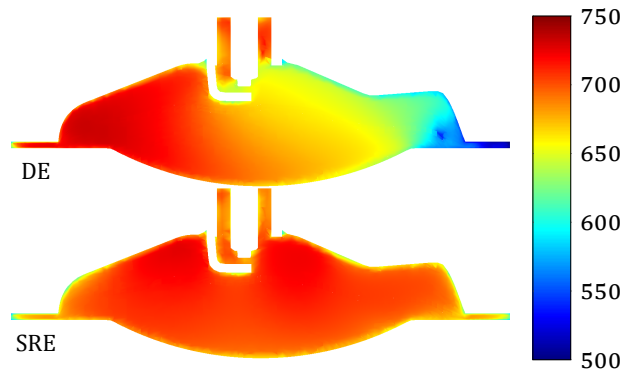
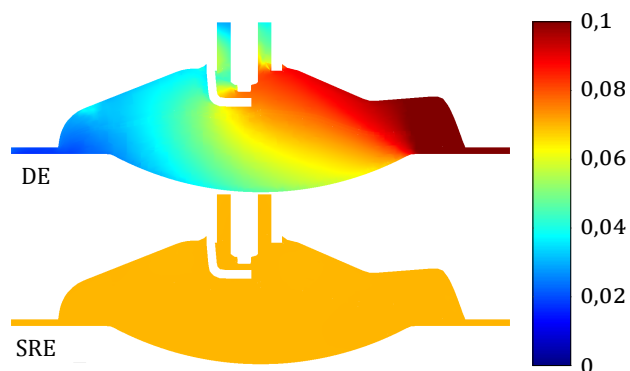
(a) Ignition Delay Fraction Γ .(b) Temperatur T in K.(c) Kraftstoffmassenbruch y_K .

Abbildung 6.32: Vergleich zwischen Direkteinspritzung und Saugrohr-einspritzung. Schnitt durch die Zylindermittelsebene.

Für die Vorentflammungsempfindlichkeit bedeutet dies, dass die Neigung zur Selbstzündung beim Betrieb mit Saugrohreinspritzung höher ist als bei Verwendung von Direkteinspritzung. Dabei ist allerdings zu berücksichtigen, dass bei der Simulation der Saugrohreinspritzung der Füllungsverlust durch die fehlende Innenkühlung nicht kompensiert wurde. Bei entsprechend stärkerer Ladeluftkühlung würde die Selbstzündwilligkeit ebenfalls absinken.

7 Zusammenfassung

Die Reduzierung des Kraftstoffverbrauchs ist eines der wichtigsten Ziele bei der Entwicklung von neuen Ottomotoren. Es existieren unterschiedliche Konzepte, mit denen das Grundproblem dieser Motoren, die Drosselverluste im Teillastbetrieb, reduziert werden können. Steht ein vollvariabler Ventiltrieb zur Verfügung, dann kann der Motor durch geeignete Wahl der Ventilsteuerzeiten ungedrosselt, aber trotzdem mit reduzierter Füllung bei stöchiometrischer Gemischzusammensetzung betrieben werden. Andernfalls kann die Entdrosselung mit der strahlgeführten Benzindirekteinspritzung kombiniert werden, bei der nur in unmittelbarer Nähe der Zündkerze ein entflammbares Gemisch platziert wird, auf den gesamten Brennraum bezogen jedoch ein mageres Luft-Kraftstoff-Verhältnis vorliegt. Als weiteres Magerbrennverfahren kommen HCCI-Brennverfahren mit starker Luft- oder Abgasverdünnung in Frage. Das Problem der Entflammbarkeit magerer Gemische wird hier dadurch gelöst, dass das Gemisch nicht mit einer Zündkerze gezündet wird, sondern durch Selbstzündung. Neben diesen Strategien, die darauf abzielen, die Drosselverluste im Teillastbetrieb zu vermeiden, existieren auch Ansätze, bei denen der Teillastbetrieb durch Betriebspunktverschiebung vermieden wird. Dabei werden Motoren mit kleinem Hubvolumen eingesetzt, deren Nennleistungsdefizit durch Aufladung kompensiert wird.

Alle diese modernen Verfahren liefern neue Herausforderungen an die numerische Simulation des Motorprozesses im Rahmen der Brennverfahrensentwicklung. Besonders für die Benzinselbstzündung sowie die Verknüpfung von Selbstzündung und Flammenfrontverbrennung existieren noch keine allgemeingültigen Modelle. Dies betrifft vor allem die HCCI-Brennverfahren, aber auch Downsizing-Verfahren, da bei diesen die eingesetzten Motoren spezifisch höher belastet werden, was das Auftreten von Verbrennungsanomalien begünstigt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde in Zusammenarbeit mit dem Institut für Technische Thermodynamik am Karlsruher Institut für Technologie ein Verbrennungsmodell entwickelt, das einen Beitrag dazu leistet, diese Lücke in der Modellierung des Motorprozesses zu schließen. Das Modell wurde in Form eines Fortran-Moduls für den 3D-CFD-Code *STAR-CD* implementiert. Es handelt sich um ein übergeordnetes Modell, das unterschiedliche Aspekte der Simulation wie die Zeitschrittweitensteuerung und Ausgabe von Ergebnisgrößen sowie die Übergabe von thermochemischen Daten wie Speziesmassenbrüchen, Drücken und Temperaturen zwischen CFD-Code und Verbrennungsmodell abdeckt. Das Verbrennungsmodell umfasst Teilmodelle für reguläre Flammenfrontverbrennung sowie für homogene Selbst-

zündung. Sein modularer Aufbau ermöglicht jedoch auch die Einbindung weiterer Untermodelle.

Sowohl das Untermodell für die Flammenfrontverbrennung als auch das Selbstzündungsmodell basieren auf älteren Arbeiten. Das Modell der Flammenfrontverbrennung ist eine abgewandelte Version des Eingleichungsmodells nach Weller [Wel94]. Dieses wurde erweitert um eine Möglichkeit, die laminare Flammengeschwindigkeit aus Daten von detaillierten Flammensimulationen abzuschätzen. Das Selbstzündungsmodell wurde von Hensel in Zusammenarbeit mit dem Institut für Technische Thermodynamik entwickelt [Hen09]. Bisher konnte in diesem Modell ausschließlich ein Transportansatz verwendet werden, bei dem der Wert der Fortschrittsvariable als Skalar im Kontext der CFD-Simulation transportiert wurde und alle weiteren Größen zur Beschreibung des Reaktionssystems aus den Momentanwerten des Strömungsfelds berechnet wurden. Es wurde nun um einen weiteren Ansatz ergänzt, bei dem der Zustand des Reaktionssystem aus den akkumulierten Änderungen im CFD-Strömungsfeld unter Berücksichtigung eines chemischen Quellterms berechnet wird. Die ermittelten Zustandsänderungen im CFD-Code werden in jedem Zeitschritt in den zulässigen Zustandsraum, der durch die im Rahmen der Verbrennungsmodellierung vorausberechneten Zündverläufe definiert ist, projiziert. Für diese Projektion können Nebenbedingungen formuliert werden, wodurch gewährleistet werden soll, dass das Modell Störungen auf physikalisch sinnvolle Weise berücksichtigt.

Die Funktionsfähigkeit des Selbstzündmodells wurde anhand von Berechnungen der Selbstzündung in homogenen Reaktoren validiert. Dazu wurden unter definierten Bedingungen Zündverläufe simuliert und die Zündverzugszeiten mit denen aus Simulationen auf Grundlage von detaillierter Reaktionskinetik verglichen. Dieser Vergleich wurde bei unterschiedlichen Drücken jeweils für einen großen Bereich von Anfangstemperaturen vorgenommen. Außerdem wurde bei den Validierungsrechnungen der Einfluss von Abmagerung sowie von Verdünnung mit Abgas untersucht. Sowohl bei den isochoren als auch bei den isobaren Rechnungen ergab sich eine gute Übereinstimmung.

Im zweiten Teil der Arbeit wurden verschiedene Anwendungsbeispiele für das Verbrennungsmodell behandelt. Zunächst wurden die beiden Anwendungsfälle vorgestellt, bei denen die Untermodelle zu Flammenfrontverbrennung und Selbstzündung praktisch unabhängig voneinander arbeiten.

Für die reguläre, funkengezündete Verbrennung konnte gezeigt werden, dass das Flammenmodell eine plausible Flammenausbreitung liefert. Ebenso weist der resultierende Zylinderdruckverlauf, der sich bei der Simulation der Verbrennung ergab, nur geringe Abweichungen vom mittleren gemessenen Verlauf auf, die zudem innerhalb der Schwankungsbreite der Zyklusschwankungen liegen.

Als Anwendungsbeispiel für das Selbstzündungsmodell wurde die HCCI-Verbrennung gewählt. Aufgrund der Komplexität des Brennverfahrens war bei den ex-

perimentellen Untersuchungen zu dieser Betriebsstrategie ein deutlich höherer Aufwand nötig. Um eine geeignete Kombination von Ventilsteuerzeiten festzulegen, wurden zunächst Steuerzeitenkennfelder aufgezeichnet. Auf Grundlage dieser Kennfelder wurde dann ein Referenzbetriebspunkt definiert. Da die Selbstzündung stark vom verwendeten Kraftstoff abhängt, wurde dann ein Kraftstoffvergleich zwischen dem für die Kennfeldvermessung verwendeten EuroSuper und dem in den Simulationen verwendeten TRF-Kraftstoff durchgeführt. Es zeigte sich, dass unter den zuvor festgelegten Referenzeinstellungen mit dem TRF-Kraftstoff kein stabiler Motorbetrieb möglich war, weshalb für die folgenden Untersuchungen der Einspritzzeitpunkt nochmals angepasst werden musste. Unter Verwendung eines Systems aus synchronisierten Hochgeschwindigkeitskameras konnte die räumliche Lage der Selbstzündorte im HCCI-Betrieb ermittelt werden. Anhand dieser Ergebnisse konnte gezeigt werden, dass das verwendete Selbstzündungsmodell in der Lage ist, den Ort der Selbstzündung richtig vorherzusagen.

Neben diesen Fällen mit reiner Flammenfrontverbrennung und reiner Selbstzündung wurde außerdem die Vorentflammung als komplexerer Anwendungsfall untersucht. Zu Beginn der Untersuchungen standen zu diesem Phänomen, das erst in den letzten Jahren mit der zunehmenden Verbreitung von Downsizing-Motoren an Bedeutung gewonnen hat, nur wenige Informationen zur Verfügung. Es wurden daher umfangreiche experimentelle und numerische Untersuchungen durchgeführt, um Hinweise auf seine Ursache zu gewinnen. Dazu wurden zunächst alle potentiellen Ursachen systematisch identifiziert. Die Abhängigkeit der Vorentflammungshäufigkeit von den motorischen Randbedingungen wurde im Rahmen von Temperatur- und Ladeluftvariationen untersucht. Ein erster deutlicher Hinweis auf die Ursache für das Auftreten von Vorentflammung lieferte eine Kraftstoffvariation. Hier konnte eine deutliche Korrelation der Vorentflammungshäufigkeit mit dem Verlauf der Siedelinie des verwendeten Kraftstoffs im Temperaturbereich von 120 °C bis 130 °C festgestellt werden. Je höher der Anteil an bereits verdampftem Kraftstoff in diesem Temperaturbereich war, um so kleiner war die Vorentflammungsneigung. Als Ergebnis der Untersuchungen wurde ein Mechanismus als wahrscheinlichste Ursache für Vorentflammung im verwendeten Versuchsmotor vorgeschlagen, der darauf basiert, dass der Kraftstoff, der aus dem Einspritzstrahl an die Brennraumwand gelangt, dort den Ölfilm verdünnt, was die Wahrscheinlichkeit erhöht, dass sich Tropfen aus dem Feuerstegbereich lösen, die im Brennraum Selbstzündung auslösen.

Abschließend wurden Einsatzmöglichkeiten der CFD-Simulation bei der Untersuchung des Phänomens beschrieben. Es wurde eine Erweiterung des Verbrennungsmodells vorgestellt, anhand derer sich die Neigung zur Selbstzündung quantifizieren lässt. Dies kann einerseits verwendet werden, um räumliche Unterschiede aufzulösen, andererseits dazu, unterschiedliche Betriebsstrategien miteinander zu vergleichen. Als Beispiel für einen derartigen Vergleich wurde der in den experimentellen Untersuchungen verwendete Strategie mit Benzindirekteinspritzung

die Betriebsstrategie mit Saugrohreinspritzung gegenübergestellt. Dabei konnten sowohl in den mittleren Zündwilligkeiten als auch in der räumlichen Verteilung deutliche Unterschiede aufgezeigt werden.

Es konnte somit gezeigt werden, dass das Verbrennungsmodell in der Lage ist, unterschiedliche Verbrennungsmodi abzudecken. Gleichwohl muss festgestellt werden, dass es noch weiterer Entwicklungsarbeit bedarf, um das Modell tatsächlich universell einsetzbar zu machen. Die bisher verwendeten Modelle sind einfach und robust, weisen aber auch Schwächen auf.

Das Selbstzündungsmodell kann verbessert werden, indem die Funktion zur schrägen Projektion der Zustandsänderungen robuster gestaltet wird. Dazu muss die Wahl der Nebenbedingungen überdacht werden. Außerdem muss eventuell die Methode der Tabellenkorrektur weiter verfeinert werden, um diesen Nebenbedingungen gerecht zu werden. Eine weitere Verbesserungsmöglichkeit liegt in der Einbeziehung der Varianz des Kraftstoffmassenbruchs in die Berechnung der Reaktionskinetik. Ein erstes einfaches Teilmodell dazu wurde bereits implementiert, aber noch nicht für Simulationen eingesetzt.

Ebenso werden die Möglichkeiten, die die bereits vorhandenen REDIM-Tabellen zur Modellierung der Flammenfrontverbrennung bieten, bisher nur unzureichend genutzt. Hier ist eine Weiterentwicklung des Flammenmodells – beispielsweise auch zur Berechnung von Nachreaktionen hinter der Flammenfront – denkbar.

Literatur

- [Abd84] R. Abdel-Gayed, D. Bradley et al.: „Lewis Number Effects on Turbulent Burning Velocity“. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 20. The Combustion Institute. 1984, S. 505–512. DOI: 10.1016/S0082-0784(85)80539-7 (siehe S. 10, 55).
- [Ama11a] M. Amann, T. Alger und D. Mehta: „The Effect of EGR on Low-Speed Pre-Ignition in Boosted SI Engines“. In: *SAE International Journal of Engines* 4.1 (2011), S. 235–245. DOI: 10.4271/2011-01-0339 (siehe S. 25, 94).
- [Ama11b] M. Amann, D. Mehta und T. Alger: „Engine Operating Condition and Gasoline Fuel Composition Effects on Low-Speed Pre-Ignition in High-Performance Spark Ignited Gasoline Engines“. In: *SAE International Journal of Engines* 4.1 (2011), S. 274–285. DOI: 10.4271/2011-01-0342 (siehe S. 25, 94).
- [Ama12] M. Amann, T. Alger et al.: „The Effects of Piston Crevices and Injection Strategy on Low-Speed Pre-Ignition in Boosted SI Engines“. In: *SAE International Journal of Engines* 5.3 (2012), S. 214–224. DOI: 10.4271/2012-01-1148 (siehe S. 26, 94).
- [And09] J. C. G. Andrae und R. A. Head: „HCCI Experiments with Gasoline Surrogate Fuels Modeled by a Semidetailed Chemical Kinetic Model“. In: *Combustion and Flame* 156.4 (2009), S. 842–851. DOI: 10.1016/j.combustflame.2008.10.002 (siehe S. 56).
- [Bäu01] B. Bäuerle: „Untersuchung der zeitlichen Entwicklung von Klopfzentren im Endgas eines Zweitakt-Ottomotors mittels zweidimensionaler laserinduzierter Fluoreszenz von Formaldehyd“. Dissertation. Universität Stuttgart, 2001. URL: <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:bsz:93-opus-8557>, abgerufen am 06. 02. 2015 (siehe S. 18, 20).
- [Ben13] M.-S. Benzinger, R. Schießl et al.: *Numerische Simulation der Benzinselbstzündung. Abschlussbericht über das FVV-Vorhaben Nr. 1022*. FVV Forschungsheft Nr. 1023. 2013 (siehe S. 44, 45).
- [Ber06] L. Bergmann und C. Schaefer: *Lehrbuch der Experimentalphysik*. Bd. 5. Gase, Nanosysteme, Flüssigkeiten. Berlin: de Gruyter, 2006. ISBN: 3-11-017484-7 (siehe S. 54).

- [Bor85] R. Borghi: „On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames“. In: *Recent Advances in the Aerospace Sciences: In Honor of Luigi Crocco on his Seventy-Fifth Birthday*. Hrsg. von C. Casci. New York: Plenum Press, 1985. ISBN: 0-306-41079-6 (siehe S. 14).
- [Cha14] E. Chapman, R. Davis et al.: *Fuel Octane and Volatility Effects on the Stochastic Pre-Ignition Behavior of a 2.0L Gasoline Turbocharged DI Engine*. SAE Technical Paper 2014-01-1226. 2014. DOI: 10.4271/2014-01-1226 (siehe S. 94).
- [Cle26] D. Clerk: „Investigations on gaseous explosions. Part II. Explosive reactions considered in reference to internal combustion engines. Introductory survey“. In: *Transactions of the Faraday Society* 22 (1926), S. 338–340. DOI: 10.1039/TF9262200338 (siehe S. 23).
- [Dah10a] C. Dahnz, K.-M. Han et al.: „Investigations on Pre-Ignition in Highly Supercharged SI Engines“. In: *SAE International Journal of Engines* 3.1 (2010), S. 214–224. DOI: 10.4271/2010-01-0355 (siehe S. 26, 81, 103).
- [Dah10b] C. Dahnz, H. Kubach et al.: *Vorentflammung in Ottomotoren. Abschlussbericht über das FVV-Vorhaben Nr. 931*. FVV Forschungsheft Nr. 907. 2010 (siehe S. 81, 84–93).
- [Dah10c] C. Dahnz, S. Palaveev et al.: „Faseroptische Untersuchungsmethoden zur Analyse von Verbrennungsanomalien in Ottomotoren“. In: *Ottomotorisches Klopfen – irreguläre Verbrennung*. Hrsg. von M. Kratzsch und M. Günther. Renningen: expert Verlag, 2010. ISBN: 978-3-8169-3047-1 (siehe S. 35).
- [Dah10d] C. Dahnz und U. Spicher: „Irregular combustion in supercharged spark ignition engines – pre-ignition and other phenomena“. In: *International Journal of Engine Research* 11.6 (2010), S. 485–498. DOI: 10.1243/14680874jer609 (siehe S. 25, 97).
- [Dah11] C. Dahnz, H. Kubach et al.: „Vorentflammung und andere Selbstzündungsphänomene in Ottomotoren – Thermodynamische Untersuchungen zu Ursachen, Wirkung und Vermeidung“. In: *13. Tagung „Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors“*. (22.–23. Sep. 2011). Hrsg. von H. Eichlseder. Verlag der Technischen Universität Graz, 2011. ISBN: 978-3-85125-177-7 (siehe S. 97, 98).
- [Dam40] G. Damköhler: „Der Einfluss der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasgemischen“. In: *Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte Chemie* 46 (1940), S. 601–626. DOI: 10.1002/bbpc.19400461102 (siehe S. 10, 11).
- [Din14] S. F. Dingle, A. Cairns et al.: *Lubricant Induced Pre-Ignition in an Optical SI Engine*. SAE Technical Paper 2014-01-1222. 2014. DOI: 10.4271/2014-01-1222 (siehe S. 26, 94).

- [Döh13] A. Döhler und S. Pritze: *A contribution to better understanding the pre-ignition phenomenon in highly charged internal combustion engines with direct fuel injection*. 4. IAV-Tagung Ottomotorisches Klopfen, Berlin. 2013 (siehe S. 26, 94).
- [Dyk99] J. Dykyj, J. Svoboda et al.: *Landolt-Börnstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series. Group IV, Vol. 20A: Vapor Pressures of Chemicals*. Berlin, Heidelberg und New York: Springer, 1999. ISBN: 978-3-540-64735-5 (siehe S. 39).
- [Ern02] R. Ernst, S. Münzinger et al.: „Das Phänomen Glühzündung. Ursachen, Entstehung und Vermeidung“. In: *MTZ – Motortechnische Zeitschrift* 63.11 (2002), S. 916–924. DOI: 10.1007/bf03226660 (siehe S. 24, 25).
- [Fli01] R. Flierl, R. Hofmann et al.: „Der neue BMW Vierzylinder-Ottomotor mit VALVETRONIC“. In: *MTZ – Motortechnische Zeitschrift* 62.6 (2001), S. 450–463. DOI: 10.1007/bf03227343 (siehe S. 3).
- [Fra02] G. K. Fraidl, W. F. Piock et al.: „Homogene Selbstzündung – die Zukunft der Benzin-Direkteinspritzung?“ In: *MTZ – Motortechnische Zeitschrift* 63.10 (2002), S. 828–837. DOI: 10.1007/bf03226652 (siehe S. 26).
- [Gil95] L. P. Gilyazetdinov: „Heat Capacity of Petroleum Fractions“. In: *Chemistry and Technology of Fuels and Oils* 31.3-4 (1995), S. 135–138. DOI: 10.1007/bf00723932 (siehe S. 39).
- [Gol05] R. Golloch: *Downsizing bei Verbrennungsmotoren*. Berlin, Heidelberg und New York: Springer, 2005. ISBN: 978-3-540-23883-6 (siehe S. 3).
- [Göt92] J. Göttgens, F. Mauss und N. Peters: „Analytic Approximation of Burning Velocities and Flame Thicknesses of Lean Hydrogen, Methane, Ethylene, Ethane, Acetylene, and Propane Flames“. In: *24th Symposium on Combustion*. The Combustion Institute, 1992, S. 129–135. DOI: 10.1016/S0082-0784(06)80020-2 (siehe S. 53).
- [Gri08] M. Grigo, R. Wurms et al.: „Der neue 2,0-l-TFSI-Motor mit Audi valvelift system“. In: *ATZextra* 2 (2008), S. 30–35. DOI: 10.1365/s35778-008-0078-1 (siehe S. 31).
- [Gün04] M. Günthner: *Untersuchungen der Eigenschaften und Kontrollmöglichkeiten der homogen kompressionsgezündeten Verbrennung von Ottokraftstoff*. Berlin: Logos, 2004. ISBN: 3-8325-0788-4 (siehe S. 2, 27, 70).
- [Ham] Hamamatsu Photonics K. K.: *Datenblatt R7400*. URL: http://www.calm.uni-osnabrueck.de/cms/download.php?cat=30_Microscopes&file=transmission_Detector_R7400.pdf, abgerufen am 06. 02. 2015 (siehe S. 33, 34).

- [Hen07] S. Hensel, W. Sauter et al.: „Numerische Simulation des Reaktionsfortschrittes in einem Ottomotor mit kompressionsgezündeter Verbrennung“. In: *11. Tagung „Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors“*. (20.–21. Sep. 2007). Hrsg. von H. Eichlseder. Verlag der Technischen Universität Graz, 2007. ISBN: 978-3902465849 (siehe S. 45).
- [Hen09] S. Hensel: *Modellierung der Verbrennung und des Wandwärmeübergangs in Ottomotoren mit homogen kompressionsgezündeter Verbrennung*. Berlin: Logos, 2009. ISBN: 978-3-8325-2235-3 (siehe S. 43, 46, 108).
- [Her92] R. Herweg und R. R. Maly: *A Fundamental Model for Flame Kernel Formation in S.I. Engines*. SAE Technical Paper 922243. 1992. DOI: 10.4271/922243 (siehe S. 55).
- [Het12] A. Hettinger: *Identifikation der Stellgrößen im Luft- und Kraftstoffpfad und deren Einfluss auf die Steuerung eines aufgeladenen Ottomotors an der Klopfgrenze*. München: Verlag Dr. Hut, 2012. ISBN: 3-8439-0694-7 (siehe S. 4).
- [Hey88] J. B. Heywood: *Internal Combustion Engine Fundamentals*. New York: McGraw-Hill, 1988. ISBN: 0-07-100499-8 (siehe S. 20, 24).
- [Hof08] P. Hofmann, M. Kieberger et al.: *Auslösemechanismen und Einflussfaktoren auf Vorentflammungsphänomene an hochaufgeladenen Ottomotoren*. 18. Aachener Kolloquium Fahrzeug- und Motorentechnik. 2008 (siehe S. 81).
- [Joo06] F. Joos: *Technische Verbrennung*. Berlin und Heidelberg: Springer, 2006. ISBN: 3-540-34333-4 (siehe S. 16).
- [Kau05] M. Kaufmann: „Thermodynamische Analyse des kompressionsgezündeten Benzinmotors“. Dissertation. Technische Universität Graz, 2005 (siehe S. 26).
- [Lan49] A. Langen: *Nicolaus August Otto: der Schöpfer des Verbrennungsmotors*. Stuttgart: Frankhsche Verlagshandlung, W. Keller & Co., 1949 (siehe S. 23).
- [Law88] C. Law: „Dynamics of Stretched Flames“. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 22. The Combustion Institute. 1988, S. 1381–1402. DOI: 10.1016/s0082-0784(89)80149-3 (siehe S. 55).
- [Liv55] J. Livengood und P. Wu: „Correlation of Autoignition Phenomena in Internal Combustion Engines and Rapid Compression Machines“. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 5. The Combustion Institute. 1955, S. 347–356. DOI: 10.1016/s0082-0784(55)80047-1 (siehe S. 97).

- [Maa11] U. Maas und V. Bykov: „The extension of the reaction/diffusion manifold concept to systems with detailed transport models“. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 33. 2011, S. 1253–1259. DOI: 10.1016/j.proci.2010.06.117 (siehe S. 54).
- [Maa88] U. Maas: „Mathematische Modellierung instationärer Verbrennungsprozesse unter Verwendung detaillierter chemischer Reaktionsmechanismen“. Dissertation. Universität Heidelberg, 1988 (siehe S. 45, 56).
- [Mag09] M. Magar, H. Wirbser et al.: „Numerical Study on the Impact of Stable Intermediates on Engine Combustion“. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting*. 2009. URL: http://www.combustion.org.uk/ECM_2009/P810361.pdf, abgerufen am 06. 02. 2015 (siehe S. 89).
- [Mag11] M. Magar, R. Schießl und U. Maas: *Premature flame initiation in SI engines: Modeling studies on the role of residual gas*. ICDERS 23rd, Irvine CA, USA. 2011 (siehe S. 89).
- [Mei97] K. Meier: „Berechnung der Verbrennung und Schadstoffbildung im Otto-Motor bei großen Abgasrückführaten“. Dissertation. Universität Karlsruhe (TH), 1997 (siehe S. 54, 55).
- [Mer11] G. P. Merker, C. Schwarz und R. Teichmann, Hrsg.: *Grundlagen Verbrennungsmotoren. Funktionsweise, Simulation, Messtechnik*. 5. Aufl. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2011. ISBN: 978-3-8348-1393-0 (siehe S. 4).
- [Mie08] G. Mie: „Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloider Metallösungen“. In: *Annalen der Physik*. 4. Ser. 25 (1908), S. 377–445. DOI: 10.1002/andp.19083300302 (siehe S. 35).
- [Mil42] C. D. Miller und H. L. Olsen: *Identification of Knock in NACA High-Speed Photographs of Combustion in a Spark-Ignition Engine*. NACA Report 761. 1942. DOI: 2060/19930091840 (siehe S. 23).
- [Mil45] C. D. Miller: *Relation Between Spark-Ignition Engine Knock, Detonation Wave, and Autoignition as Shown by High-Speed Photography*. NACA Report 855. 1945. DOI: 2060/19930091927 (siehe S. 23).
- [Nau05] A. Nauwerck, J. Pfeil et al.: *A Basic Experimental Study of Gasoline Direct Injection at Significantly High Injection Pressures*. SAE Technical Paper 2005-01-0098. 2005. DOI: 10.4271/2005-01-0098 (siehe S. 78).
- [Nie01] R. G. Nieberding: „Die Kompressionszündung magerer Gemische als motorisches Brennverfahren“. Dissertation. Universität Siegen, 2001 (siehe S. 27).
- [Oka14] Y. Okada, S. Miyashita et al.: *Study of Low-Speed Pre-Ignition in Boosted Spark Ignition Engine*. SAE Technical Paper 2014-01-1218. 2014. DOI: 10.4271/2014-01-1218 (siehe S. 26, 94).

- [Pal13a] S. Palaveev, M. Magar et al.: „Premature flame initiation in a turbocharged DISI engine – Numerical and experimental investigations“. In: *SAE International Journal of Engines* 6.1 (2013), S. 54–66. DOI: 10.4271/2013-01-0252 (siehe S. 26, 94, 96).
- [Pal13b] S. Palaveev, M. Magar et al.: *Simulations and Experimental Investigations of Intermittent Pre-Ignition Series in a Turbocharged DISI-Engine*. 4. IAV-Tagung Ottomotorisches Klopfen, Berlin. 2013 (siehe S. 26, 94).
- [Pet97a] N. Peters: *Four Lectures on Turbulent Combustion*. ERCOFTAC Summer School. Aachen, 15.–19. Sep. 1997 (siehe S. 4).
- [Pet97b] N. Peters: „Kinetic Foundation of Thermal Theory“. In: *Advances in Combustion Science: In Honor of Ya. B. Zel'dovich. Progress in Astronautics and Aeronautics*. Hrsg. von W. A. Sirignano, A. G. Merzhanov und L. de Luca. Bd. 173. 1997, S. 73–91. ISBN: 1-56347-178-7 (siehe S. 8).
- [Pet99] N. Peters: „The Turbulent Burning Velocity for Large-Scale and Small-Scale Turbulence“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 384 (1999), S. 107–132. DOI: 10.1017/s0022112098004212 (siehe S. 11–14).
- [Ran74] B. Rangert: „Hydrodynamic Piston Ring Lubrication With Reference to Lubrication Oil Consumption“. Dissertation. Chalmers University of Technology, Göteborg, 1974 (siehe S. 90).
- [Rei86] R. D. Reitz und R. Diwakar: *Effect of Drop Breakup on Fuel Sprays*. SAE Technical Paper 860469. 1986. DOI: 10.4271/860469 (siehe S. 37).
- [Ric23] H. R. Ricardo: *The internal-combustion engine, Vol. 2: High-speed engines*. London: Blackie, 1923 (siehe S. 23).
- [Rot10] P. Rothenberger, A. Zahdeh et al.: „Experimentelle Untersuchungen zur Vorentflammung an aufgeladenen Benzinmotoren in Kombination mit lichtintensivierter Hochgeschwindigkeitskamera und CFD“. In: *Ottomotorisches Klopfen – irreguläre Verbrennung*. Hrsg. von M. Kratzsch und M. Günther. Renningen: expert Verlag, 2010. ISBN: 978-3-8169-3047-1 (siehe S. 26, 94).
- [Sau05] W. Sauter, A. Nauwerck et al.: *High-Speed Visualisation of Combustion in Modern Gasoline Engines*. Second International Conference on Optical and Laser Diagnostics (ICOLAD), London. 2005 (siehe S. 33).
- [Sau07] W. Sauter: *Untersuchungen zur homogen kompressionsgezündeten Verbrennung mit Ventilunterschneidung und Benzin-Direkteinspritzung*. Berlin: Logos, 2007. ISBN: 978-3-8325-1762-5 (siehe S. 27, 30, 34).
- [Sau08] W. Sauter, S. Hensel et al.: *Untersuchung der Selbstzündungsmechanismen für einen HCCI-Benzinbetrieb im Hinblick auf NO_x und HC-Rohemissionen unter Berücksichtigung der Kennfeldtauglichkeit. Abschlussbericht über das FVV-Vorhaben Nr. 831*. FVV Forschungsheft Nr. 849. 2008 (siehe S. 43).

- [Sch06] H. R. Schwarz und N. Köckler: *Numerische Mathematik*. Wiesbaden: Teubner, 2006. ISBN: 978-3-8351-0114-2 (siehe S. 51).
- [Sch07] E. Schutting, A. Neureiter et al.: „Miller- und Atkinson-Zyklus am aufgeladenen Dieselmotor“. In: *MTZ – Motortechnische Zeitschrift* 68.6 (2007), S. 480–485. DOI: 10.1007/bf03227416 (siehe S. 4).
- [Sch08] R. Schießl: *Progress variable model: Recent improvements and treatment of perturbation terms*. Interne Präsentation. Institut für Technische Thermodynamik, Universität Karlsruhe (TH), 27. Feb. 2008 (siehe S. 48).
- [Sch13] E. Schünemann, A. Witt et al.: *Pre-ignition analysis on a turbocharged gasoline engine with direct injection*. 4. IAV-Tagung Ottomotorisches Klopfen, Berlin. 2013 (siehe S. 26, 94).
- [Sch14] F. Schumann: *Experimentelle Grundlagenuntersuchungen zum Katalysatorheizbetrieb mit strahlgeführter Benzin-Direkteinspritzung und Einspritzdrücken bis 800 bar*. Berlin: Logos, 2014. ISBN: 978-3-8325-3776-0 (siehe S. 78).
- [Som88] G. R. Somayajulu: „New Equations for Enthalpy of Vaporization from the Triple Point to the Critical Point“. In: *International Journal of Thermophysics* 9.4 (1988), S. 567–575. DOI: 10.1007/bf00503155 (siehe S. 39).
- [Spi12] U. Spicher: *History and Diagnostics of Irregular Combustion in Spark Ignition Engines*. COMODIA, Fukuoka, Japan. 2012 (siehe S. 94).
- [Spi86] U. Spicher und H.-P. Kollmeier: *Detection of Flame Propagation During Knocking Combustion by Optical Fiber Diagnostics*. SAE Technical Paper 861532. 1986. DOI: 10.4271/861532 (siehe S. 23).
- [Spi91] U. Spicher, H. Kröger und J. Ganser: *Detection of Knocking Combustion Using Simultaneously High-Speed Schlieren Cinematography and Multi Optical Fiber Technique*. SAE Technical Paper 912312. 1991. DOI: 10.4271/912312 (siehe S. 23).
- [STA12] STAR-CD 4.18: *Dokumentation*. CD-adapco, 2012 (siehe S. 37).
- [Sti03] G. Stiesch: *Modeling Engine Spray and Combustion Processes*. Berlin, Heidelberg und New York: Springer, 2003. ISBN: 978-3-642-05629-1 (siehe S. 37).
- [Tay35] G. Taylor: „Statistical Theory of Turbulence“. In: *Proceedings of the Royal Society A* 151 (1935), S. 421–444. DOI: 10.1098/rspa.1935.0158 (siehe S. 55).
- [Tur00] S. R. Turns: *An Introduction to Combustion*. 2. Aufl. Boston: McGraw-Hill, 2000. ISBN: 0-07-116910-5 (siehe S. 7).

- [Wal10] A. Waltner, U. Schaupp et al.: „Second-Generation Gasoline Direct Injection – Combination of Stratified-Charge and Homogeneous Combustion Systems“. In: *Automotive and Engine Technology: 10th Stuttgart International Symposium*. Wiesbaden: Vieweg+Teubner, 2010. ISBN: 978-3-8348-1301-5 (siehe S. 2).
- [War01] J. Warnatz, U. Maas und R. W. Dibble: *Verbrennung*. Berlin, Heidelberg und New York: Springer, 2001. ISBN: 3-540-42128-9 (siehe S. 10, 14–20).
- [Wed97] G. Wedler: *Lehrbuch der physikalischen Chemie*. Weinheim: Wiley-VCH, 1997. ISBN: 3-527-29481-3 (siehe S. 39).
- [Wel14] O. Welling, J. Moss et al.: „Measuring the Impact of Engine Oils and Fuels on Low-Speed Pre-Ignition in Downsized Engines“. In: *SAE International Journal of Fuels and Lubricants* 7.1 (2014), S. 1–8. DOI: 10.4271/2014-01-1219 (siehe S. 26, 94).
- [Wel93] H. G. Weller: *The Development of a New Flame Area Combustion Model Using Conditional Averaging*. Thermo-Fluids Section Report TF/9307. Department of Mechanical Engineering, Imperial College of Science Technology and Medicine. 1993 (siehe S. 52).
- [Wel94] H. G. Weller, S. Uslu et al.: *Prediction of Combustion in Homogeneous-Charge Spark-Ignition Engines*. COMODIA, Yokohama, Japan. 1994. URL: http://www.jsme.or.jp/esd/COMODIA-Procs/Data/003/C94_P163.pdf, abgerufen am 06.02.2015 (siehe S. 52, 108).
- [Wen07] P. Wenzel, R. Steiner et al.: *3D-CFD Simulation of DI-Diesel Combustion Applying a Progress Variable Approach Accounting for Detailed Chemistry*. SAE Technical Paper 2007-01-4137. 2007. DOI: 10.4271/2007-01-4137 (siehe S. 46).
- [Wes00] C. K. Westbrook: „Chemical Kinetics of Hydrocarbon Ignition in Practical Combustion Systems“. In: *Proceedings of the Combustion Institute*. Bd. 28. 2000, S. 1563–1577. DOI: 10.1016/S0082-0784(00)80554-8 (siehe S. 19, 20).
- [Wes88] C. K. Westbrook, J. Warnatz und W. J. Pitz: „A Detailed Chemical Kinetic Reaction Mechanism for the Oxidation of iso-Octane and n-Heptane Over an Extended Temperature Range and its Application to Analysis of Engine Knock“. In: *Symposium (International) on Combustion*. Bd. 22. The Combustion Institute. 1988, S. 893–901. DOI: 10.1016/S0082-0784(89)80098-0 (siehe S. 20).
- [Wil09] J. Willand, M. Daniel et al.: „Grenzen des Downsizing bei Ottomotoren durch Vorentflammung“. In: *MTZ – Motortechnische Zeitschrift* 70.5 (2009), S. 422–428. DOI: 10.1007/bf03225495 (siehe S. 26).

- [Wil96] R. C. Wilhoit, K. N. Marsh et al.: *Landolt-Börnstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series. Group IV, Vol. 8B: Thermodynamic Properties of Organic Compounds and their Mixtures*. Berlin, Heidelberg und New York: Springer, 1996. ISBN: 978-3-540-61029-8 (siehe S. 39).
- [Wir93] M. Wirth: *Die turbulente Flammeneausbreitung im Ottomotor und ihre charakteristischen Längenskalen*. Düsseldorf: VDI-Verlag, 1993. ISBN: 3-18-149312-0 (siehe S. 15).
- [Woh97] C. Wohlfahrt und B. Wohlfahrt: *Landolt-Börnstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. New Series. Group IV, Vol. 16: Surface Tension of Pure Liquids and Binary Liquid Mixtures*. Berlin, Heidelberg und New York: Springer, 1997. ISBN: 978-3-540-63276-4 (siehe S. 39).
- [Yil04] E. Yilmaz, T. Tian et al.: *The Contribution of Different Oil Consumption Sources to Total Oil Consumption in a Spark Ignition Engine*. SAE Technical Paper 2004-01-2909. 2004. DOI: 10.4271/2004-01-2909 (siehe S. 92).
- [Zac10a] J.-M. Zaccardi, O. Laget et al.: *Investigations on the Effects of In-Cylinder Charge Motion and Injection Mode on Pre-Ignition in Highly Boosted Spark Ignition Engines*. 19. Aachener Motorenkolloquium. 2010 (siehe S. 26, 94).
- [Zac10b] J.-M. Zaccardi und A. Pagot: „Statistical observations on pre-ignition in SI engines“. In: *Ottomotorisches Klopfen – irreguläre Verbrennung*. Hrsg. von M. Kratzsch und M. Günther. Renningen: expert Verlag, 2010. ISBN: 978-3-8169-3047-1 (siehe S. 25, 94).
- [Zah08] A. Zahdeh, P. Rothenberger und J. Schäfer: „Diagnosing Engine Combustion Using High Speed Photography in Conjunction with CFD“. In: *Beiträge. 8. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, Baden-Baden*. Mainz-Kastel: AVL Deutschland, 2008. ISBN: 978-3-00-022057-9 (siehe S. 81).
- [Zah11] A. Zahdeh, P. Rothenberger et al.: „Fundamental Approach to Investigate Pre-Ignition in Boosted SI Engines“. In: *SAE International Journal of Engines* 4.1 (2011), S. 246–273. DOI: 10.4271/2011-01-0340 (siehe S. 26, 94).
- [Zel38] Y. B. Zel'dovich und D. A. Frank-Kamenetskii: „A Theory of Thermal Propagation of Flame“. In: *Acta physicochimica U.R.S.S.* 9 (1938), S. 341–350 (siehe S. 8).