

## 2 Grundlagen und Stand der Technik

### 2.1 Grundlagen der ottomotorischen Verbrennung

Ausgangspunkt jeder phänomenologischer Modellierung von Verbrennungsprozessen ist das grundsätzliche Verständnis der dabei ablaufenden physikalischen und chemischen Vorgänge im Brennraum. Daher sollen zunächst die wichtigsten Grundlagen der Verbrennung im Ottomotor zusammenfassend dargestellt werden, sowohl für den konventionellen fremdgezündeten Betrieb als auch für die kontrollierte Benzinselbstzündung.

#### 2.1.1 Konventionelle ottomotorische Verbrennung

Beim konventionellen fremdgezündeten Ottomotor liegt zum Zündzeitpunkt im Brennraum ein nahezu homogenes, verdichtetes Kraftstoff-Luft-Gemisch in zündfähiger Zusammensetzung vor<sup>6</sup>. Durch eine elektrische Entladung zwischen den Elektroden der Zündkerze wird dem Gemisch dann lokal so viel Energie zugeführt, dass es zur Zündung und zur Ausbildung eines Flammenkerns kommt. Von diesem ausgehend kommt es dann zu einer Flammenausbreitung, durch die nach und nach der gesamte Brennraum erfasst wird. Da sie für das weitere Verständnis elementar sind, sollen die Vorgänge ab der Zündung im Einzelnen nachfolgend nochmals detailliert beschrieben werden.

##### 2.1.1.1 Zündung und Flammenkernbildung

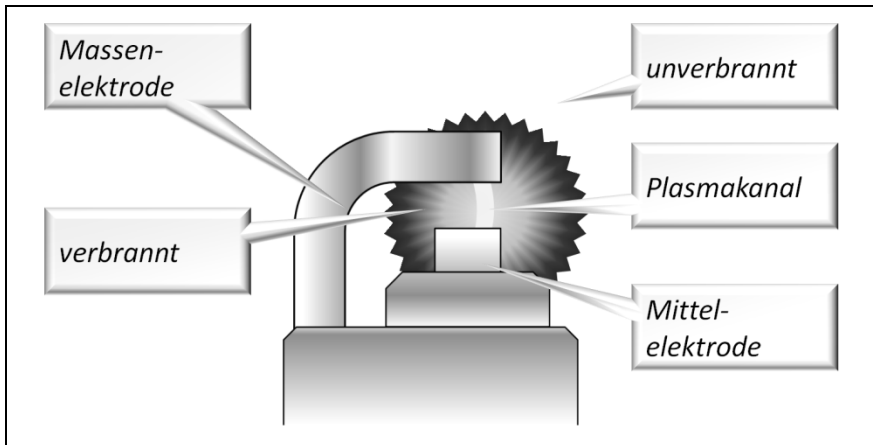
Durch das elektrische Feld, das von der Zündanlage zwischen den beiden Elektroden der Zündkerze aufgebaut wird, werden Ionen oder Elektronen im Gasgemisch auf ihrer freien Weglänge beschleunigt und kollidieren dabei mit Gasmolekülen. Durch den Stoß werden diese wiederum ionisiert und – je nach der kinetischen Energie des ankommenden Teilchens und der Bindungsenergie der Elektronen im Gasmolekül – eines oder mehrere Elektronen herausgelöst. Diese erfahren im elektrischen Feld ebenfalls eine Beschleunigung, sodass es zu einem

---

<sup>6</sup> Auf Besonderheiten der Verbrennung im Schichtbrennverfahren soll an dieser Stelle nicht vertieft eingegangen werden. Es sei hierzu auf [89] verwiesen.

selbstverstärkenden Effekt kommt. Durch diesen Vorgang der Stoßionisation<sup>7</sup> bildet sich schließlich innerhalb von Bruchteilen einer Mikrosekunden (etwa  $10^{-8}$  s) ein Plasmakanal von etwa 40  $\mu\text{m}$  Durchmesser auf der Funkenstrecke mit Temperaturen bis zu 60.000 K aus [27].

Nach diesem Durchbruchvorgang kommt es an der Oberfläche des Plasmas zur Entflammung und zur Bildung eines Flammenkerns, während dem System durch die Bogen- beziehungsweise Glimmentladung des Zündfunken weiterhin elektrische Energie zugeführt wird. Diese muss gemeinsam mit der durch die beginnenden chemischen Reaktionen freigesetzten Energie den Wärmestrom an die Zündkerzenoberflächen übersteigen, um ein stabiles Flammenkernwachstum zu ermöglichen [27], vergleiche *Abbildung 2.1*.

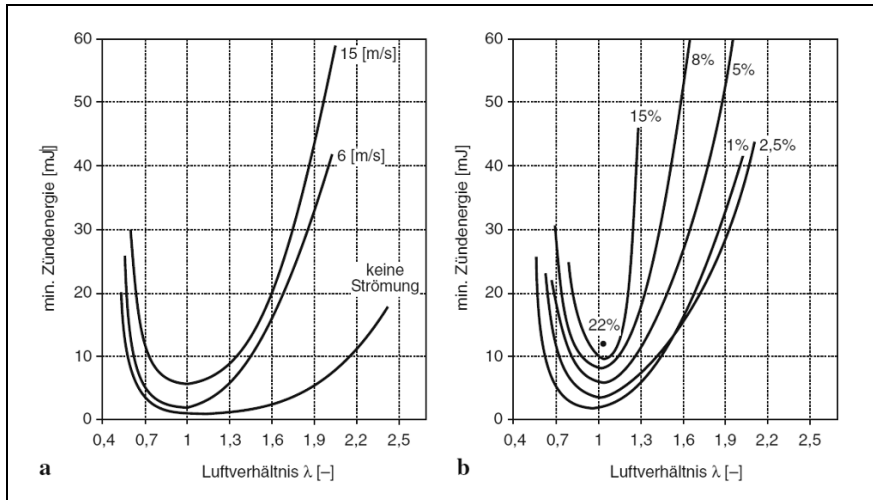


**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung der Verhältnisse während der Flammenkernbildung, nach [72]

Einen wesentlichen Einfluss auf die Ausbildung des Flammenkerns stellt dabei die lokale Strömungsgeschwindigkeit dar, die unter anderem vom globalen Turbulenzniveau abhängt. Zwar wird durch ein leichtes „Wegblasen“ des Flammenkerns die Kontaktoberfläche mit der Zündkerze verkleinert und Faltungsvorgänge in der Flammenoberfläche sowie der Transport von Radikalen dorthin beschleunigt, gleichzeitig erhöht sich damit jedoch auch durch die erzwungene Konvektion die Wärmeübergangszahl an der Kontaktfläche zur Zündkerze [27]. Zudem kann es bei höheren Strömungsgeschwindigkeiten auch zum Funkenabriss kommen [89]. Spätestens dann dominiert der negative Effekt, sodass mit

<sup>7</sup> Die Stoßionisation spielt bei vielen technischen Vorgängen eine Rolle. Vergleichbare Ereignisse laufen beispielsweise auch beim Einschalten einer Leuchtstoffröhre ab.

steigender Turbulenz eine immer höhere Zündenergie nötig wird, siehe *Abbildung 2.2*. Ebenfalls zu erkennen ist der mit zunehmendem Abstand vom stöchiometrischen Luftverhältnis gesteigerte Zündenergiebedarf.



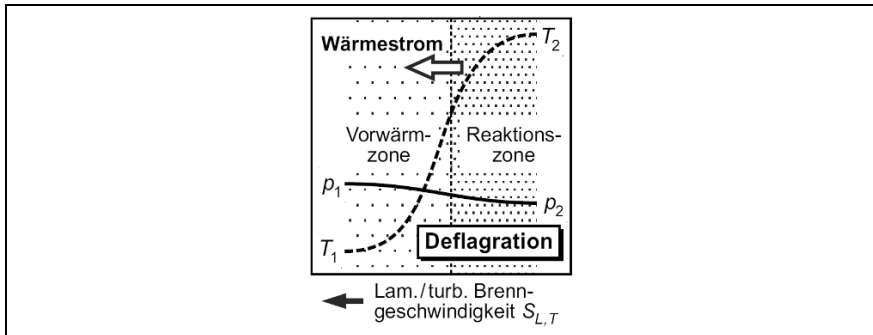
**Abbildung 2.2:** Minimaler Zündenergiebedarf in Abhängigkeit von Strömungsgeschwindigkeit (a) und Turbulenzintensität (b) für ein Propan-Luft-Gemisch bei  $p = 0,17$  bar, aus [6]

### 2.1.1.2 Flammenausbreitung

Ausgehend vom Flammenkern kommt es zu einer laminar-turbulenten Flammenausbreitung in das homogene, vorgemischte Luft-Kraftstoffgemisch.

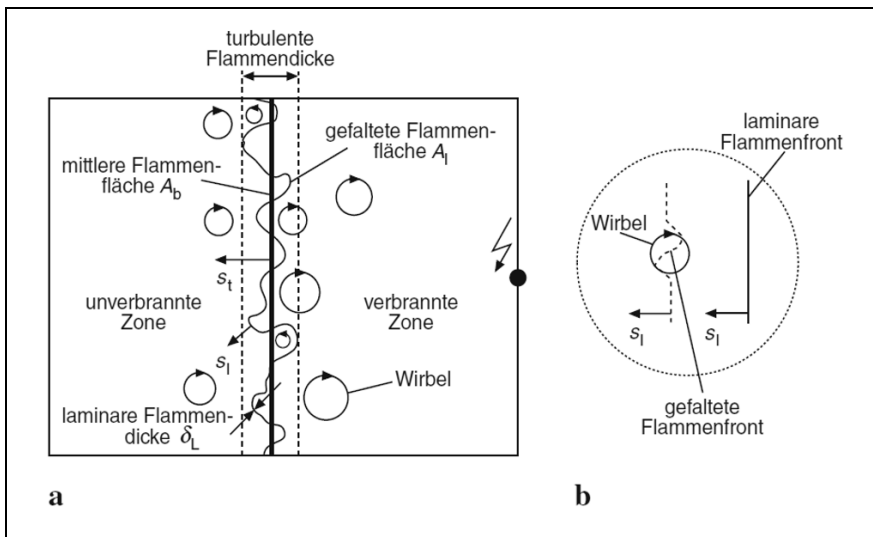
Zum Verständnis des zugrundeliegenden Mechanismus ist es sinnvoll, zunächst eine rein laminare Flammenausbreitung zu betrachten. Hierbei erfolgt ausgehend von einer heißen Reaktionszone durch die Mechanismen von Wärmeleitung und Diffusion eine Erwärmung<sup>8</sup> der vorgelagerten Vorwärmzone, bis selbige ebenfalls zur Zündung kommt [27]. Die Flamme breitet sich dabei senkrecht zu ihrer Oberfläche ins Unverbrannte aus. Ein solcher Ausbreitungsmechanismus wird als Deflagration bezeichnet [50], vergleiche *Abbildung 2.3*. Zu beachten ist dabei, dass die Flammendicke sehr dünn ist und damit ein steiler Temperaturgradient vorliegt [27], während der Druck nahezu konstant ist [50].

<sup>8</sup> Gleichzeitig werden durch die Diffusion auch chemisch aktive Spezies in die Vorwärmzone eingebracht, was die Zündung selbiger ebenfalls begünstigt.



**Abbildung 2.3:** Flammenausbreitung durch Deflagration, nach [50]

Bei einer turbulenten Flammenausbreitung bleibt dasselbe Grundprinzip enthalten, es kommt jedoch zu einer deutlichen Beschleunigung der Ausbreitung. Dabei wird die Flammenfront durch Wirbel des turbulenten Strömungsfelds gefaltet und in der Eindringzone findet eine Vermischung von Frischgemischbalen mit dem Abgas statt, sodass die Flamme makroskopisch dicker wird und eine deutlich größere Oberfläche besitzt, vergleiche *Abbildung 2.4*. Die genaue Beschreibung dieser Vorgänge erfordert die Modellierung der Turbulenz, vergleiche Kapitel 2.2.2.



**Abbildung 2.4:** Turbulente Flammenstruktur (a) und Modellvorstellung zur Faltung der laminaren Flammenoberfläche durch Wirbel (b), aus [27]

Die Flammenausbreitung läuft bei einer normalen Verbrennung prinzipiell nach diesem Mechanismus weiter, bis nahezu der gesamte Brennraum erfasst ist. In der letzten Ausbrandphase kann es jedoch zu Flammenlöschungen kommen [89] [69]:

- innerhalb eines Spaltes durch starke Abkühlung der Flammenfront, wodurch die Flamme nicht in den Spalt eindringen kann (insbesondere Feuersteg)
- bei Annäherung an kalte Brennraumwände („Wall-Quenching“)
- durch zu niedrige Flammengeschwindigkeiten, bedingt durch zu starken Temperaturabfall während der Expansion oder lokal zu mageres Gemisch („Flame-Quenching“)

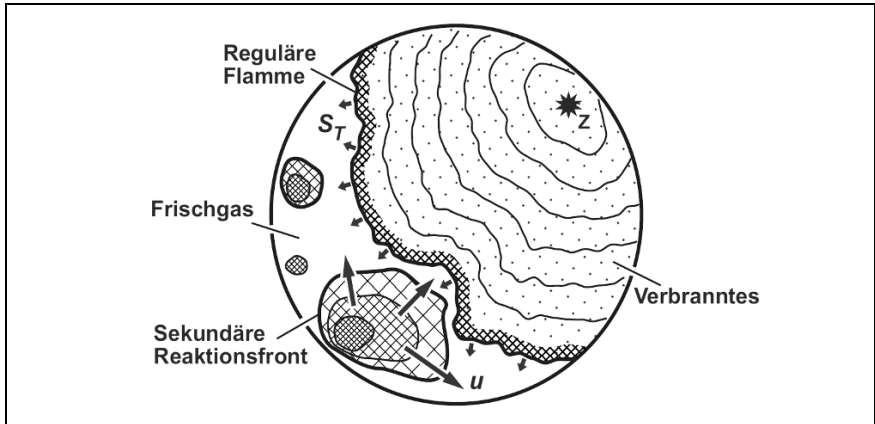
Hierdurch kommt es zu einer unvollkommenen Verbrennung und zur Entstehung von Kohlenwasserstoffemissionen.

#### 2.1.1.3 Verbrennungsanomalien

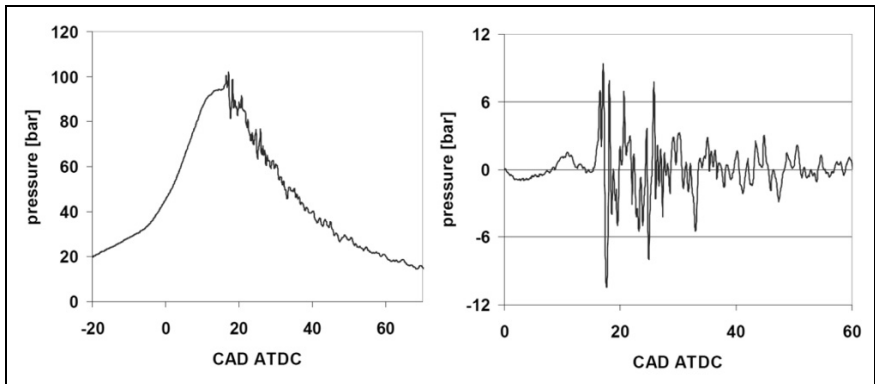
Neben dem oben beschriebenen normalen Vorgang der Verbrennung kann es auch zu davon abweichenden Verbrennungsabläufen kommen. Hierbei sind vor allem das Klopfen und Glühzündungen zu nennen.

Glühzündungen gehen von heißen Stellen im Brennraum aus, beispielsweise von den Elektroden der Zündkerze, den heißen Auslassventilen oder in den Brennraum hineinragenden scharfen Kanten [95]. Dabei kommt es durch die lokal hohen Temperaturen von über 1200 K zu einer Fremdzündung des anliegenden Gemischs, von der dem ausgehend es zu einer laminar-turbulenten Flammenfrontausbreitung ähnlich jener bei der normalen Verbrennung kommt [27]. Der Zeitpunkt der Glühzündung kann sowohl vor als auch nach dem Zündfunken liegen, ebenso ist nach einer Glühzündung auch noch ein nachfolgendes Klopfen möglich („klopfende Glühzündung“).

Beim Klopfen handelt es sich um eine unkontrollierte Selbstzündung von unverbrannten, noch nicht von der Flamme erfassten Gemischbereichen gegen Ende der Verbrennung („Endgas“). Diese werden durch die fortschreitende Flammenfront aufgrund des Dichteunterschieds komprimiert und erhitzt, wobei sich die Vorreaktionen bis hin zur Selbstzündung intensivieren. Es entsteht dabei eine sekundäre Reaktionsfront, deren Geschwindigkeiten in weiten Grenzen von nur 10 m/s bis hin zu bis 2000 m/s variieren kann [50], siehe *Abbildung 2.5*. Dabei treten im Zylinderdruckverlauf charakteristische Druckschwingungen mit steilen Gradienten erkennbar, vergleiche *Abbildung 2.6*. Die dabei entstehenden Druckwellen können bei der Reflexion an Brennraumwänden Bauteilschäden verursachen und durch den damit einhergehenden Temperaturanstieg auch eine thermische Überlastung des Motors bewirken [89].



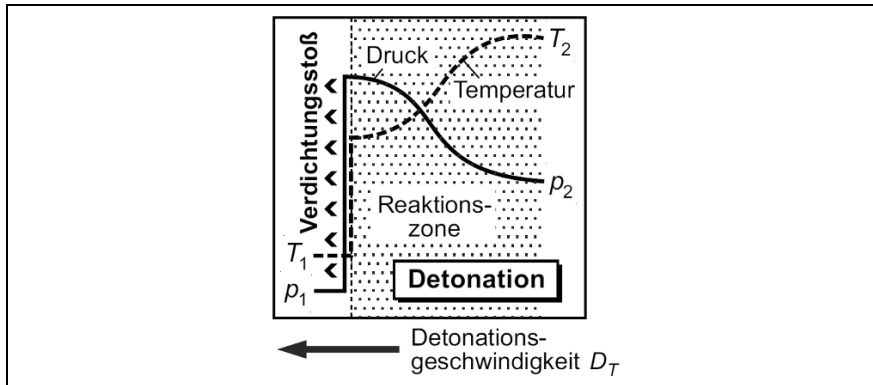
**Abbildung 2.5:** Selbstzündung im Endgasbereich und Ausbildung einer sekundären Reaktionsfront, aus [50]



**Abbildung 2.6:** Druckverlauf und zugehöriges hochpassgefiltertes Signal einer klopfenden Verbrennung, aus [42]

Für die teilweise sehr hohen Geschwindigkeiten bei der klopfenden Verbrennung kann die Vorstellung von anlaufenden Detonationen als Vorstellung dienen, siehe *Abbildung 2.7*. Hierbei kommt es durch einen simultanen Umsatz größerer Gemischbereiche zu einem sich mit Überschallgeschwindigkeit ausbreitenden Verdichtungsstoß, der eine starke Temperaturerhöhung bewirkt und somit im Nachlauf eine Reaktionszone mit sich zieht [50]. Tatsächlich sind die im Endgasbereich ablaufenden Vorgänge komplexer und hängen von zahlreichen

Einflussfaktoren ab, insbesondere von Temperatur, Temperaturgradient und Volumen der selbstzündenden Endgasasche [50].



**Abbildung 2.7:** Verbrennungsfortschritt durch Detonation, aus [50]

### 2.1.2 Kontrollierte Benzinselbstzündung

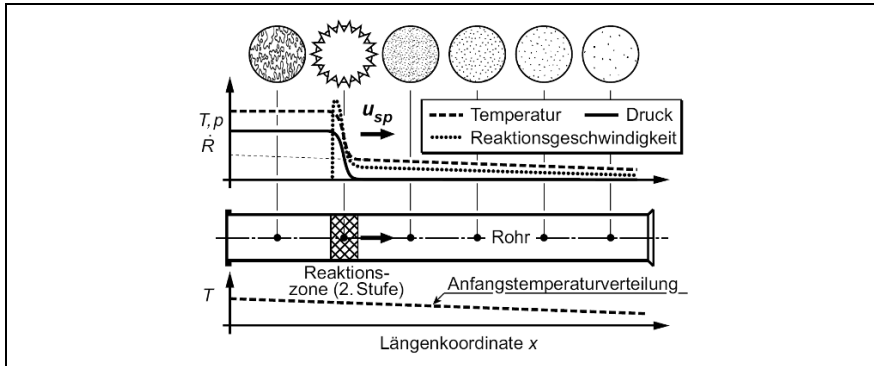
#### 2.1.2.1 Theoretische Betrachtungen

Anders als bei der klopfenden Verbrennung treten bei der kontrollierten Benzinselbstzündung im Allgemeinen keine Schädigungen des Motors auf [65]. Dies erklärt sich zum einen dadurch, dass bei der kontrollierten Benzinselbstzündung in der Regel eine starke Gemischverdünnung vorliegt, die die lokale Wärmefreisetzung herabsetzt [89] und zum anderen durch die nahezu gleichzeitige, räumlich gleichmäßig verteilte Zündung an mehreren Orten bei der kontrollierten Benzinselbstzündung, die die Ausbildung einer schädlichen Detonationswelle verhindert [77].

Zur vertieften Erklärung dieser Zusammenhänge wird in der Literatur oftmals [89] [50] [5] eine von Zeldovich<sup>9</sup> entwickelte Modellvorstellung verwendet [102] [103]. Hierbei wird der Verbrennungsfortschritt in einem beheizten, einseitig offenen Rohr mit einem Kohlenwasserstoff-Luft-Gemisch betrachtet, entlang dessen Achse sich durch den Wärmeverlust am offenen Ende eine Temperaturverteilung mit einem gewissen, sehr kleinen Temperaturgradienten einstellen

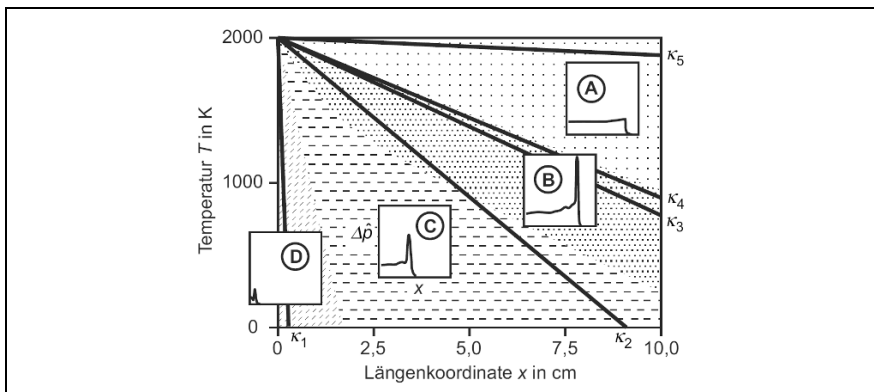
<sup>9</sup> Яков Борисович Зельдович (1914 -1987, weißrussisch Якаў Барысавіч Зяльдовіч, Transliteration nach ISO 9 Jakov Borisovič Zel'dovič, Transkription Jakow Borissowitsch Seldowitsch) , sowjetischer Physiker, der bedeutende Beiträge zu den Bereichen Katalyse, Kernphysik, Teilchenphysik, Astrophysik, Kosmologie, allgemeinen Relativitätstheorie und Schockwellenforschung lieferte [31]. In der deutschsprachigen Literatur hat sich die auf der englischen Transkription Zel'dovich basierende Schreibweise Zeldovich durchgesetzt, die deshalb auch hier Verwendung findet.

kann, vergleiche *Abbildung 2.8*. Ist das Temperaturniveau ausreichend hoch, kommt es nach einer gewissen Zeit zur Selbstzündung am geschlossenen Rohrende, während die etwas kühleren Bereiche mit einem gewissen Zeitversatz nacheinander ebenfalls zünden. Damit läuft eine Reaktionszone mit einer sogenannten „spontanen Ausbreitungsgeschwindigkeit“ durch das Rohr.



**Abbildung 2.8:** Reaktionsfortschritt in einem beheizten Rohr mit der spontanen Ausbreitungsgeschwindigkeit, aus [50]

Für den vereinfacht als eindimensional betrachteten Fall lassen sich darauf aufbauend Modellrechnungen in Abhängigkeit des Temperaturgradienten entlang der Rohrachse durchführen. Dabei zeigt sich das in *Abbildung 2.9* dargestellte Verhalten.



**Abbildung 2.9:** Einfluss des Temperaturgradienten auf den Reaktionsfortschritt und die resultierende Druckamplitude, aus [50] basierend auf [102] [103]

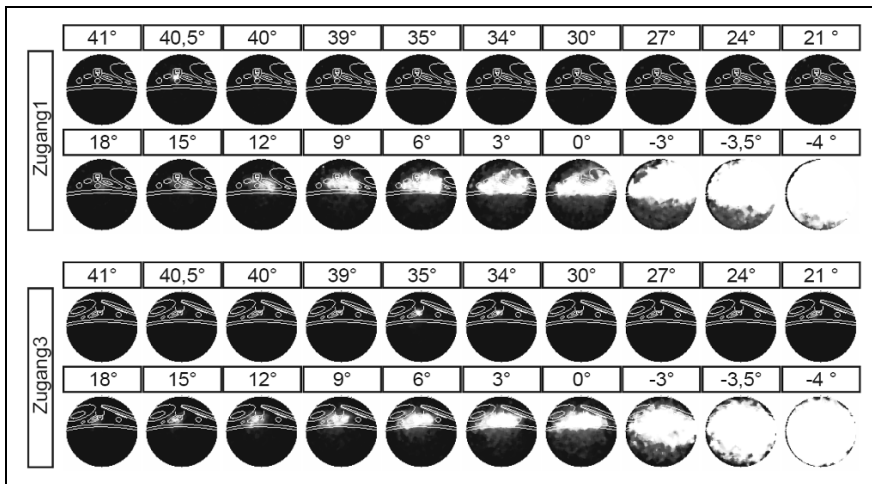


Die einzelnen Bereiche in *Abbildung 2.9* können folgendermaßen erklärt werden [50]:

- Bereich A („thermische Explosion“): Durch den flachen Temperaturgradienten ist die spontane Ausbreitungsgeschwindigkeit sehr hoch – größer noch als die Detonationsgeschwindigkeit. Die infolge der nahezu simultanen Verbrennung einsetzende Druckwelle läuft daher hinter der Reaktionsfront und kann keine großen Druckamplituden verursachen.
- Bereich B („anlaufende Detonationen“): Die spontane Ausbreitungsgeschwindigkeit liegt in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit. Bei flacheren Temperaturgradienten an der Grenze zu A wird die Verbrennung bereits kurz vor der Selbstzündung stehender Gemischteile durch die Druckwelle verfrüht ausgelöst. Durch die Überlagerung der Drucksteigerungen von Detonationswelle und Reaktion können sehr hohe Druckauschläge entstehen.
- Bereich C („spontane Unterschallverbrennung“): Die spontane Ausbreitungsgeschwindigkeit liegt nun deutlich unter der Schallgeschwindigkeit und bestimmt wie im Bereich A den Verbrennungsfortschritt. Die gleichzeitig umgesetzte Masse ist aber deutlich geringer, so dass sich nur noch schwächere Druckwellen ausbilden, die die Zündung im Unverbrannten kaum noch beeinflussen, an der Grenze zum Bereich B aber noch merkliche Druckauschläge verursachen können.
- Bereich D („Deflagration“): Die spontane Ausbreitungsgeschwindigkeit liegt unterhalb der laminar-turbulenten Flammengeschwindigkeit. Der Verbrennungsvorgang wird durch den Wärmestrom vom Verbrannten ins Unverbrannte bestimmt, es treten keine nennenswerten Druckamplituden mehr auf.

Dieser einfache, eindimensionale Modellfall lässt sich selbstverständlich nicht vollkommen auf die realen Verhältnisse übertragen, kann aber beispielsweise erklären, warum die bei klopfender Verbrennung gemessenen Geschwindigkeiten beziehungsweise die Intensität des Klopfens in einem breiten Bereich variieren kann [50]. Ebenso kann der Versuch unternommen werden, die kontrollierte Selbstzündung in dieser Darstellung zu verorten. Während in einigen Veröffentlichungen [89] [5] [65] der Fall der thermischen Explosion als Idealvorstellung der kontrollierten Benzinselbstzündung bezeichnet wird, scheint es dem Verfasser nachvollziehbarer, dass das Äquivalent zur kontrollierten Benzinselbstzündung in dieser Darstellung im Bereich C zu finden ist, da eine Lokalisierung im Bereich A definitionsgemäß einer Überschallverbrennung entsprechen würde, was trotz der kürzeren Brenndauern bei der kontrollierten Benzinselbstzündung

deutlich zu schnell wäre<sup>10</sup>. Grundsätzlich wird außerdem im Bereich C die Geschwindigkeit der Verbrennung ebenfalls maßgeblich durch die spontane Ausbreitungsgeschwindigkeit und damit den Temperaturgradienten bestimmt, sodass der Prozess als sequentielle Selbstzündung begriffen werden kann. Nicht zuletzt wird damit auch verständlich, wie der Übergang von der kontrollierten Selbstzündung zur laminar-turbulenten Flammenausbreitung und das Auftreten von Mischformen der beiden, das experimentell beobachtet werden konnte [49] [77], vergleiche *Abbildung 2.10*, vonstattengehen kann, ohne den Bereich der „anlaufenden Detonationen“ zu durchlaufen.



**Abbildung 2.10:** Visualisierung des Verbrennungsfortschritts mit Lichtleiterendoskopen und Photomultiplierkameras bei kontrollierter Benzinselbstzündung in einem Betriebspunkt mit Zündfunkenunterstützung; Kurbelwinkelangaben in °KW v. ZOT, Zündwinkel 45° KW v. ZOT, aus [77]

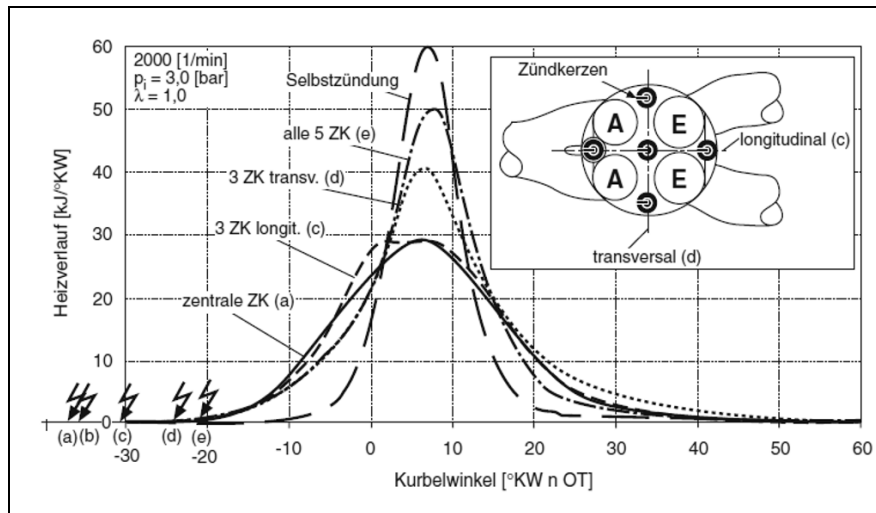
Gleichzeitig eröffnet eine solche Betrachtung auch einen alternativen Blickwinkel, wonach sich die kontrollierte Benzinselbstzündung von der laminar-turbulenten Flammenausbreitung anstatt von der Vorstellung einer simultanen Selbstzündung kommend betrachten lässt. Für die Vorstellung einer solchen „modifizierten“ laminar-turbulenten Flammenausbreitung zur Beschreibung der

<sup>10</sup> Bei einer angenommenen Schallgeschwindigkeit von 600 m/s, was in etwa der Schallgeschwindigkeit trockener Luft bei 900 K entspricht, müsste der Reaktionsfortschritt bei einer Drehzahl von 2000 min<sup>-1</sup> innerhalb von nur 1° Kurbelwinkel bereits 50 mm betragen, womit bei der typischen Größe eines Pkw-Motors bei einer Überschallverbrennung Brenndauern im Bereich weniger Grad Kurbelwinkel zu erwarten wären.

kontrollierten Benzinselbstzündung sind zwei Aspekte wesentlich, die eine Beschleunigung des Reaktionsfortschritts erklären können:

- Vorhandensein mehrerer Zündorte
- Beschleunigung der laminar-turbulenten Flammenausbreitung

Das der erste Punkt zu einer Beschleunigung der Verbrennung führt ist unmittelbar einsichtig. *Abbildung 2.11* veranschaulicht dabei, wie durch das Erhöhen der Zündkerzenzahl auf den Grenzfall der Selbstzündung extrapoliert werden kann.

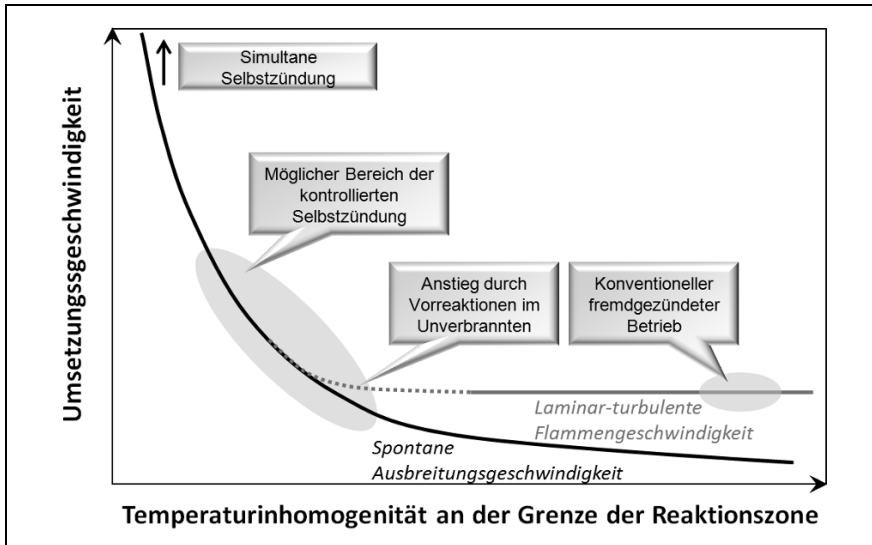


**Abbildung 2.11:** Verbrennungsablauf bei Mehrfachzündung, aus [27]

Auch der zweite Punkt ergibt sich unmittelbar aus der grundsätzlichen Charakteristik der Flammenausbreitung: Da sie, wie bereits dargestellt auf der Wärmeleitung vom Verbrannten ins Unverbrannte beruht, ist zu erwarten dass ihre Geschwindigkeit in erster Linie von der Gesamtwärmemenge abhängt, die nötig ist, um die Vorwärmzone zur Zündung zu bringen. Damit folgt aber automatisch eine deutliche Reduzierung der dazu benötigten Zeitspanne, sofern im Unverbrannten und damit auch in der Vorwärmzone bereits Vorreaktionen stattgefunden haben und damit ohnehin bereits nahe der Selbstzündung ist. Es kann also eine Abhängigkeit der Flammengeschwindigkeit vom Vorreaktionsniveau im Unverbrannten angenommen werden<sup>11</sup>, wie er schematisch in *Abbildung 2.12*

<sup>11</sup> Eine solche Abhängigkeit wird in der Regel bei Messungen der laminaren Flammengeschwindigkeit nicht untersucht, da das Unverbrannte zum Erhalt reproduzierbarer Bedingungen vor der Zündung auf niedrige Ausgangstemperaturen konditioniert wird.

dargestellt ist. Ein hohes Vorreaktionsniveau entspricht dabei einem kleinen Temperaturgradienten, wenn man von einer monotonen Temperaturverteilung wie in *Abbildung 2.8* ausgeht.



**Abbildung 2.12:** Möglicher Zusammenhang zwischen laminar-turbulenter Flammgeschwindigkeit und spontaner Ausbreitungsgeschwindigkeit

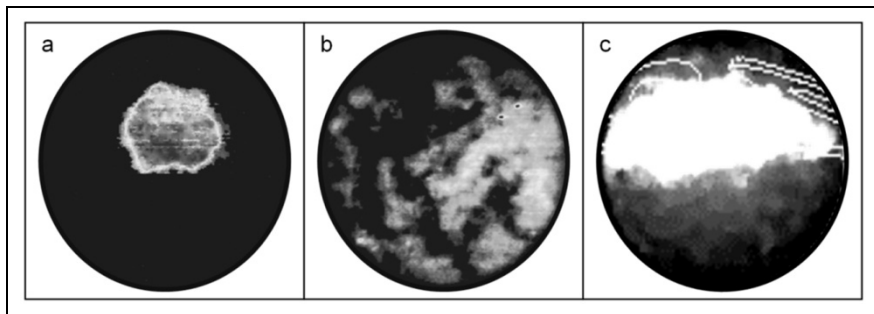
Letztlich lassen sich beide Vorstellungen zusammenführen, wonach sich die kontrollierte Benzinselbstzündung als ein sequentieller Selbstzündprozess begreifen lässt, in dem früher zündende Bereiche die Selbstzündung noch unverbrannter Bereiche durch zwei Mechanismen beschleunigen können:

- durch die Verdichtung und die folglich Erwärmung und Druckerhöhung des Unverbrannten in Folge der Expansion des Verbrannten, was ohne örtlichen Bezug sich auf alle Bereiche des Unverbrannten gleichermaßen auswirkt
- durch die Wärmeleitung vom Verbrannten in unmittelbar benachbarte Bereiche, was prinzipiell dem Mechanismus der Flammenausbreitung, mit allerdings deutlich geringerem Temperaturgradienten in der Reaktionszone, entspricht

Letztlich stellt sich die Frage, wie bedeutend der Anteil der Wärmeleitung an der Zündung unverbrannter Gemischbereiche ist. Dies wiederum hängt stark von den Randbedingungen ab, wonach bei niedrigem Vorreaktionsniveau die Wärmelei-

tung dominiert und mit steigendem Vorreaktionsniveau ab einem gewissen Punkt vernachlässigbar wird, an dem die Volumenreaktion des benachbarten Gemischs bereits stattfindet, bevor ein signifikanter Wärmestrom übertragen wurde.

Visualisierungen der Verbrennung bei kontrollierter Benzinselbstzündung lassen hierzu keine eindeutigen Rückschlüsse zu, vergleiche *Abbildung 2.13*. Die Tatsache, dass die zündenden Bereiche teilweise sehr stark räumlich zusammenhängen, lässt sich sowohl als ein Indiz für einen signifikanten Einfluss der Wärmeleitung sehen als auch darüber erklären, dass in Folge des Strömungsfelds während des Ladungswechsels zusammenhängende Bereiche mit ähnlicher Temperatur und ähnlichem Restgasgehalt existieren.



**Abbildung 2.13:** Verbrennungsvisualisierungen: (a) konventionelle fremdgezündeter Betrieb, aus [43], (b) kontrollierter Benzinselbstzündung, aus [43], (c) kontrollierte Benzinselbstzündung, aus [77]

In jedem Fall bleibt festzuhalten, dass der Reaktionsfortschritt bei der kontrollierten Benzinselbstzündung in hohem Maße von den zur Selbstzündung führenden Reaktionen und den im Brennraum herrschenden Temperaturinhomogenitäten bestimmt wird. Beides soll im Folgenden noch ausführlicher diskutiert werden.

#### 2.1.2.2 Reaktionskinetik

Anders als es einfache Bruttoreaktionen suggerieren läuft bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen eine hohe Anzahl komplexer chemischer Reaktionen unter Beteiligung hunderter verschiedener Spezies ab [39]. Hierfür liegen in der Literatur detaillierte Reaktionsmechanismen, etwa in [25], vor sowie reduzierte Varianten (beispielsweise in [39] [105]), die versuchen, durch Beschränkung auf die zeitbestimmenden Reaktionen das reale Zündverhalten mit deutlich weniger Reaktionen und Spezies abzubilden.

Grundsätzlich läuft die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen stets nach dem Schema der Radikalkettenreaktion ab [92], das im Folgenden kurz skizziert werden soll [27] [89]:

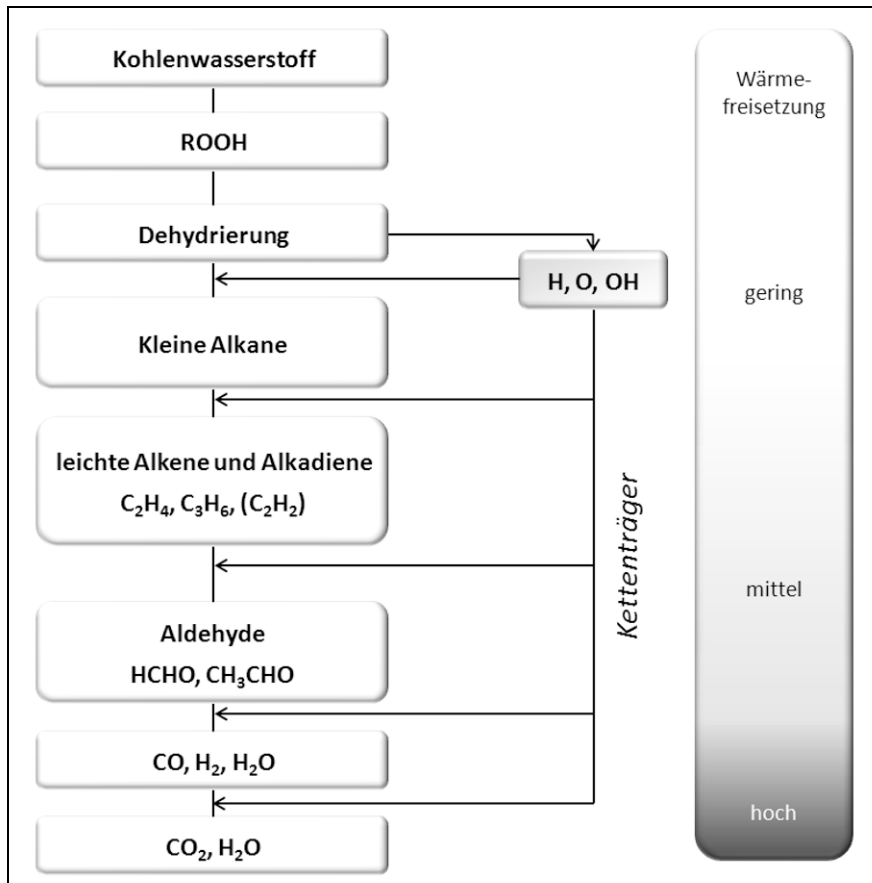
- **Ketteneinleitung:** Während diesen, sehr langsam ablaufenden Schritts, werden aus stabilen Kraftstoffmolekülen Radikale<sup>12</sup>, vor allem Wasserstoffradikale [65], gebildet.
- **Kettenfortpflanzung und -verzweigung:** Durch Interaktion der Radikale mit stabilen Teilchen werden reaktive Zwischenprodukte (unter anderem Peroxide, Aldehyde und Ketone) gebildet, die wiederum mit weiteren Teilchen weiterreagieren können, wobei wieder neue Radikale entstehen. Bleibt die Anzahl der Radikale gleich, spricht man von Kettenfortpflanzung, erhöht sie sich von Kettenverzweigung.
- **Kettenabbruch:** Reagieren Radikale miteinander oder mit aktiver Zwischenprodukten, reduziert sich die Radikalanzahl und die Kettenreaktion kommt nach und nach zum Erliegen.

Der grundsätzliche Ablauf von Radikalkettenreaktionen kann verständlich am einfachen Beispiel der Knallgasreaktion nachvollzogen werden, siehe *Abbildung 2.14*. In Wirklichkeit laufen allerdings selbst für diese vergleichsweise einfache Reaktion über 100 Elementarreaktionen ab [32]. Ein stark vereinfachtes Schema des Reaktionsablaufs für Kohlenwasserstoffe zeigt *Abbildung 2.15*.

<b>Kettenstart</b>	$H_2$	$\rightarrow$	$H \cdot + \cdot H$
<b>Kettenverzweigung</b>	$H \cdot + O_2$	$\rightarrow$	$\cdot OH + O \cdot$
<b>Kettenfortpflanzung</b>	$OH \cdot + H_2$	$\rightarrow$	$H_2O + H \cdot$
<b>Kettenabbruch</b>	$OH \cdot + \cdot H$	$\rightarrow$	$H_2O$

**Abbildung 2.14:** Elementarreaktionen bei der Knallgasreaktion, nach [32]

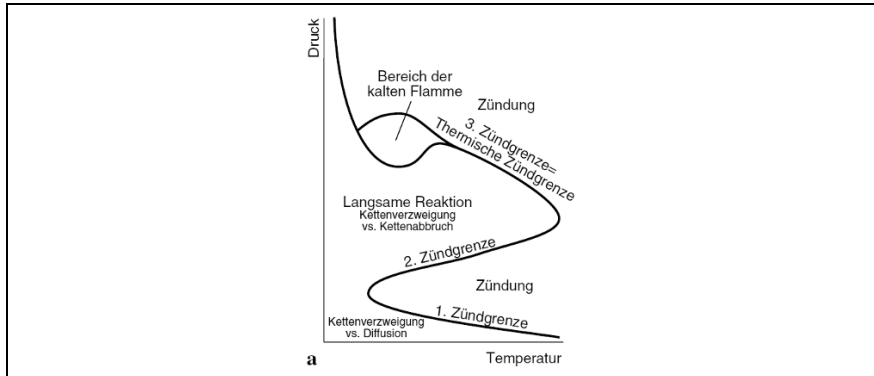
<sup>12</sup> Radikale sind kurzlebige Verbindungen mit ungesättigten Valenzen, die sehr reaktionsfreudig sind.



**Abbildung 2.15:** Schematischer Reaktionsablauf für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen, nach [62]

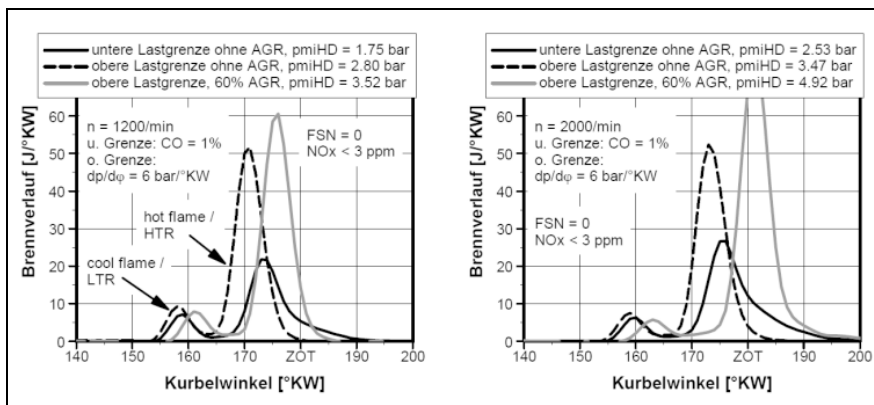
Der genaue Ablauf der Vorreaktionen ist bei Radikalkettenreaktionen stark von Temperatur und Druck abhängig, da sich die Gleichgewichtskonstanten der einzelnen Elementarreaktionen nach dem Prinzip von Le Chatelier<sup>13</sup> in Abhängigkeit von Druck und Temperatur verändern können und damit je nach Randbedingungen Kettenverzweigungs- oder Kettenabbruchsreaktionen dominieren können. Damit ergibt sich ein Verhalten, wie es in *Abbildung 2.16* dargestellt ist.

<sup>13</sup> Nach Henry Louis Le Châtelier (1850 – 1936), französischer Chemiker.



**Abbildung 2.16:** Schematische Darstellung des Zündverhaltens von Kohlenwasserstoffen in Abhängigkeit von Druck und Temperatur, aus [39]

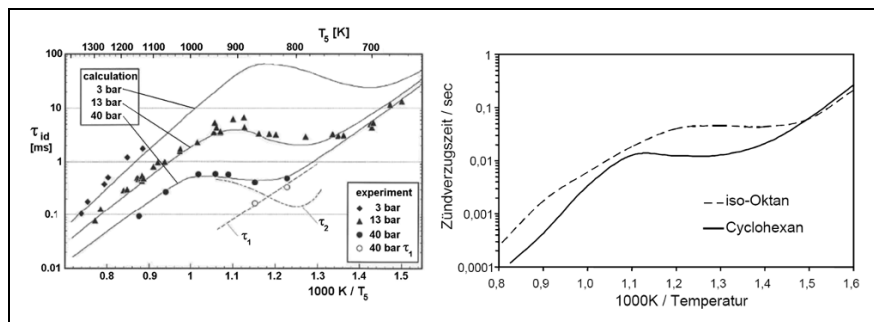
Für die im Verbrennungsmotor vorherrschenden Bedingungen ist nur die thermische Zündgrenze relevant [27]. Offensichtlich kann dabei der „Bereich der kalten Flamme“ (auch „cool flame“ oder „blue flame“ [32] genannt) durchlaufen werden. Hierbei kommt es nach einer ersten Wärmefreisetzung durch einzelne exotherme Elementarreaktionen zu einem Temperaturanstieg, der das Gleichgewicht so verschiebt, dass der Kettenverzweigung zunächst die Grundlage entzogen wird („degenerierte Kettenverzweigung“) [89]. Erst danach kommt es mit einem weiteren Anstieg der Temperatur dann zu einer schnellen Fortsetzung der Kettenreaktion, der eigentlichen Zündung, siehe *Abbildung 2.17*.



**Abbildung 2.17:** Typische Brennverläufe bei der homogenen Dieselverbrennung (aus [38])



Ein solches Verhalten äußert sich in Darstellung des Zündverzugs über der Temperatur in einem Bereich mit negativem Temperaturkoeffizienten, bei dem der Zündverzug trotz steigender Temperatur größer wird [89]. Es ist allerdings nicht für alle Kohlenwasserstoffe gleich stark ausgeprägt, für kurze und stark verzweigte Moleküle kann mitunter gar kein Bereich mit negativem Temperaturkoeffizienten identifiziert werden [27]. *Abbildung 2.18* zeigt die entsprechenden Diagramme für Isooktan, das stellvertretend für Benzin gesehen werden kann, und n-Heptan als typischem Bestandteil von Dieselmotorkraftstoff. Deutlich ist der Bereich mit negativem Temperatur-Koeffizienten bei n-Heptan zu erkennen, während für das stärker verzweigte Isooktanmolekül im entsprechenden Bereich nur eine deutlich verminderte Temperaturabhängigkeit auszumachen ist.



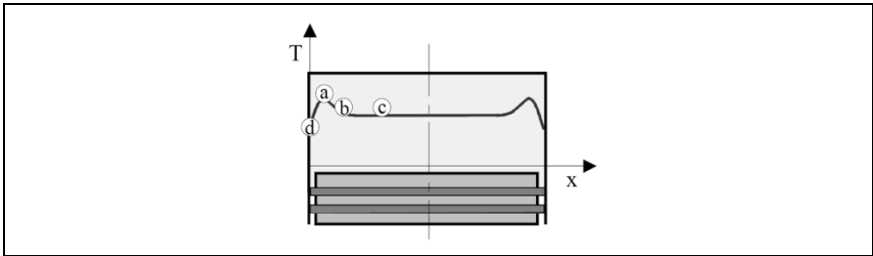
**Abbildung 2.18:** Zündverzugszeiten für n-Heptan (links, aus [70]), Isooktan und Cyclohexan (rechts, aus [78])

### 2.1.2.3 Temperaturinhomogenitäten

Anders als beim Druck wird sich im realen Motor nie im gesamten Brennraum eine einheitliche Temperatur ausbilden, da zum einen Temperatenausgleichsvorgänge deutlich mehr Zeit benötigen als Druckausgleichsvorgänge und sich zum anderen infolge des Wärmestroms über die Brennraumwände eine Temperaturgrenzschicht ausbildet. Daneben können Temperaturunterschiede im Brennraum auch durch eine Ladungsschichtung mit Restgas entstehen, wie sie bei der kontrollierten Benzinselbstzündung häufig vorkommt (siehe Kapitel 2.1.2.4) beziehungsweise das Temperaturfeld wird ganz allgemein durch das Strömungsfeld beeinflusst.

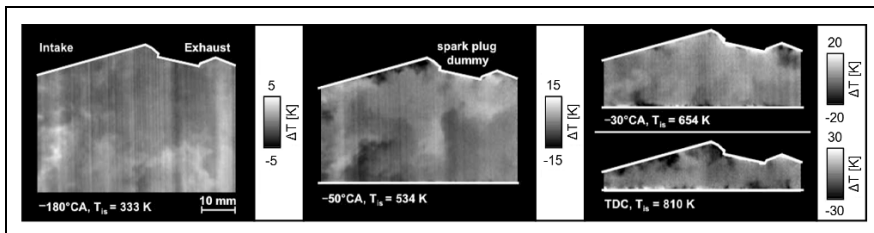
Bezüglich des Wandeinflusses auf die Temperaturverteilung im Brennraum ist zu bedenken, dass sich die Temperatur der Brennraumwände infolge der größeren thermischen Trägheit deutlich langsamer verändert als die Gastempera-

tur<sup>14</sup>. Infolgedessen ändert der Wärmestrom beim Übergang zum Ladungswechsel sein Vorzeichen und wirkt von der Wand auf das Brennraumgas, womit das wandnahe Gas aufgeheizt wird („Wandheizwirkung“) [65]. Während der Kompression drehen sich diese Verhältnisse natürlich wieder um, womit die wandnahen Bereiche sich im Vergleich zum restlichen Gas weniger stark erhitzen und es zu einem Anstieg der Streuung in der Temperatur kommt. Bemerkenswert ist, dass es im Übergangsbereich von der Temperaturgrenzschicht zur Brennraummitte durchaus zu einer Temperaturüberhöhung kommen kann, die sich daraus erklärt, dass die während des Ladungswechsels durch die Wandheizwirkung erhitzen Bereiche einen Teil ihres Temperaturvorsprungs auch während der Kompression bewahren können [65], siehe *Abbildung 2.19*.



**Abbildung 2.19:** Überhöhte Darstellung der Temperaturverteilung während der Kompressionsphase, aus [65]

Messungen zeigen, dass der zu erwartende Wandeinfluss auf die Temperaturstreuung tatsächlich vorhanden ist, siehe *Abbildung 2.20*. Deutlich ist die Zunahme der Streuung zu erkennen. Die Standardabweichung der Temperaturverteilung liegt dabei gegen Kompressionsende der Größenordnung nach zwischen 10 K [11] und 15 K [60].

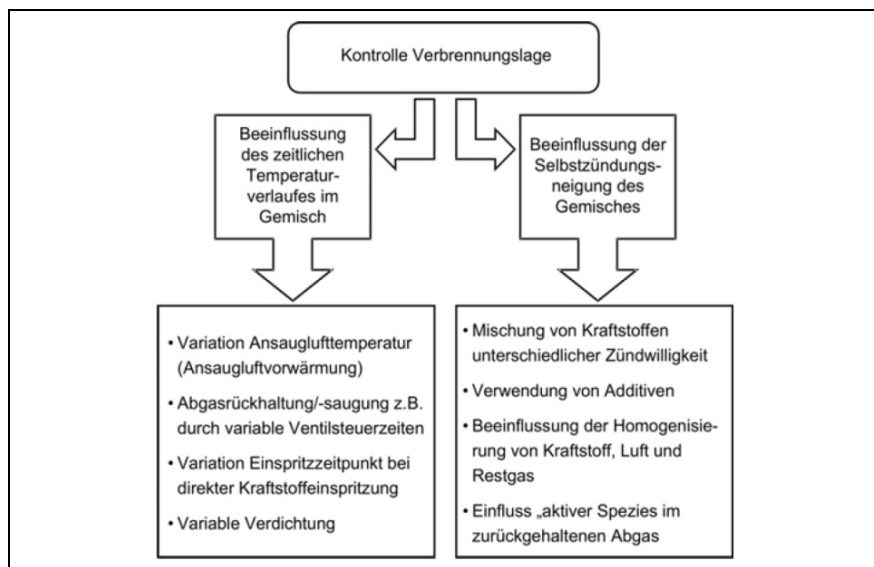


**Abbildung 2.20:** Ergebnisse einer Temperaturmessung im Brennraum während der Kompression, aus [11]

<sup>14</sup> Tatsächlich kann die Wandtemperatur bei stationären Vorgängen in guter Näherung als konstant betrachtet werden.

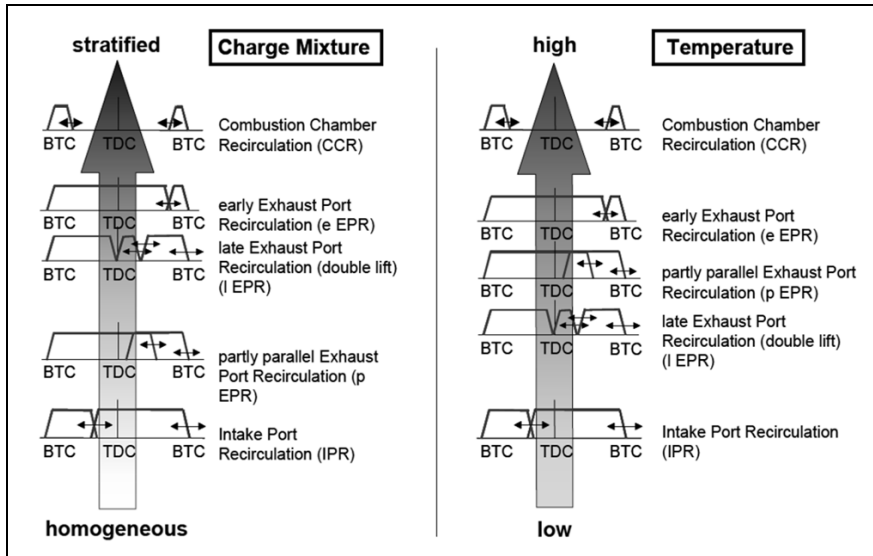
#### 2.1.2.4 Konzepte zur Verbrennungsregelung

Da anders als beim konventionellen fremdgezündeten Ottomotor der Verbrennungsbeginn nicht mehr direkt über den Zündfunken festgelegt werden kann, muss versucht werden, die Verbrennungslage über eine Kombination mehrerer Stellgrößen zu regeln. Hierzu erscheinen zwei grundsätzliche Wege möglich: die Beeinflussung des zeitlichen Temperaturverlaufs und die Beeinflussung der Selbstzündungsneigung des Gemischs [89]. *Abbildung 2.21* zeigt eine Übersicht der in verschiedenen Untersuchungen angewandten Eingriffsmöglichkeiten. Hervorzuheben ist, dass eine Variation der Abgasrückhaltung sich als einzige Maßnahme über beide Pfade auf die Verbrennung auswirken kann.



**Abbildung 2.21:** Parameter zur Kontrolle der Verbrennungslage, aus [89]

Entsprechend stellt die Variation des Restgasgehalts auch einen der am häufigsten eingesetzten Stellgrößen dar. Da Benzin im Vergleich zu Dieseldieselkraftstoff deutlich zündunwilliger ist, muss, um überhaupt eine Selbstzündung zu erreichen, die Kompressionsendtemperatur gegenüber der konventionellen fremdgezündeten Betriebsart deutlich gesteigert werden. Da dies über eine externe Abgasrückführung, bei der das Abgas stark abkühlen würde, nicht möglich ist, muss auf variable Ventiltriebe zurückgegriffen werden [63]. Hierbei können verschiedene Restgasstrategien verwendet werden, die sich hinsichtlich der erzielten Temperatur und dem Grad der Schichtung unterscheiden, siehe *Abbildung 2.22*.



**Abbildung 2.22:** Unterschiedliche Restgasstrategien und deren Auswirkungen auf Temperatur und Gemischschichtung, aus [56]

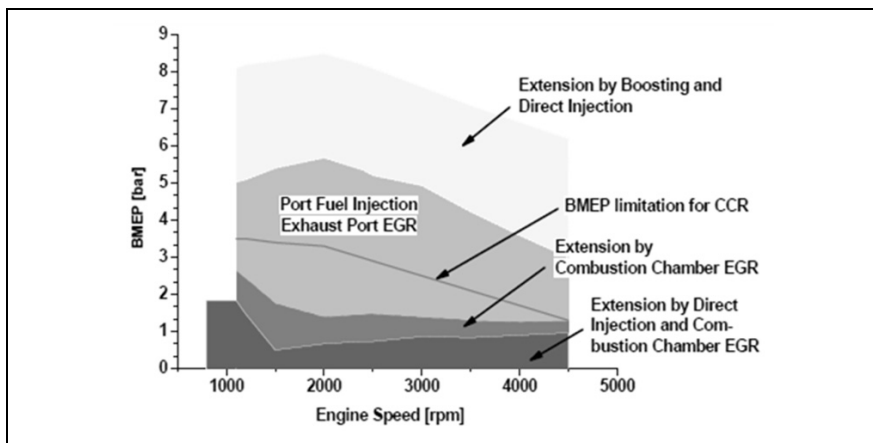
Die Anwendung einer Direkteinspritzung bietet weitere Freiheitsgrade, auf die Temperaturhistorie Einfluss zu nehmen und wird ebenfalls in zahlreichen Veröffentlichungen als Einflussparameter genannt [77] [5] [53]. Je nach Einspritzlage und -strategie kann die Direkteinspritzung auch zur Erzeugung von Kraftstoffinhomogenitäten und zur Ermöglichung einer zweiten Verbrennung während der negativen Ventilüberschneidung bei der Brennraumrückhaltung genutzt werden, mit dem wiederum Einfluss auf die Lage der Hauptverbrennung genommen werden kann [5].

In anderer Weise wirkt sich ein unterstützender Zündfunken auf die Verbrennungslage aus. Während teilweise der Energieeintrag durch den Zündfunken für den Einfluss verantwortlich gemacht wird [5], kann in [77] eine Flammenfrontausbreitung ausgehend von der Zündkerze nachgewiesen werden.

Während eine Variation der Ansauglufttemperatur wegen der schlechten Dynamik eher für Grundlagenuntersuchungen [88] [64] [88] als für Anwendungen interessant ist, könnte eine Kombination der kontrollierten Benzinselbstzündung mit einer Aufladung [21] [46] oder einem variablen Verdichtungsverhältnis [40] [97] praxisrelevant sein, sofern in Zukunft für Letzteres geeignete Systeme mit akzeptablen Werten in den Bereichen Komplexität, Kosten und zusätzlicher und Reibung zur Verfügung stehen [73].

Hinsichtlich des Verständnisses der kontrollierten Benzinselbstzündung ist noch erwähnenswert, dass sich die Reaktionskinetik nicht nur durch Änderung der Kraftstoffzusammensetzung [29] [48] beeinflussen lässt, sondern auch durch andere Additive. So zeigt die Beeinflussungsmöglichkeit durch eine die Beimischung von Ozon in die Ansaugluft, dass Radikale für die Zündverzugszeit eine bedeutende Rolle spielen [61].

Abschließend zeigt *Abbildung 2.23* ein mögliches Betriebskennfeld für die Betriebsart kontrollierte Benzinselbstzündung. Die Auswirkungen unterschiedlicher Betriebsstrategien auf die erreichbaren Betriebsbereiche sind klar zu erkennen. Weitere Möglichkeiten zur Stabilisierung und Erweiterung der Betriebsbereiche stellen sogenannte Mehrtaktverfahren dar. So wurde beispielsweise ein Sechstakt-Verfahren vorgeschlagen, bei dem nach dem Ladungswechsel zunächst eine geschichtete, magere fremdgezündete Verbrennung erfolgt, bevor in nach der nächsten Kompression in deren heißem Abgas dann im nächsten oberen Totpunkt eine selbstgezündete Verbrennung stattfindet [100] [56]. Ebenso ist ein Zweitakt-Verfahren ähnlich der Strategie Brennraumrückhaltung denkbar, bei dem im jeden oberen Totpunkt eine gleichstarke Verbrennung stattfindet und die Ventile – ähnlich der Schlitzsteuerung bei einem „echten“ Zweitaktmotor – nur kurz um den unteren Totpunkt geöffnet sind [56].



**Abbildung 2.23:** Mögliche Betriebsbereiche der kontrollierten Selbstzündung in Abhängigkeit der Betriebsstrategie, aus [14]

## 2.2 Reale Arbeitsprozessrechnung

Die Berechnung der innermotorischen Vorgänge umfasst sowohl die Berechnung der Ladungswechselvorgänge im Niederdruckteil, in dem mindestens ein Ventil geöffnet ist, als auch die Berechnung der Verbrennung im Hochdruckteil bei geschlossenen Ventilen. Je nach Berechnungsziel kann dabei nochmals unterschieden werden zwischen der Analyse (Her-Rechnung) und der Simulation (Hin-Rechnung). Konkret bezogen auf den Hochdruckteil bedeutet dies im ersten Fall, dass aus einem bekannten Druckverlauf unter bestimmten thermodynamischen Annahmen ein Brennverlauf berechnet wird (Druckverlaufsanalyse) und im zweiten Fall, dass aus einem mittelbar oder unmittelbar bekannten Brennverlauf – ebenfalls entsprechend den Gesetzen der Thermodynamik – der Druckverlauf berechnet wird (Arbeitsprozessrechnung).

Während im Fall der Druckverlaufsanalyse der zur Berechnung benötigte Zylinderdruckverlauf in der Regel immer am Prüfstand durch Indizierung bestimmt werden kann, stellt sich bei der Simulation die Frage, welche Gesetzmäßigkeit für den Brennverlauf verwendet werden soll. Einen Überblick hierzu zeigt *Tabelle 2.1*.

**Tabelle 2.1:** Übersicht über Klassen von Brennverlaufsmodellen im Rahmen der Arbeitsprozessrechnung

Typ	Beispiel	Vorhersagefähigkeit	Typische Rechenzeiten
<i>empirisch</i>	Vibe	keine	Sekundenbruchteile
<i>empirisch mit Funktionsteil</i>	Witt	bedingt	Sekundenbruchteile
<i>phänomenologisch</i>	Entrainment-Modell	gut	Sekundenbruchteile bis Sekunden
<i>3D-CFD</i>	-	gut	Stunden bis Tage

Eine erste einfache Möglichkeit würde darin bestehen, den zuvor in der Druckverlaufsanalyse berechneten Brennverlauf fest vorzugeben. Damit würde aber dann eine „Nachsimulation“ des entsprechenden Betriebspunkts erfolgen. Eine sinnvolle Anwendung hierfür könnte die Bestimmung bestimmter Größen sein, die bei der Messung am Prüfstand nicht ermittelt wurden, der Nutzen ist aber ansonsten sehr eingeschränkt.

Damit wird es nötig, den Brennverlauf in geeigneter Weise zu modellieren. Die einfachste Möglichkeit hierzu stellen empirische Brennverlaufsmodelle dar. Sie bestehen meist aus einer mathematischen Funktion mit verschiedenen Parametern, durch deren Anpassung der aus der Druckverlaufsanalyse bestimmte Brennverlauf approximiert werden kann. Bekanntester Vertreter dieser auch als

Ersatzbrennverlauf bezeichneten Klasse ist der Brennverlauf nach Vibe<sup>15</sup> [91]. Die typische Form, insbesondere von ottomotorischen Brennverläufen, kann zwar so gut wiedergegeben werden, die fehlende Vorhersagefähigkeit, die im Grunde eine separate Abstimmung für jeden Betriebspunkt erfordert, schränkt den Nutzen aber stark ein. Im Zuge dessen wurden Erweiterungen entworfen, die es über einen empirischen Funktionsteil ermöglichen sollen, die Approximationsparameter in Abhängigkeit von den Randbedingungen zu verändern [96] [23] [45]. Damit wird eine gewisse, wegen der rein empirischen Abhängigkeit vom zur Modellentwicklung genutzten Motor allerdings deutlich eingeschränkte Vorhersagefähigkeit geschaffen.

Einen großen Nutzen für die Motorentwicklung bringen dagegen phänomenologische Brennverlaufsmodelle, zu denen auch das in diesem Vorhaben entwickelte Modell gehört. Sie versuchen, die für den Verbrennungsfortschritt maßgeblichen physikalischen und chemischen Effekte direkt abzubilden und so eine möglichst universelle Vorhersagefähigkeit für das beschriebene Brennverfahren zu erreichen. Sie ermöglichen in der Regel nach einer einmaligen Abstimmung der Modellparameter die Simulation im gesamten Betriebskennfeld des untersuchten Motors. Verbunden mit der meist geringen Rechenzeit – typischerweise im Sekunden- oder Zehntelsekundenbereich – und gleichzeitig guter Ergebnisqualität erklärt sich somit der breite Einsatz dieser Modellklasse [36] [4].

Eine noch detailliertere Beschreibung der Vorgänge im Brennraum kann mithilfe von 3D-CFD-Modellen erfolgen. Sie diskretisieren den Brennraum in eine große Anzahl von Zellen, für die dann jeweils alle Zustandsgrößen unter Berücksichtigung der Erhaltungsgleichungen und weiterer Gesetzmäßigkeiten berechnet werden. Die Rechenzeiten für ein einzelnes Arbeitsspiel liegen im Unterschied zu den phänomenologischen Modellen allerdings eher im Bereich von Tagen als von Sekunden [19], sodass diese Modellklasse grundsätzlich ein anderes Anwendungsspektrum abdeckt. So wird es beispielsweise eher für detaillierte Geometrieoptimierungen geeignet sein als für eine erste Auslegung des Motorkonzepts.

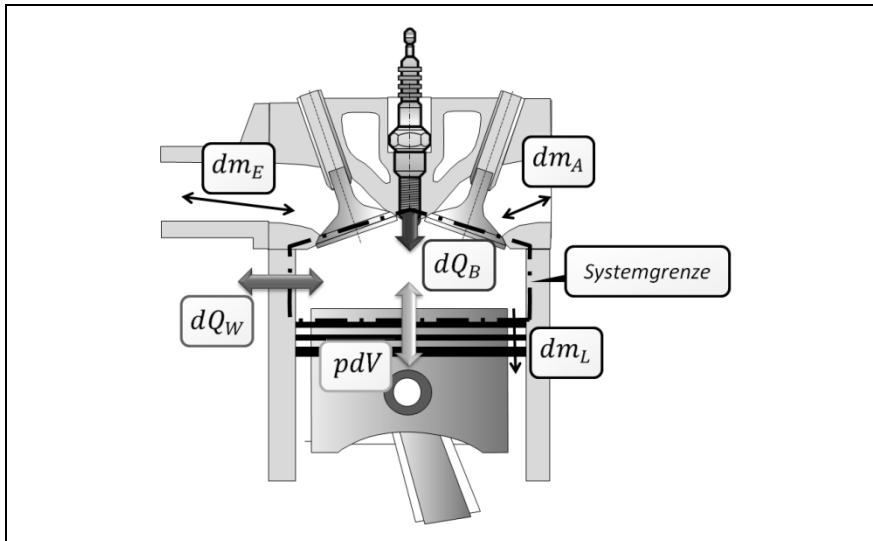
---

<sup>15</sup> Иван Иванович Виб (1902-1969, Transliteration nach ISO9 Ivan Ivanovič Vibe, Transkription Iwan Iwanowitsch Wibe), sowjetischer Ingenieur; bezüglich der Schreibweise seines Nachnamens herrscht oft Konfusion: die in der deutschen Erstübersetzung verwendete Schreibweise „Wiebe“ ist eigentlich nicht korrekt, entspricht aber vermutlich der ursprünglichen Namensschreibweise seiner deutschen Vorfahren und setzte sich in der Folge im englischen Sprachraum durch. Daneben finden sich auch die Formen Weibe und Viebe, die vermutlich ebenfalls durch Fehler entstanden sind, und selbst im Russischen werden teilweise durch Rückübersetzung der lateinischen Varianten mittlerweile fehlerhafte Schreibweisen verwendet [30].

### 2.2.1 Thermodynamische Grundlagen

Für die Beschreibung der Vorgänge im Verbrennungsmotor kommt den Gesetzen der Thermodynamik eine entscheidende Bedeutung zu. Sie werden beispielsweise in [71] [44] [35] ausführlich beschrieben und sollen im Folgenden nochmals knapp dargestellt werden.

Ausgangspunkt der thermodynamischen Modellierung ist der Begriff des Systems. Ein System stellt einen Bilanzraum dar, der durch eine eindeutig definierte Systemgrenze das Systeminnere von der Umgebung trennt. Je nachdem, ob die Systemgrenze für Massenströme durchlässig ist oder nicht, können offene<sup>16</sup> und geschlossene Systeme unterschieden werden. Im Rahmen der Modellierung von Verbrennungsmotoren ist es desweiteren hilfreich, den Druck innerhalb eines Systems als örtlich konstant (aber zeitlich veränderlich) festzulegen und nur gasförmige Komponenten als dem System zugehörig zu definieren [35]. Einem System kann jeweils Energie (meist in der Form von Arbeit oder Wärme) oder – im Falle des offenen Systems – Materie zu- oder abgeführt werden, wobei eine Zufuhr stets mit einem positiven, eine Abfuhr mit einem negativen Vorzeichen bilanziert wird. Daraus ergibt sich bereits eine mögliche Modellierung des Brennraums als thermodynamisches System, siehe *Abbildung 2.24*.



**Abbildung 2.24:** Beschreibung des Brennraums als thermodynamisches System, nach [35]

<sup>16</sup> Offene Systeme werden auch als „Kontrollraum“ bezeichnet. Geschlossene Systeme können auch als Sonderfälle von offenen Systemen behandelt werden.



Ein System kann weiterhin in unterschiedliche Zonen unterteilt werden. Einzelne Zonen können sich hinsichtlich ihrer Temperatur und Gaszusammensetzung voneinander unterscheiden, haben aber immer denselben Druck, da dieser ja im gesamten System gelten muss. Innerhalb der Zonen selbst herrscht dagegen Homogenität, das heißt eine einheitliche Zonentemperatur und -zusammensetzung. Desweiteren muss die Einteilung in Zonen so vorgenommen werden, dass jeder Bereich des Systems zu einer Zone gehört und sich die einzelnen Zonen nicht überlappen dürfen. Auf diese Weise wird zum Beispiel sichergestellt, dass die Summe der Massen der einzelnen Zonen der Gesamtmasse des Systems entspricht. Die häufigsten Arten, das System Brennraum in Zonen zu unterteilen, bestehen in der einzonigen Modellierung, bei der also vollständige Homogenität im gesamten Brennraum angenommen wird, und der zweizonigen Modellierung, mit der während der Verbrennung zwischen einer verbrannten und einer unverbrannten Zone unterschieden werden kann, vergleiche Kapitel 2.2.2.

Für jede Zone des Systems müssen zu jedem Zeitpunkt die beiden Erhaltungssätze von Energie (1. Hauptsatz der Thermodynamik) und Masse sowie die thermische Zustandsgleichung erfüllt sein. In einer für den Verbrennungsmotor günstigen Form lassen sie sich anschreiben als:

$$\frac{dQ_B}{d\varphi} + \frac{dQ_W}{d\varphi} + p \cdot \frac{dV}{d\varphi} + h_A \cdot \frac{dm_A}{d\varphi} + h_E \cdot \frac{dm_E}{d\varphi} + h_L \cdot \frac{dm_L}{d\varphi} = \frac{dU}{d\varphi} \quad (2.1)$$

$\frac{dQ_B}{d\varphi}$	Brennverlauf [J/°KW]
$\varphi$	Kurbelwinkel [°KW]
$\frac{dQ_W}{d\varphi}$	Wandwärmestrom [J/°KW]
$p$	Druck [Pa]
$\frac{dV}{d\varphi}$	Volumenänderung [m³/°KW]
$h_A$	spezifische Abgasenthalpie [J/kg]
$\frac{dm_A}{d\varphi}$	Auslassmassenstrom [kg/°KW]
$h_E$	spezifische Ansaugenthalpie [J/kg]
$\frac{dm_E}{d\varphi}$	Einlassmassenstrom [kg/°KW]
$\frac{dm_L}{d\varphi}$	Leckagemassenstrom [kg/°KW]
$\frac{dU}{d\varphi}$	Änderung der inneren Energie [J/°KW]

$$\frac{dm_{Zyl}}{d\varphi} = \frac{dm_E}{d\varphi} + \frac{dm_A}{d\varphi} + \frac{dm_L}{d\varphi} + \frac{dm_B}{d\varphi} \quad (2.2)$$

$\frac{dm_{Zyl}}{d\varphi}$  Änderung der Zylindermasse [kg/°KW]

$\frac{dm_B}{d\varphi}$  Einspritzmassenstrom [kg/°KW]

$$p \cdot V = m_{Zyl} \cdot R \cdot T \quad (2.3)$$

$V$  Volumen [m³]

$m_{Zyl}$  Zylindermasse [kg]

$R$  individuelle Gaskonstante [J/(kg·K)]

$T$  Temperatur [K]

Da während der Verbrennung die Ventile in der Regel geschlossen sind und der Leckagemassenstrom meist vernachlässigt werden kann, vereinfachen sich die Gleichungen im Hochdruckteil weiter. Aus dem 1. Hauptsatz der Thermodynamik, Gleichung (2.1), folgt dann, dass bei Kenntnis der Stoffeigenschaften (innere Energie, Enthalpie und spezielle Gaskonstante) und der Wandwärmeverluste zur Berechnung des Druckverlaufs lediglich noch der Brennverlauf benötigt wird, vergleiche Kapitel 2.2.2.

Die Berechnung der Wandwärmeverluste und der Stoffeigenschaften wird in [8] [35] ausführlich diskutiert<sup>17</sup>. Sie ist im FVV-Zylindermodul [35], das im Rahmen dieser Arbeit verwendet wurde, ebenso integriert wie die eigentliche thermodynamische Berechnung, sodass es im Folgenden primär nur noch um die Modellierung des Brennverlaufs gehen soll.

### 2.2.2 Phänomenologische Modellierung der konventionellen ottomotorischen Verbrennung

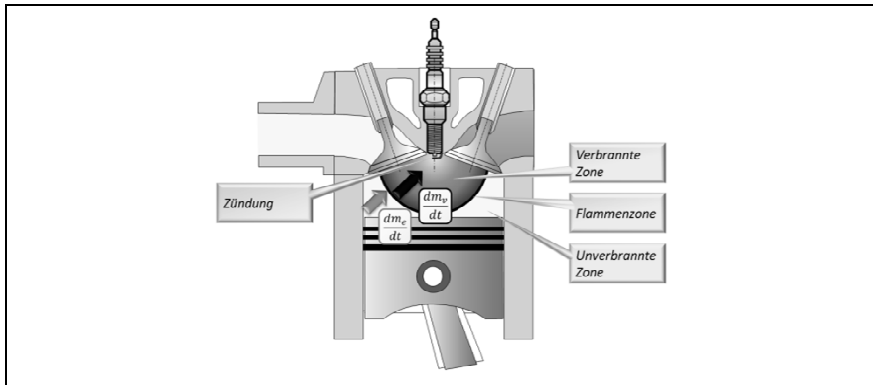
Aufbauend auf den Erkenntnissen der laminar-turbulenten Flammenausbreitung, vergleiche Kapitel 2.1.1.2, kann die Verbrennung im konventionell fremdgezündeten Ottomotor mithilfe des Entrainmentmodells<sup>18</sup> beschrieben werden [86] [66] [35]. Der prinzipielle Aufbau und die bestimmenden Gleichungen sollen

<sup>17</sup> Besonderheiten im Wandwärmeübergang bei der kontrollierten Benzinselbstzündung werden unter anderem in [84] [18] [41] diskutiert. Teilweise sind hierzu neue Wandwärmeübergangsmodelle entworfen worden. Im Rahmen dieses Vorhabens wurde mit einem Ansatz nach [8] gerechnet, für den gezeigt wurde, dass er mit geringen Veränderungen [10] auch für Brennverfahren mit homogener Kompressionszündung gute Ergebnisse liefert.

<sup>18</sup> Die Bezeichnung basiert auf dem englischen Verb *to entrain* („mitreißen“) und betont damit die Vorstellung des „Mitreißens“ von Frischgemischballen in die turbulente Flammenoberfläche.

wegen seiner breiten Anwendung und der späteren Bedeutung für die Entwicklung des neuen Brennverlaufmodells nachfolgend basierend auf der Beschreibung in [36] dargestellt werden:

Entsprechend *Abbildung 2.25* wird von einer in alle Raumrichtungen gleichmäßigen Flammenausbreitung von der Zündkerze ausgegangen. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit steht damit stets senkrecht zur Flammenoberfläche, die durch Kugelschalen oder – nach dem ersten Wandkontakt – durch Abschnitte davon beschrieben werden kann. Für die Berechnung der Flammenoberfläche wird die Zündkerzenposition, gegebenenfalls abweichend von der realen Lage, leicht außermittig positioniert, um die real stets auftretenden Abweichungen von der perfekt sphärischen Ausbreitung abzubilden. Der Brennraum wird damit in drei Bereiche eingeteilt: eine verbrannte Zone, eine unverbrannte Zone und die dazwischen liegende Flammenfront. Letztere wird in der thermodynamischen Berechnung der unverbrannten Zone zugerechnet, sodass diese zweizonig erfolgen kann.



**Abbildung 2.25:** Schematische Darstellung des Entrainmentmodells, nach [93]

Die globale Eindringgeschwindigkeit der Flammenzone in die unverbrannte Zone kann als Summe von laminarer Brenngeschwindigkeit und isotroper Turbulenzgeschwindigkeit angenommen werden:

$$u_E = u_{Turb} + s_L \quad (2.4)$$

$u_E$  Eindringgeschwindigkeit [m/s]

$u_{Turb}$  isotrope turbulente Schwankungsgeschwindigkeit [m/s]

$s_L$  laminare Flammengeschwindigkeit [m/s]

Der Eindringmassenstrom in die Flammenzone ergibt sich demnach zu

$$\frac{dm_{E,orig}}{dt} = \rho_{uv} \cdot A_F \cdot u_E \quad (2.5)$$

$\frac{dm_{E,orig}}{dt}$  Eindringmassenstrom in die Flammenzone [kg/s]

$\rho_{uv}$  Dichte im Unverbrannten [kg/m<sup>3</sup>]

$A_F$  Flammenoberfläche [m<sup>2</sup>]

$t$  Zeit [s]

und kann gemeinsam mit dem Massenstrom in die verbrannte Zone in einer Differentialgleichung für die Änderung der Flammenzonenmasse berücksichtigt werden. Gemeinsam mit einer charakteristischen Brennzeit ergibt sich dann der gesuchte Brennverlauf zu:

$$\frac{dm_v}{dt} = - \frac{dm_{uv}}{dt} = \frac{m_F}{\tau_L} \quad (2.6)$$

$\frac{dm_v}{dt}$  Massenstrom ins Verbrannte [kg/s]

$\frac{dm_{uv}}{dt}$  Massenstrom ins Unverbrannte [kg/s]

$\frac{dm_B}{dt}$  Massenstrom ins Verbrannte [kg/s]

$m_F$  Masse der Flammenzone [kg]

$\tau_L$  charakteristische Brennzeit [s]

Die charakteristische Brennzeit beschreibt, wie lange das vollständig laminare Verbrennen eines Turbulenzwirbels mit der Taylorklänge benötigt:

$$\tau_L = \frac{l_T}{S_L} \quad (2.7)$$

$l_T$  Taylorklänge [m]

Die Taylorklänge selbst beschreibt den mittleren Gradienten des Geschwindigkeitsfelds [27] und ist selbst eine Funktion der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit, der turbulenten kinematischen Viskosität und des integralen Längenmaßes, welches die energiereichsten turbulenten Strömungen beschreibt [27] und gleich dem Radius einer Kugel mit Brennraumvolumen angenommen werden kann:

$$l_T = \sqrt{\chi_T \cdot \frac{v_{Turb} \cdot l}{s_L}} \quad (2.8)$$

$\chi_T$	Vorfaktor <sup>19</sup> [-]
$v_{Turb}$	turbulente kinematische Viskosität [m <sup>2</sup> /s]
$l$	integrales Längenmaß [m]

Damit müssen nur noch die beiden Geschwindigkeitsterme selbst bestimmt werden. Für die laminare Flammgeschwindigkeit existieren verschiedene empirische Korrelationen, nach [44] in einer leicht modifizierten Form von [34] gilt:

$$s_L = \left( 0,305 - 0,549 \cdot \left( \frac{1}{\lambda} - 1,21 \right)^2 \right) \cdot \left( \frac{T_{uv}}{298 \text{ K}} \right)^{2,18-0,8 \cdot \left( \frac{1}{\lambda} - 1 \right)} \cdot \left( \frac{p}{10^5 \text{ Pa}} \right)^{-0,16+0,22 \cdot \left( \frac{1}{\lambda} - 1 \right)} \cdot (1 - 2,06 \cdot x_{AGR,st}^\xi) \quad (2.9)$$

$T_{uv}$	Temperatur im Unverbrannten [K]
$\lambda$	Luftverhältnis [-]
$x_{AGR,st}$	stöchiometrische Restgasrate <sup>20</sup> [-]
$\xi$	Exponent des Restgaseinflusses <sup>21</sup> [-]

Die isotrope Turbulenzgeschwindigkeit hängt ausschließlich von der spezifischen Turbulenz im Brennraum ab:

$$u_{Turb} = \sqrt{\frac{2}{3} \cdot k} \quad (2.10)$$

$k$	spezifische Turbulenz [m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> ]
-----	---

Die spezifische Turbulenz wird über ein separates Turbulenzmodell berechnet. Weite Verbreitung in der phänomenologischen Modellierung haben k-ε-Turbulenzmodelle gefunden [75] [51] [8] [13]. Die zeitliche Änderung der spezifischen Turbulenz wird dabei auf Basis verschiedener Produktions- und Dissipationsterme beschrieben, wobei das globale Turbulenzniveau durch einen einzel-

<sup>19</sup> Laut [44] [34] kann der Wert 15 verwendet werden.

<sup>20</sup> definiert nach [51], S. 104 f., womit bei überstöchiometrischem Luftverhältnis der unverbrannten Luftmasse im Abgas Rechnung getragen wird

<sup>21</sup> Laut [34] kann hierfür der Wert 0,973 verwendet werden.

nen Abstimmparameter  $C_k$  abgestimmt werden kann<sup>22</sup>. Er ist im Allgemeinen auch der einzige Parameter, der zur Anpassung des Entrainmentmodells an unterschiedliche Motoren verändert werden muss.

### 2.2.3 Klopfmodellierung

Obwohl kein direkter Bezug zur Brennverlaufsmodellierung besteht, sollen wegen der engen Beziehung zur kontrollierten Selbstzündung nachfolgend auch die Grundzüge der Klopfmodellierung dargestellt werden.

In der Literatur sind verschiedene Ansätze bekannt [28] [99] [80], deren gemeinsame Basis die Berechnung eines Vorreaktionsintegrals ist. Die Reaktionskinetik wird dabei vereinfachend abgebildet, indem die Reaktionsgeschwindigkeit in jedem Zeitschritt basierend auf der Arrhenius-Gleichung<sup>23</sup>, siehe Kapitel 4.2.3, berechnet und über der Zeit aufaddiert wird. Dieses Vorgehen gleicht prinzipiell der Zündverzugsberechnung in der quasidimensionalen Modellierung der dieselmotorischen Verbrennung [76].

Stellvertretend sollen kurz die maßgeblichen Berechnungsgleichungen für das Klopfmodell nach Franzke dargestellt werden [28]. Hierin wird zunächst für jeden Zeitschritt eine mittlere Vorreaktionsgeschwindigkeit bestimmt nach

$$w_{Reak} = c \cdot p^a \cdot e^{-\frac{b}{T_{uv}}} \quad (2.11)$$

$w_{Reak}$	Reaktionsrate des Zeitschritts [1/s]
$c$	Parameter zur Abstimmung des präexponentiellen Faktors [1/Pa <sup>a</sup> ]
$a$	Parameter zur Abstimmung des Druckeinflusses [-]
$b$	Aktivierungstemperatur <sup>24</sup> [K]

Diese wird ab dem Schließzeitpunkt des Einlassventils über der Zeit aufintegriert zu einem Wert, der den Vorreaktionszustand beschreibt:

$$I = \frac{1}{\omega c} \cdot \int_{\varphi_{ES}}^{\varphi_E} p^a \cdot e^{-\frac{b}{T_{uv}}} d\varphi \quad (2.12)$$

$I$	Integral der Reaktionsrate („Klopfintegral“) [-]
-----	--

<sup>22</sup> Für eine genauere Beschreibung des Turbulenzmodells sei auf die genannte Literatur verwiesen.

<sup>23</sup> nach Svante August Arrhenius (1859 -1927), schwedischer Physiker und Chemiker, der unter anderem auch als einer der ersten Wissenschaftler eine Klimaerwärmung durch eine anthropogene CO<sub>2</sub>-Anreicherung in der Atmosphäre vorhersagte – deren Folgen jedoch als überwiegend positiv sah [2].

<sup>24</sup> Eine Aktivierungstemperatur ergibt sich aus der Aktivierungsenergie durch Division mit der universellen Gaskonstanten.

$\omega$	Winkelgeschwindigkeit der Kurbelwelle [°KW/s]
$\varphi_E$	Kurbelwinkel zur Auswertung des Integrals [°KW]
$\varphi_{ES}$	Kurbelwinkel bei ES [°KW]

Überschreitet dieser Wert eine bestimmte Grenze, wird Klopfen angenommen. Die obere Grenze des Integrals entspricht dabei jedoch nicht dem aktuellen Kurbelwinkel, sondern berechnet sich in Abhängigkeit von Brennbeginn, Brenndauer und einem Abstimmparameter K:

$$\varphi_E = \varphi_{VA} + K \cdot \Delta\varphi \quad (2.13)$$

$\varphi_{VA}$	Kurbelwinkel bei Brennbeginn [°KW]
$K$	Abstimmparameter zur Bestimmung des Auswertezeitpunkts [-]
$\Delta\varphi$	Brenndauer [°KW]

Der in [28] für den Abstimmparameter K angegebene Wert von 0,53 entspricht bei üblichen Brenndauern in etwa einem Massenumsatz von 80% [93]. Demnach schließt das Modell Klopfen zu späteren Zeitpunkten aus, was der grundsätzlichen Vorstellung entspricht, dass die Vorreaktionen zu späten Zeitpunkten nach Überschreiten des Maximaldrucks nicht mehr signifikant voranschreiten, weil sich die unverbrannte Masse in den wandnahen Bereichen mit kalter, aus dem Feuersteg zurückströmender Masse vermischt [80].

#### 2.2.4 Modellierung der kontrollierten Benzinselbstzündung

Obwohl der Schwerpunkt der veröffentlichten Forschungsarbeiten auf experimentellen Arbeiten liegt, sind –meist begleitend– auch einige Versuche zur Modellierung der kontrollierten Benzinselbstzündung unternommen worden. Die meisten basieren entweder auf 3D-CFD-Berechnungen oder auf einem sogenannten stochastischen Reaktor.

CFD-basierte Modelle werden unter anderem in [104] und [77] vorgestellt. Während in [104] zur Abbildung der Reaktionskinetik ein reduzierter Mechanismus verwendet wird, wurde in [77] anhand von Experimenten ein detaillierter Reaktionsmechanismus entwickelt und in tabellierter Form als Fortschrittsvariablenmodell in CFD-Code eingebunden. Die Berechnung eines Arbeitsspiels beträgt in beiden Fällen mehrere Tage und liefert anschauliche Ergebnisse, die das Verständnis des Verbrennungsvorgangs unterstützen können, es wird jedoch kein systematischer Vergleich zum Experiment durchgeführt. Der einzige gezeigte simulierte Druckverlauf in [77] weist jedoch merkbliche Abweichungen zur Messung auf. Hervorgehoben wird auch die Sensitivität bezüglich der Temperatur: für eine Starttemperaturerhöhung von 5 K wird eine Frühverschiebung der Verbrennung von etwas über 1° Kurbelwinkel angegeben.

Stochastische Reaktormodelle basieren auf der Idee, die Gesamtwärmefreisetzung als Summe der Wärmefreisetzungen vieler einzelner Reaktoren zu verstehen, die einzeln betrachtet jeweils homogen sind, deren Startwerte jedoch stochastisch verteilt sind. In jedem Reaktor werden die Erhaltungsgleichungen und die Konzentrationen der chemischen Spezies basierend auf einem meist detaillierten Reaktionsmechanismus verfolgt. Solche Modelle werden beispielsweise in [79] [12] [22] präsentiert. Die einzelnen Reaktoren haben im einfachsten Fall keine Wechselwirkung untereinander und unterscheiden sich lediglich in der Starttemperatur, kompliziertere Modelle berücksichtigen auch Wandeinflüsse und Kraftstoffinhomogenitäten. Rechenzeiten für solche Modelle liegen typischerweise im Bereich von Stunden bis Tagen [22]. In [79] wird eine starke Sensitivität des Modells gegenüber Veränderungen der Temperatur angegeben: ein Unterschied in der Starttemperatur von 40 K kann demnach den Unterschied zwischen einem Ausbleiben der Verbrennung und einer Schwerpunktlage im oberen Totpunkt ausmachen.

In [85] wird sowohl ein statistisches Multi-Zonen-Prozessmodell vorgestellt als auch ein damit gekoppeltes CFD-Multi-Zonen-Modell. Die Rechenzeiten bei erstgenanntem liegen im Bereich weniger Minuten und ermöglichen eine gute Vorhersagefähigkeit für den Brennverlauf, während das zweitgenannte für die Berechnung eines Arbeitsspiels etwa einen Tag benötigt und ein vertieftes Verständnis der lokal bei der Verbrennung ablaufenden Prozesse ermöglicht.

Ein auf nulldimensionaler Rechnung basiertes Modell wird in [74] [53] vorgestellt. Es beinhaltet einen reduzierten Reaktionsmechanismus mit 37 Reaktionen und 21 Spezies. Der Brennraum wird in zehn unterschiedlich große Zonen mit veränderlichem Volumenanteil eingeteilt, die sich hinsichtlich ihrer Temperaturverteilung und der daran gekoppelten Restgasverteilung unterscheiden. Die modellierte Standardabweichung der Temperaturverteilung liegt dabei zwischen 5 K und 10 K. Auf eine Modellierung von Wärme- oder Massenströmen zwischen den Zonen wird verzichtet. Es wird gezeigt, dass die Variationen des Einspritzzeitpunkts mit dem Modell hinsichtlich Verbrennungslage und Mitteldruck gut wiedergegeben werden können. Der Rechenzeitbedarf wird nicht angegeben.



Modell zur Vorhersage der Brennrate in der Betriebsart  
kontrollierte Benzinselbstzündung

Keskin, M.T.

2016, XL, 188 S. 127 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-658-15064-8