

Traditio et Innovatio

Numerische Untersuchung von Vorentflammungsphänomenen im direkteinspritzenden hochaufgeladenen Ottomotor

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

der Fakultät für Maschinenbau und Schiffstechnik der Universität Rostock

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Christof Benz

aus Rostock

Gutachter:

1. Gutachter:

Universität Rostock

Prof. Dr.-Ing. habil. Egon Hassel

Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, Universität Rostock

2. Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. Horst Harndorf

Lehrstuhl für Kolbenmaschinen und Verbrennungsmotoren, Universität Rostock

3. Gutachter:

Dr.-Ing. Karsten Michels

Volkswagen AG

Tag der Einreichung: 02.11.2011

Tag der mündlichen Prüfung: 19.06.2012

Rostock 2012

urn:nbn:de:gbv:28-diss2015-0106-0

Dissertation

Fakultät für Maschinenbau und Schiffstechnik

Für meine geliebte Frau Dana und meinen lieben Sohn Felix.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der Universität Rostock in Zusammenarbeit mit dem Projektpartner der Volkswagen AG.

Mein erster Dank gilt den Herren Prof. Dr.-Ing. habil. E. Hassel und Dr.-Ing. J. Nocke, die mir die Bearbeitung der interessanten Thematik ermöglichten und mich bei der Bearbeitung der Aufgabenstellung unterstützten. Ebenso möchte ich mich bei Prof. Dr.-Ing. H. Harndorf vom Lehrstuhl für Kolbenmaschinen und Verbrennungsmotoren für die Übernahme des Koreferats bedanken. Ein besonderer Dank gilt außerdem Herrn Dr.-Ing. K. Michels von der Volkswagen AG für die Übernahme des Koreferats und für die wertvollen Hinweise sowie Anregungen.

Allen Mitarbeitern des Lehrstuhls für Technische Thermodynamik und des Lehrstuhls für Kolbenmaschinen und Verbrennungsmotoren sowie den Mitarbeitern der FVTR GmbH Rostock ein großes Danke schön für die tatkräftige Unterstützung, auch in moralischer Hinsicht. Besonderer Dank gebührt Herrn Martin Reißig, der mir nicht nur in fachlicher sondern auch in privater Hinsicht ein sehr guter Diskussionspartner und ein noch besserer Freund ist.

Des Weiteren bin ich den Mitarbeitern der Volkswagen AG dankbar, die direkt mit mir an dem Projekt gearbeitet haben. Besonders hervorzuheben sind dabei die Herren Dr.-Ing. H. Hoffmeyer, Dr.-Ing. A. Birkigt und U. Reisch. Sie halfen mir mit konstruktiven Diskussionsbeitragen aber auch mit experimentellen und simulationstechnischen Daten.

Mein größter Dank gilt meiner Familie, darunter meine Frau Dana und meine Eltern, die mich in allen Lebenslagen und bei allen Schwierigkeiten tatkräftig unterstützt haben. Ohne sie wäre diese Arbeit in dieser Form nicht möglich gewesen.

Rostock, im November 2012

Christof Benz

Inhaltsverzeichnis

Vo	prwort	ii
Ał	bbildungsverzeichnis	vi
Та	abellenverzeichnis	x
Ał	bkürzungsverzeichnis	xi
Sy	ımbolverzeichnis	xii
1	Einleitung 1.1 Motivation 1.2 Wissenschaftlicher Hintergrund 1.2.1 Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen 1.2.2 Bekannte Selbstzündungsphänomene im Ottomotor 1.2.3 Charakterisierung von Vorentflammungen 1.2.4 Diskussion von Entstehungshypothesen	1 1 3 3 8 10 11
2	Ziel, Methodik und Aufbau der Arbeit	15
I	Grundlagen	18
3	Simulation der Zylinderinnenströmung 3.1 Bilanzgleichungen zur Beschreibung reaktiver Strömungen 3.1.1 Gesamtmassenbilanz 3.1.2 Speziesmassenbilanz 3.1.3 Impulsbilanz 3.1.4 Energiebilanz 3.1.5 Zustandsgleichungen 3.2 Numerische Strömungsmechanik 3.2.1 Räumliche Diskretisierung 3.2.2 Zeitliche Diskretisierung 3.3 Turbulente Strömungen und Turbulenzmodellierung 3.3.1 Favre-gemittelte Bilanzgleichungen 3.3.2 Schließungsansatz	 18 19 19 20 21 21 22 23 23 24 26 27 29
4	Modellierung der Gemischaufbereitung 4.1 Spraygleichung und Modellierungsstrategien 4.2 Spraymodell 4.2.1 Primär- und Sekundäraufbruch 4.2.2 Wärme- und Stoffübertragung 4.2.3 Impulsübertragung und Tropfentracking 4.3 Zusammenfassung	30 31 31 33 35 36
5	Modellierung der Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen	37

	5.1 5.2 5.3 5.4	Grundlagen chemischer ReaktionskinetikStrategien zur Modellierung von ZündvorgängenBeschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion5.3.1Konzept des Partially-Stirred-Reactor ModellsZusammenfassung	37 39 41 43 45
11	Anw	vendungen	47
6	Gitte	ererstellung, Anfangs- und Randbedingungen	47
	6.1	Numerische Rechengitter für reale Motorgeometrien	47
		6.1.1 Allgemeine Herangehensweise	48
		6.1.2 Generierung der Blockstruktur mit ANSYS ICEM CFD	48
	6.2	Anfangs- und Randbedingungen für die Motorsimulation	51
		6.2.1 Anfangsbedingungen	51
		6.2.2 Randbedingungen an festen Wänden und Einströmrändern	52
	6.3	Zeitlicher Ablauf der Motorsimulation	52
	6.4	Zusammenfassung	54
7	Vali	dierung	56
•	7 1	Strömungsmodell	56
	1.1	7 1 1 Testfallbeschreibung	57
		7.1.2 Freehnisse und Diskussion	58
	7.2	Spravmodell	61
	••=	7.2.1 Testfallbeschreibung	61
		7.2.2 Ergebnisse und Diskussion	63
	7.3	Verifikation des Gesamtmotormodells	65
		7.3.1 Testfallbeschreibung	65
		7.3.2 Ergebnisse	67
	7.4	Zusammenfassung	69
0	Duär	contation und Dickussion der Derematerusristion	71
0	R 1	Mathadik	71
	0.1	Oberflöchentemperatur der Auglassventile	75
	0.2	8.2.1 Auglassymptiltemperaturvariation	75
		8.2.2. Variation der Temperaturverteilung	81
	83	7.2.2 Valiation dei Temperaturvertenung	83
	0.0	8 3 1 Finfluss der Zündkerzentemperatur	83
		8.3.2 Variation der Zündkerzentonologie	85
		8.3.3 Variation der Zündkerzenausrichtung	88
	84	Abgasvariation	91
	0.1	8 4 1 Finfluss von realem Abgas	92
		8.4.2 Einfluss von Stickstoffmonoxid auf die Vorentflammungsausbildung	95
		8.4.3 Einfluss unverbrannter Kohlenwasserstoffe im Abgas auf die Vorentflammungs-	00
		bildung	97
	8.5	Akkumulation von Kraftstoff	103
	0.0	8.5.1 Vorgehensweise	03
		8.5.2 Kraftstoffanreicherung in Kolbennähe	03
		8.5.3 Kraftstoffanreicherung im Bereich der Zvlinderkopfdichtung	104
	8.6	Öltropfenzufuhr	106
	-	8.6.1 Methodik	108
		8.6.2 Ergebnisse	10
		~	

Literaturverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

1.1	Vorentflammungsbereich im Motorkennfeld	2
1.2	Gegenüberstellung von normaler und klopfender Verbrennung sowie der Vorentflam-	
	mung bei $n = 1750 ^{1/min}$ und $M_D = 240 Nm$	3
1.3	Zündgrenzen für ein Kohlenwasserstoff-Luft-Gemisch	4
1.4	Schematische Darstellung des Selbstzündprozesses	5
1.5	Typische Phänomene bei der Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen .	6
1.6	Verlauf der Zündverzugszeit bei Variation von Druck und Temperatur	7
1.7	Verlauf der Zündverzugszeit bei Variation vom Abgasanteil	8
1.8	Schematische Darstellung von Motorklopfen	9
1.9	Zylinderdruckverlauf von Zyklen mit klopfender Verbrennung; der ${f Z}$ ündzeitpunkt liegt	
	bei 10°KW n. ZOT	10
1.10	Zylinderdruckverlauf von Zyklen mit Glühzündung; der ZZP liegt bei 10°KW n. ZOT	11
1.11	Zylinderdruckverlauf mehrerer aufeinanderfolgender Zyklen mit Vorentflammungen $\ .$	12
1.12	Strukturdiagramm der möglichen Ursachen für Vorentflammungen $\ldots \ldots \ldots \ldots$	13
3.1	Realgasfaktor von Luft in Abhängigkeit von Druck und Temperatur	22
3.2	Schematische Darstellung des Energiespektrums	25
3.3	Instationärer Geschwindigkeitsverlauf an einem Punkt aus einer Grobstruktursimulation	27
4.1	Prinzipskizze zum Blob-Sheet-Modell	32
4.2	Analogie zwischen dem System Tropfen-Gas und einem angeregten, gedämpften Feder-	
	Masse-System	32
4.3	Energie- und Stoffströme an einem Modelltropfen	34
5.1	Grundidee des PaSR-Modells	43
5.2	Aufteilung des Prozesses in Reaktions- und Mischungsschritt	44
6.1	Aufteilung der komplexen Zylindergeometrie in einzelne Abschnitte	49
6.2	Blockstruktur in der x-z-Ansicht	50
6.3	Blockstruktur in der x-y-Ansicht und detaillierte Darstellung der Blockstruktur im	
	Einlassventilschnitt	50
6.4	Ausschnitt von der Ventilregion des numerischen Rechengitters für die Motorsimulation	51
6.5	Schematischer Ablauf der Gittererstellungsprozedur und der Motorsimulation	53
6.6	Zeitlicher Ablauf der Motorsimulation	54
7.1	Darstellung des PIV-Prüfstands bei der VW AG	57

7.2	Randflächenbezeichnung bei der Strömungsmodellvalidieurng und Ausschnitt des blockstru	ık-
	turierten Gitter	58
7.3	Auswerteebene und -linien für den PIV-Vergleich	59
7.4	Gegenüberstellung der globalen Strömungsstruktur in der x-z-Ebene bei $y = 0 \dots$	59
7.5	Gegenüberstellung von u_z in der x-z-Ebene bei $y = 0$	60
7.6	Quantitative Gegenüberstellung von u_z entlang ausgewählter Profillinien	61
7.7	Geometrie und Rechengitter der Druckkammernachbildung	62
7.8	Randbedingungen für die Spraymodellierung	63
7.9	Schematische Darstellung von Penetration und Spraykegelwinkel	63
7.10	Gegenüberstellung ausgewählter Sprayeigenschaften von Experiment und numerischer	
	Simulation	64
7.11	Geometrie und Rechengitter für den Referenzfall	66
7.12	Instationärer Massenstromverlauf am Einlass- bzw. Auslasskanalquerschnitt	66
7.13	Zeitlicher Verlauf ausgewählter, zylindergemittelter Größen jeweils berechnet mit einem	
	0D-Solver, OpenFOAM und VECTIS	68
7.14	Zeitlicher Verlauf von Zylindermasse, Luftmasse und verdampfter Kraftstoffmasse je-	
	weils berechnet mit OpenFOAM und VECTIS	69
8.1	Vergleich des kompletten und reduzierten chemischen Mechanismus	72
8.2	Berechneter zeitlicher Verlauf von Temperatur, OH- und CO ₂ -Massenbruch in vier aus-	
	gewählten Zustandspunkten bei $\lambda=1$	73
8.3	Ausgewählte Darstellungsebenen für die Auswertung	74
8.4	Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolben-	
	stellungen im Fall $T_{AV} = 973 \text{ K}$	76
8.5	Räumliche Verteilung des $\rm CO_2$ -Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolben-	
	stellungen im Fall $T_{AV} = 973 \text{ K}$	77
8.6	Räumliche Verteilung der Temperatur im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellun-	
	gen im Fall $T_{AV} = 973 \text{ K}$	78
8.7	Struktur der Reaktionszone als OH-Isofläche im Brennraum zu verschiedenen Kurbel-	
	wellenwinkel	79
8.8	Induktionswinkel bewertet nach OH resp. CO_2 bei Variation der Auslassventiltemperatur	80
8.9	Radiale Temperaturverteilung über den Auslassventiltellern	81
8.10	Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum zu verschiedenen Zeitpunk-	
	ten bei radialer Auslassventiltemperatur	82
8.11	Integration der Zündkerze in das bestehende Rechengitter	83
8.12	Räumliche Verteilung von OH auf Isoflächen	84
8.13	Strömungsverhältnisse um die Zündkerze	85
8.14	Schematische Darstellung der unterschiedlichen Konstruktionen der verwendeten Zünd-	
	kerze	86
8.15	Räumliche Entwicklung des OH-Massenbruchs bei Einführung eines umfangseitigen	
	Ringspalts in der Zündkerze	86

8.16	Räumliche Entwicklung des CO_2 -Massenbruchs bei Einführung eines umfangseitigen	
	Ringspalts in der Zündkerze	87
8.17	Schematische Darstellung der unterschiedlichen Zündkerzenorientierung inklusive der	
	Drehrichtung des Tumble-Wirbels	89
8.19	Räumliche Entwicklung des CO ₂ -Massenbruchs für die gerichtete Zündkerzenausrichtung	89
8.18	Räumliche Entwicklung des OH-Massenbruchs für die gerichtete Zündkerzenausrichtung	90
8.20	Räumliche Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages und Vektordarstellung des Ge-	
	schwindigkeitsfeldes bei 705°KW n. ZOT	90
8.21	Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolben-	
	stellungen für die Untersuchung des Einflusses von realem Abgas	93
8.22	Räumliche Verteilung des CO_2 -Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolben-	
	stellungen für die Untersuchung des Einflusses von realem Abgas	94
8.23	Räumliche Verteilung der Temperatur im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellun-	
	gen für die Untersuchung des Einflusses von realem Abgas	95
8.24	Zeitliche und räumliche Entwicklung der Reaktionsfront unter Berücksichtigung von	
	realem Abgas	96
8.25	Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolben-	
	stellungen bei Nichtberücksichtigung teiloxidierter Komponenten außer NO $\ \ldots \ldots \ldots$	97
8.26	Räumliche Verteilung des CO_2 -Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolben-	
	stellungen bei Nichtberücksichtigung teiloxidierter Komponenten außer NO $\ \ldots \ldots \ldots$	98
8.27	Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei Variation der unver-	
	brannten Kohlenwasserstoffkomponenten im Fall von Propen und Ethen $\ \ldots\ \ldots\ \ldots$	99
8.28	Räumliche Verteilung des CO ₂ -Massenbruchs im Brennraum bei Variation der unver-	
	brannten Kohlenwasserstoffkomponenten im Fall von Propen und Ethen \ldots	100
8.29	Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei Variation der unver-	
	brannten Kohlenwasserstoffkomponenten im Fall von Propen und Ethin $\ \ldots\ \ldots\ \ldots\ \ldots$	101
8.30	Räumliche Verteilung des CO_2 -Massenbruchs im Brennraum bei Variation der unver-	
	brannten Kohlenwasserstoffkomponenten im Fall von Ethin	102
8.31	Kraftstoffanreicherung in Kolbennähe	103
8.32	Räumliche Verteilung des Kraftstoffmassenbruchs nach der Kraftstoffanreicherung $~$. $~$.	104
8.33	Kraftstoffanreicherung in Zylinderkopfnähe	105
8.34	Räumliche Verteilung des Kraftstoffmassenbruchs zu unterschiedlichen Kolbenstellun-	
	gen bei lokaler Anfettung im Bereich der Zylinderkopfdichtung	106
8.35	Verlauf der Zündverzugszeit für die Variation zugeführter n-Alkane bei verschiedenen	
	Massenanteilen	107
8.36	Verteilung der Spraypakete im Brennraum während des Einspritzvorgangs bei $486^\circ{\rm KW}$	
	n. ZOT	108
8.37	Druck und Temperatur während des Kompressionstaktes ohne Zündung für ausgewählte	
	Zellen auf der Auslassventilseite	109
8.38	Verlauf des Induktionswinkels bei ansteigendem Freisetzungswinkel für ein Modelltröpf-	
	chen von $d_{\ddot{O}l} = 10 \ \mu \text{m}$	110

8.39	Induktionswinkel in Relation zum oberen Totpunkt über den Freisetzungswinkel für ein	
	Modelltröpfchen von $d_{\ddot{O}l} = 10 \ \mu \text{m}$	111
8.40	Induktionswinkel über Freisetzungswinkel für unterschiedliche $\ddot{\mathrm{O}}$ ltropfendurchmesser .	112
8.41	Induktionswinkel in Relation zum oberen Totpunkt über den Freisetzungswinkel für	
	unterschiedliche Öltropfendurchmesser	112

Tabellenverzeichnis

3.1	Konstantensatz für das k - ω -SST-Modell	28
4.1	Konstantensatz für das TAB-Modell	33
7.1	Rand- und Anfangsbedingungen für die Validierung des Strömungsmodells	58
7.2	Rand- und Anfangsbedingungen für die Validierung des Spraymodells	62
7.3	Geometrische Daten und Betriebsdaten für den Vergleichsfall	65
7.4	Rand- und Anfangsbedingungen für die Verifikation des Gesamtmodells an Vectis $. \ .$	67
8.1	Reale Abgaszusammensetzung in Molenbrüchen	92
8.2	Abgaszusammensetzung ohne Kohlenstoffmonoxid bzw. teiloxidierte Kohlenwasserstoff-	
	komponenten in Molenbrüchen	95
8.3	Abgaszusammensetzung ohne NO in Molenbrüchen	97

Abkürzungsverzeichnis

Erklärung
Abgasturbolader
Computational Fluid Dynamics
Einlass öffnet
Einlassventilsteuerzeit
Intrinsic Low Dimension-Manifold
Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. joint probably density function)
Kurbelwellenwinkel
Ladungsbewegungsklappe
Ladungswechsel oberer Totpunkt
Oberer Totpunkt
Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. probably density function)
Reynolds-Averaged-Navier-Stokes
Shear Stress Transport
Taylor-Analogy-Breakup
Vorentflammung
Zündung oberer Totpunkt
Zündzeitpunkt

Symbolverzeichnis

Symbol	Einheit	Bedeutung
A	m^2	Fläche
В	1	präexponentieller Faktor
C_D	1	Widerstandskoeffizient
Co	1	Courant-Zahl
с	$\mathrm{mol}\mathrm{l}^{-1}$	Konzentration
c_p	$\rm Jkg^{-1}K^{-1}$	spezifische Wärmekapazität
D	$\mathrm{m}^2\mathrm{s}^{-1}$	molekularer Diffusionskoeffizient
E_a	$\rm Jmol^{-1}$	Aktivierungsenergie
\vec{F}	${\rm kgms^{-2}}$	Kraft
\vec{F}_{j}^{S}	$\rm kgm^{-2}s^{-2}$	Spray-Impulsquellterm
g	${\rm ms^{-2}}$	Erdbeschleunigung
h_s	$\rm Jkg^{-1}$	sensible spezifische Enthalpie
Δh_f^0	$\rm Jmol^{-1}$	Standardbildungsenthalpie
k	$\mathrm{m}^2\mathrm{s}^{-2}$	turbulente kinetische Energie
k_f, k_b	$\rm kgmol^{-1}s^{-1}$	Geschwindigkeitskoeffizient (Hin- bzw. Rückreaktion)
L	m	charakteristisches Längenmaß
L_A	m	Aufbruchlänge
l_t	m	Integrales Längenmaß
l	m	Mischungslänge
M	$\rm kg kmol^{-1}$	molare Masse
M_D	Nm	Drehmoment
m	kg	Masse
Nu	1	Nusselt-Zahl
n	s^{-1}	Drehzahl
Pr	1	Prandtl-Zahl
p	Pa	Druck
\dot{Q}^C	${\rm J}{\rm m}^{-3}{\rm s}^{-1}$	chemischer Energiequellterm
\dot{Q}^S	${\rm J}{\rm m}^{-3}{\rm s}^{-1}$	Spray-Energiequellterm
q_{ϕ}	1	Quellterm allgemeiner Größe
R	$\rm Jkg^{-1}K^{-1}$	spezifische Gaskonstante
Re	1	Reynolds-Zahl
R_m	$\mathrm{Jmol^{-1}K^{-1}}$	universelle Gaskonstante

Latoinischo Buchstah

Symbol	Einheit	Bedeutung
r	m	Radius
r_f, r_b	$\rm molm^{-3}s^{-1}$	Vorwärts- bzw. Rückwärtsreaktionsrate
Sc	1	Schmidt-Zahl
Sh	1	Sherwood-Zahl
Т	Κ	absolute Temperatur
Tu	1	Turbulenzgrad
t	s	Zeit
\vec{u}	${\rm ms^{-1}}$	Geschwindigkeitsvektor
V	m^3	Volumen
\vec{V}	${\rm ms^{-1}}$	Diffusionsgeschwindigkeit
\vec{x}	m	Ortsvektor
X	1	Molenbruch
Y	1	Massenbruch
y_W	m	Wandabstand
y	1	relative Tropfendeformation
\dot{y}	1	Tropfendeformationsgeschwindigkeit

Griechische Buchstaben

Symbol	Einheit	Bedeutung
Г	$\mathrm{m}^2\mathrm{s}^{-1}$	allgemeiner Diffusionskoeffizient
η	m	Kolmogorov-Längenmaß
κ	m^{-1}	Wellenzahl
κ	1	Zeitskalenverhältnis
λ	$\rm Wm^{-1}K^{-1}$	Wärmeleitfähigkeit
μ	$\rm kgm^{-1}s^{-1}$	dynamische Viskosität
ν	$\mathrm{m}^2\mathrm{s}^{-1}$	kinematische Viskosität
$\nu^{'},\nu^{''}$	1	stöchiometrische Koeffizienten
ρ	${\rm kg}{\rm m}^{-3}$	Dichte
$\dot{ ho}$	${\rm kgm^{-3}s^{-1}}$	Massenquellterm
$\dot{ ho}^S$	${\rm kgm^{-3}s^{-1}}$	Sprayquellterm der Gesamtmasse
σ_{ij}	$\rm kgm^{-1}s^{-2}$	Spannungstensor
au	s	Kolmogorov-Zeitmaß
$ au_c$	s	chemisches Zeitmaß
$ au_{mix}$	s	turbulentes Zeitmaß
$ au_{Ind}$	s	Zündverzugszeit
$ au_{ij}$	$\rm kgm^{-1}s^{-2}$	viskose Spannungstensor
Φ	1	Zustandsraumvektor
ϕ	1	allgemeine Variable
v	${\rm ms^{-1}}$	Kolmogorov Geschwindigkeit
$\dot{\Omega}_{lpha}$	$\rm kgm^{-3}t^{-1}$	chemischer Komponentenquellterm

Symbol	Einheit	Bedeutung
$\dot{\Omega}^S_{lpha}$	$\rm kgm^{-3}t^{-1}$	Spray-Komponentenquellterm
ω_{bu}	s^{-1}	Eigenfrequenz

Indizes

Indizes	Bedeutung
α	Spezies
g	gasförmig
i	Zählvariable
konv	konvektiv
1	liquid
rel	relativ
s	Oberfläche
Т	Tropfen
t	turbulent
Verd	Verdampfung
zyl	Zylinder

1 Einleitung

1.1 Motivation

Der Verbrennungsmotor als Antriebsquelle für Personenkraftwagen, Schiffe und Flugzeuge hat eine große Bedeutung für die Mobilität und den Verkehr, wodurch dieser indirekt die wirtschaftliche Anziehungskraft einer Region beeinflusst. Aber auch für jeden Einzelnen ist der Verbrennungsmotor entscheidend für die Lebensqualität, was wiederum in Ländern mit steigender Wirtschaftskraft (z.B. China) zu einem starken Anstieg der Nachfrage an individueller Mobilität nach sich zieht. Hieraus ergeben sich Fragestellungen hinsichtlich des steigenden Ausstoßes an Schadstoffen (wie z.B. Stickstoffoxide und unverbrannte Kohlenwasserstoffe) und des zum Treibhauseffekt beitragenden Gases Kohlenstoffdioxid (CO₂). Der Anteil des Verkehrs (z.B. Straßenverkehr) am CO₂-Ausstoß betrug 2009 23%, so dass auf Grund der oben genannten Tatsachen mit einem weiteren Anstieg zu rechnen ist/34/.

So bleibt es auch in Zukunft vorrangiges Ziel für die Entwicklung neuer Motoren, den Verbrauch und den damit einhergehenden CO_2 -Ausstoß zu senken. Eine Möglichkeit, dieses Entwicklungsziel zu erreichen, besteht im *Downsizing*, wobei hierunter im Allgemeinen eine Verringerung des Hubvolumens bei gleichbleibender oder gesteigerter Leistung verstanden wird. Hierdurch ergibt sich eine Verschiebung im Motorkennfeld aus Bereichen niedriger Motorlast hin zu Bereichen hoher Last, die wiederum einen günstigeren spezifischen Kraftstoffverbrauch aufweisen. Ein weiterer Verbrauchsvorteil entsteht aus der Verringerung von Reibungsverlusten durch die kleinere Hubraumausführung.

Gerade in Betriebspunkten mit kleinen Drehzahlen, wo der Enthalpiestrom über dem Abgasturbolader nicht ausreicht, um den geforderten Ladedruck zu realisieren, führt die Hubraumverkleinerung zu einem deutlichen Drehmomentabfall, der vom Kunden nicht toleriert werden würde. Hieraus ergibt sich die Forderung nach der Steigerung des effektiven Mitteldrucks über dem gesamten Drehzahlbereich mittels Kombination aus mechanischem Kompressor, ATL und Ladeluftkühlung /38/. Im Vergleich zum konventionellen Ottomotor sind mit dem Downsizing-Prinzip Verbrauchseinsparungen von 10-30% realisierbar /26/. Neben dem Downsizing tritt auch die Benzin-Direkteinspritzung in den Brennraum immer mehr in den Fokus der Motorenhersteller. Der Vorteil der direkten Kraftstoffeinbringung liegt darin, dass die für die Verdampfung des Kraftstoffes aufzubringende Energie zu einer Absenkung der Fluidtemperatur direkt im Brennraum herbeiführt. Somit können höhere Verdichtungsverhältnisse bzw. Aufladegrade realisiert werden.

Es hat sich gezeigt, dass in einigen Kennfeldbereichen, vorzugsweise bei niedriger Drehzahl und hoher Last (Abbildung 1.1), durch hohe Aufladegrade und extremes Downsizing abnormale Verbrennungsereignisse (Vorentflammungen (VE)) auftreten, die zu einer spontanen Selbstzündung des Frischluft-Kraftstoff-Gemisches vor der eigentlichen Zündungseinleitung durch die Zündkerze führen [/40/, /47/, /77/, /79/]. Auf Grund der hohen Ladungsdichte resultiert die spontane Energiefreisetzung, infolge einer Vorentflammung, in einem starken Zylinderdruckanstieg, s. Abbildung 1.2. Wegen der sehr frühen Selbstzündung können klopfähnliche Erscheinungen im Endgas auftreten, die in einem hochfrequenten Zylinderdrucksignal resultieren. Als Folge einer Vorentflammung treten massive Materialbelastungen auf, die beim mehrmaligen Auftreten dieser Ereignisse ein Versagen des gesamten Triebwerks hervorrufen können.



Abbildung 1.1: Vorentflammungsbereich im Motorkennfeld nach Michels et al. /47/

In Abbildung 1.2 sind drei unterschiedliche Verbrennungsabläufe zu sehen. Aufgetragen ist hier der indizierte Zylinderdruck über Grad Kurbelwellenwinkel. Hierin sind neben einer normalen Verbrennung, eine klopfende Verbrennung sowie ein Vorentflammungsereignis dargestellt. Die Zündungseinleitung liegt bei der regulären Verbrennung bei ca. 15°KW Zündung nach oberen Totpunkt (ZOT). Hierbei wird das gesamte Kraftstoff-Luft-Gemisch durch die sich im Brennraum ausbreitende Flammenfront umgesetzt. Die dabei freiwerdende Energie führt zu dem erwarteten Druckanstieg. Demgegenüber liegt der Zündzeitpunkt bei der klopfenden Verbrennung bei ca. 10°KW nach ZOT, wobei auch hier ein Großteil des Gemisches durch die reguläre Flamme umgesetzt wird. Jedoch führt die Verstellung nach "früh" zu Selbstzündung in dem durch die Flammenfront verdichteten Endgas, die die hochfrequenten Schwingungen im Drucksignal hervorrufen.

Im Vergleich zu den vorher genannten Verbrennungen kommt es bei einer Vorentflammung zur Zündungseinleitung durch Selbstzündung des Kraftstoff-Luft-Gemisches, was zu einem anderen Druckverlauf führt, vgl. Abbildung 1.2. Hier ist zu erkennen, dass die VE-Kurve bereits vor dem ZOT einen merklichen Druckanstieg zeigt, was auf einen deutlich verfrühten Brennbeginn hindeutet. In Folge der frühen Selbstzündung des Kraftstoff-Luft-Gemisches deutlich vor dem ZOT liegen sehr hohe Drücke und Temperaturen im Endgas vor, die weitere Selbstzündungsereignisse verursachen. Die Selbstzündungen im Endgas verursachen Druckwellen, die in Abbildung 1.2 als hochfrequente Schwingungen des Zylinderdrucksignals sichtbar sind.



Abbildung 1.2: Gegenüberstellung von normaler und klopfender Verbrennung sowie der Vorentflammung bei n $=1750\,{\rm l/min}$ und ${\rm M_D}=240~{\rm Nm}$

1.2 Wissenschaftlicher Hintergrund

Wie bereits angemerkt, handelt es sich bei der Vorentflammung um ein neuartiges Selbstzündungsphänomen, das erst in letzter Zeit unter den Bedingungen extremen Downsizings und hoher Aufladegrade aufgetreten ist. Um die bei der VE ablaufenden Prozesse besser zu verstehen, gibt Unterabschnitt 1.2.1 eine kurze Einführung in die Theorie der Selbstzündung von Kraftstoff-Luft-Gemischen, wobei besonderer Augenmerk auf die Vorgänge im Niedertemperaturbereich gelegt wird. Weiterhin soll der Vollständigkeit halber ein kurzer Überblick über bisherige typische ottomotorische Selbstzündungsereignisse gegeben werden, Abschnitt 1.2.2. Die Abschnitte 1.2.3 und 1.2.4 beschäftigen sich mit der Charakterisierung der Vorentflammungen bzw. diskutieren verschiedene Entstehungshypothesen, die eine VE verursachen können.

1.2.1 Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen

Der Begriff Selbstzündung steht für eine schnelle Verbrennungsreaktion, die nicht durch eine externe Zündquelle in Gang gesetzt wird, wobei im Detail sehr komplexe, voneinander abhängige und sich gegenseitig beeinflussende physikalisch-chemische Vorgänge ablaufen /11/. Der Selbstzündprozess von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen ist eng verbunden mit dem Vorhandensein von Radikalen. Hierbei wird der Prozess vom Ausgangsgemisch bis hin zum Endprodukt über Elementarreaktionen beschrieben. Sie bilden die Vorgänge im Gegensatz zu Globalreaktionen so ab, wie sie auch auf molekularer Ebene ablaufen. Entstehung und Vernichtung von Radikalen werden durch Radikalkettenreaktionen erklärt, die sich in vier Typen unterteilen lassen:

- Ketteninitiierungsreaktionen: Aus einer stabilen Spezies entsteht mindestens ein Radikal als Produkt,
- Kettenfortpflanzungsreaktion: Ein Radikal und eine stabile Spezies bilden eine reaktive Zwischenspezies,

- Kettenverzweigungsreaktion: Hierbei entstehen zwei Radikale aus einem Radikal und einer stabilen Spezies,
- Kettenterminierungsreaktion: Reaktive Spezies reagieren zu stabilen Spezies.

Wichtige Vertreter von Radikalen bei Verbrennungsprozessen sind H, O, OH, CH₃ und HO₂ /75/.



Abbildung 1.3: Zündgrenzen für ein Kohlenwasserstoff-Luft-Gemisch nach /74/

Die thermodynamischen Bedingungen unter denen eine Selbstzündung stattfindet, können mittels Experimenten detektiert und in einem p,T-Diagramm für eine konstante Gemischzusammensetzung aufgetragen werden. In Abbildung 1.3 ist exemplarisch ein solches p,T-Diagramm dargestellt, worin die durchgezogene Linie den Verlauf der Zündgrenze aufzeigt. Die Zündgrenze trennt die Bereiche in denen Selbstzündungen auftreten von denen langsamer Reaktionen. Ausgehend von T_1 und bei kleinen Drücken findet keine Selbstzündung statt. Erfolgt eine Erhöhung des Drucks, wird die erste Zündgrenze überschritten und eine Explosion erfolgt. Bei weiterer Erhöhung des Drucks, kommt es nach Überschreiten der zweiten Zündgrenze zu keiner Selbstzündung. In den Bereich der dritten Zündgrenze gelangt das Gemisch bei zunehmender Drucksteigerung. Dies ist auch der typische Druck-Temperatur-Bereich im Ottomotor [/19/, /74/]. Hier sind die Selbstzündvorgänge durch den Anstieg der Temperatur während der Kompression, der Ansaugtemperatur und die Wärmefreisetzung auf Grund chemischer Reaktionen sowie durch die Wärmeübertragung an die Brennraumwände geprägt.

Ebenso sind in Abbildung 1.3 weitere Charakteristika von Kohlenwasserstoffzündungen wie der Bereich der kalten Flammen und der Mehrfachzündungen dargestellt. Als kalte Flamme wird eine Verbrennung infolge einer Selbstzündung verstanden, bei der es nur zu einem leichten Temperaturanstieg kommt /55/. Hierfür zeichnen die unvollständige Umsetzung des Kraftstoffes unter diesen Druckund Temperaturbedingungen verantwortlich. Mehrfachzündungen werden später in diesem Abschnitt an einem Beispiel erläutert.

Abbildung 1.4 zeigt den schematischen Ablauf der Selbstzündung eines zündfähigen Gemisches in einem T,t-Diagramm. Es ist zu sehen, dass ein messbarer Temperaturanstieg erst nach einer gewissen Zeitspanne, der Induktions- oder Zündverzugszeit, zu registrieren ist. In diesem Zeitraum wird über Radikalkettenreaktionen der Radikalpool aufgebaut. Erreicht dieser ein kritisches Konzentrationsmaß, kommt es zu einer spontanen Umsetzung des Großteils des Gemisches. Somit ist das Verständnis für Selbstzündprozesse eng mit der Identifizierung von Kettenverzweigungsreaktionen unter den jeweiligen Bedingungen verbunden /75/. Zündverzugszeiten sind ein typisches Merkmal für Systeme, die Radikalkettenreaktionen unterliegen und so auch charakteristisch für Selbstzündprozesse von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen /74/.



Abbildung 1.4: Schematische Darstellung des Selbstzündprozesses

Da es sich bei Vorentflammungen um ein Phänomen im Niedertemperaturbereich handelt (T < 1000 K), wird im Folgendem nur auf den Zündmechanismus in diesem Bereich eingegangen. Die Ketteneinleitung geschieht über die Reaktion von Kraftstoffmolekülen (R) mit Sauerstoff zu Alkyl- und Hydroperoxyradikalen (Radikale sind mit • gekennzeichnet),

$$R + O_2 \rightarrow R^{\bullet} + HO_2^{\bullet}$$

Das Alkylradikal R[•] ist Ausgangspunkt einer Reihe weiterer Reaktionen, die anlehnend an Chevalier et al. [/14/, /15/] und Warnatz et al. /74/ wiedergegeben werden. In einem nächsten Schritt reagiert das Alkylradikal wiederum mit Sauerstoff, wobei diese Reaktion reversibel unter Bildung von Peroxy-Radikalen RO_2^{\bullet} abläuft (gekennzeichnet mit \leftrightarrow ; irreversible Reaktionen sind mit \rightarrow symbolisiert)

$$\mathbf{R}^{\bullet} + \mathbf{O}_2 \leftrightarrow \mathbf{RO}_2^{\bullet}. \tag{1.1}$$

Im Weiteren kann RO_2^{\bullet} einer externen oder internen Wasserstoffumlagerung unterliegen, die folgende Reaktionspfade ermöglicht:

$$\begin{split} \mathrm{RO}_2^{\bullet} + \mathrm{RH} &\to \mathrm{RO}_2\mathrm{H} + \mathrm{R}^{\bullet} \quad (\text{externe H-Abspaltung}) \\ \mathrm{RO}_2\mathrm{H} &\to \mathrm{RO}^{\bullet} + \mathrm{OH}^{\bullet} \quad (\text{Kettenverzweigung}) \\ \mathrm{RO}_2^{\bullet} &\to \mathrm{R'O}_2\mathrm{H}^{\bullet} \quad (\text{interne H-Abspaltung}) \\ \mathrm{R'O}_2\mathrm{H}^{\bullet} &\to \mathrm{R'O} + \mathrm{OH}^{\bullet} \quad (\text{Kettenfortpflanzung}) \\ \mathrm{R'O}_2\mathrm{H}^{\bullet} &\to \mathrm{R'} + \mathrm{HO}_2^{\bullet} \quad (\text{Kettenfortpflanzung}). \end{split}$$

Da der präferierte Reaktionspfad im Niedertemperaturbereich die interne H-Abspaltung ist [/14/, /15/, /74/], kann der oben genannte Mechanismus nicht vollständig die Zündung erklären, denn hier

erfolgen Kettenfortpflanzungsreaktionen nur über die externe H-Abspaltung.

Erfolgt die Anlagerung von O_2 an das nach der internen H-Abspaltung vorliegende Radikal $R'O_2H^{\bullet}$, resultiert daraus

$$R'O_2H^{\bullet} + O_2 \leftrightarrow O_2R'O_2H^{\bullet}$$
 (zweite O_2 -Anlagerung). (1.2)

Das nun vorliegende Radikal $O_2 R' O_2 H^{\bullet}$ kann wiederum einer internen oder externen H-Abspaltung unterliegen:

$$\begin{split} O_2 R'O_2 H^{\bullet} + RH &\rightarrow HO_2 R'O_2 H + R^{\bullet} \quad (externe \ H-Abspaltung) \\ HO_2 R'O_2 H &\rightarrow HO_2 R'O^{\bullet} + OH^{\bullet} \quad (Kettenverzweigung) \\ HO_2 R'O^{\bullet} &\rightarrow OR'O + OH^{\bullet} \quad (Kettenfortpflanzung) \\ O_2 R'O_2 H^{\bullet} &\rightarrow HO_2 R''O_2 H^{\bullet} \quad (interne \ H-Abspaltung) \\ HO_2 R''O_2 H^{\bullet} &\rightarrow HO_2 R''O + OH^{\bullet} \quad (Kettenfortpflanzung) \\ HO_2 R''O_2 H^{\bullet} &\rightarrow OR'O^{\bullet} + OH^{\bullet} \quad (Kettenverzweigung). \end{split}$$

Der obige Formalismus erlaubt es, experimentell festgestellte Phänomene, die ausschließlich im Niedertemperaturbereich auftreten, zu erklären. Dies sind der negative Temperaturkoeffizient der Zündverzugszeit und die Zweistufenzündung.



Abbildung 1.5: Typische Phänomene bei der Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen; p = 20 bar, $\lambda = 1$, iso-Oktan/n-Heptan-Luft-Gemisch

Im Anschluss sollen die typischen Niedertemperaturphänomene bei der Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen an einem exemplarischen Beispiel gezeigt werden. Dazu ist in Abbildung 1.5 (a) die Abhängigkeit der Zündverzugszeit einer iso-Oktan/n-Heptan-Luftmischung bei p = 20 bar und $\lambda = 1$ über die Temperatur dargestellt. Der 0D-Reaktorsimulation liegt dabei der in /1/ beschriebene Reaktionsmechanismus zu Grunde. Zur Berechnung des zeitlichen Verhalten der chemischen Reaktionskinetik unter den hier untersuchten Bedingungen kommt das Simulationswerkzeug Cantera zum Einsatz. Es zeigt sich klar der Temperaturbereich, in dem die Zündverzugszeit, entgegen dem üblichen Verlauf, mit steigender Temperatur zunimmt. Dieses Phänomen ist typisch für die Oxidation von Kohlenwasserstoffen [/28/, /74/]. Weiterhin ist in Abbildung 1.5 (b) der zeitliche Verlauf der Temperatur und ausgewählter Spezies für die Verbrennung einer iso-Oktan/n-Heptan-Luftmischung bei p = 20 bar und $\lambda = 1$ zu sehen. Hierin ist deutlich die zweistufige Zündung des zündfähigen Gemisches am Temperaturverlauf zu erkennen. Nach der ersten Zündverzugszeit bei t = 4,5 ms steigt die Temperatur auf T = 850 K an. Im weiteren Zeitverlauf ist nur ein leichter Temperaturanstieg erkennbar. In dieser Zeitperiode entsteht ein beträchtlicher Molanteil an Wasserstoffperoxid (H₂O₂), welches beim Erreichen einer bestimmten Temperatur schlagartig zu Hydroxyl-Radikalen (OH) zerfällt. Die OH-Radikale führen zu einem raschen Abbau der Kraftstoffmoleküle und damit zu der eigentlichen Energiefreisetzung. Bei t = 8,7 ms tritt die Selbstzündung auf, begleitet durch einen hohen Temperaturgradienten. Es existieren somit zwei Zündverzugszeiten.

Das Auftreten von negativen Temperaturkoeffizienten der Zündverzugszeit und der Zweistufenzündung ist eng mit dem Gleichgewicht von Gleichung (1.1) verbunden, welches wiederum stark temperatursensitiv ist.

Durch zunehmendes Downsizing werden immer höhere Verdichtungsendtemperaturen und -drücke erreicht, wobei mittels Ladeluftkühlung ein deutlich geringer Temperaturanstieg bei Einlassventil schließt vorliegt. An dieser Stelle sollen grundsätzliche Abhängigkeiten der Zündverzugszeit gegenüber Druck und Temperatur diskutiert werden. Zusätzlich wird der Restgasgehalt als weitere Einflussgröße einbezogen, denn Restgas aus dem vorherigen Arbeitsspiel liegt auf Grund imperfekter Spülung vor. Im folgenden soll eine Einflussanalayse dieser Größen durch 0D-Reaktorsimulationen bei $\lambda = 1$ und bei Variation der Starttemperatur sowie -druck vollzogen werden. Zur Anwendung kommt der oben genannte iso-Oktan/n-Heptan Mechanismus in Verbindung mit Cantera.



Abbildung 1.6: Verlauf der Zündverzugszeit bei Variation von Druck und Temperatur

Als erstes Ergebnis zeigt Abbildung 1.6 den Verlauf der Zündverzugszeit bei Variation von Druck und Temperatur bei isochorer Zustandsänderung, wobei für eine bessere Darstellung der dekadische Logarithmus auf die Zündverzugszeit τ_{Ind} angewendet wird. Es ist zu sehen, dass für einen Druck und ansteigender Temperatur die Induktionszeit tendenziell abnimmt, unterbrochen durch ein Temperaturintervall in dem sie wieder ansteigt, wofür der negative Temperaturkoeffizienten der Zündverzugszeit als Ursache angesehen werden kann. Für eine Temperatur und mit ansteigendem Druck lässt sich ein stetiger Abfall von τ_{Ind} erkennen. Der Grund dafür findet sich in der höheren Dichte, so dass die Wahrscheinlichkeit für Molekülwechselwirkungen erhöht ist. Die geringsten Zündverzugszeiten erscheinen bei hohem Druck und hoher Temperatur.

Die Abbildung 1.7 zeigt die Abhängigkeit der Zündverzugszeit vom Restgasanteil eines Kraftstoff-Luft-Gemisches bei $\lambda = 1$. Der initiale Druck für die Rechnungen wird auf p = 50 bar gesetzt. Das Restgas enthält die typischen Spezies wie Stickstoff, Sauerstoff, Kohlenstoffdioxid, Wasser, unverbrannte Kohlenwasserstoffe und Stickstoffmonoxid, dessen genaue Zusammensetzung in Tabelle 8.1 genannt wird. Es ist deutlich erkennbar, dass mit zunehmendem Restgasgehalt die Zündverzugszeit abnimmt, vor allem im Bereich niedriger Temperaturen fällt der Effekt besonders stark auf. Ab 900 K wird mit steigender Temperatur der Einfluss des Restgases auf τ_{Ind} immer kleiner. Da Vorentflammungen ein Niedertemperaturphänomen sind, kann das enthaltene Restgas einen entscheidenden Einfluss auf die Vorentflammungsbildung haben.



Abbildung 1.7: Verlauf der Zündverzugszeit bei Variation vom Abgasanteil

Aus den vorgestellten Ergebnissen können die grundsätzlichen Einflüsse von Druck, Temperatur und dem Restgasgehalt auf die Zündverzugszeit eines Kohlenwasserstoff-Luft-Gemisches klar aufgezeigt werden. Weiterführende Literatur zum Thema Zündprozess von Kohlenwasserstoffen finden sich in [/28/, /61/, /70/, /74/].

1.2.2 Bekannte Selbstzündungsphänomene im Ottomotor

In [/4/, /23/, /31/, /46/, /58/, /59/] werden bisher zwei unterschiedliche irreguläre Verbrennungsanomalien im Verbrennungsmotor nach dem ottomotorischen Arbeitsprozess beschrieben. Dabei wird zwischen Klopfen und Glühzündung unterschieden. Eine klopfende Verbrennung ist definiert als Selbstzündung des von der Flamme noch nicht erfassten Kraftstoff-Luft-Gemisches (*Endgas*) im Brennraum /59/, vgl. Abbildung 1.8. Als Folge der plötzlichen Energiefreisetzung kommt es zu einem Druck- und Temperaturanstieg sowie zur Ausbreitung von Druckwellen, s. Abbildung 1.9. Auf Grund der Druckwellenausbreitung und der damit einhergehenden Anregung der Bauteile äußert sich dieser irreguläre Verbrennungstyp durch ein klopfendes Geräusch, welches für den Namen dieser Verbrennungsanomalie verantwortlich ist.

Für die Entstehung der im Endgas ablaufenden Vorreaktionen, die sich dann weiter zum Klopfen entwickeln, gibt es eine Reihe von Hypothesen [/7/, /8/, /31/, /52/, /54/, /58/, /59/]. Nach der *Verdichtungstheorie* führt die Kolbenbewegung und die Ausbreitung der regulären Flammen zur Ver-



Abbildung 1.8: Schematische Darstellung von Motorklopfen

dichtung und zur Erwärmung des Endgases. Hierdurch wird das vor der Flammenfront befindliche Gas soweit thermodynamisch-chemisch aufbereitet, dass der Selbstzündungszustand an einigen Stellen erreicht werden kann. Die aus diesen Selbstzündungen resultierende Druckwelle führt zu einer sehr raschen Umsetzung des brennbaren Gemisches. Als weiteres kann Klopfen auch anhand der Detonationstheorie erklärt werden. Sie besagt, dass es zu einer Superposition einerseits von der regulären Flammenfront ausgehenden Druckwellen und andererseits der Reaktionszone kommt. Die resultierende Stoßwelle breitet sich anschließend mit Schallgeschwindigkeit aus. Für die Entwicklung solch einer Stoßwelle sind gewisse Anlaufstrecken notwendig, die i.d.R. nicht im Bereich üblicher ottomotorischer Abmessungen (Brennraumdurchmesser 70 mm bis 90 mm) liegen /11/. Als dritte Erklärung für Klopfphänomene findet sich in der Literatur eine Kombination aus den beiden oben genannten Theorien [/8/, /11/, /58/, /59/]. Hiernach kommt es an einigen Stellen im Endgas zu Selbstzündungen, wobei sich die ausbreitenden Flammenfronten auf bis zu Schallgeschwindigkeit beschleunigen können und so einen heftigen Energieumsatz hervorrufen. Hierbei findet auch die Überlagerung von Reaktionszone und Druckwelle zu einer Stoßwelle statt.

Ein weiteres in der Literatur beschriebenes irreguläres Verbrennungsphänomen ist die *Glühzündung* [/48/, /58/]. Hierbei wird die Selbstzündung des Kraftstoff-Luft-Gemisches in erster Linie durch heiße Bauteile hervorgerufen, wobei durch Wärmeübertragung lokal die kritische Selbstzündungstemperatur überschritten wird. Münziger et. al. /48/ haben gezeigt, dass vorrangig die Zündkerze als Zündquelle verantwortlich ist. Ursache für erhöhte Bauteiltemperaturen können vorhergegangene Klopfzyklen, unzureichende Kühlung oder Bauteilauslegung sowie fortlaufende Glühzündungen sein. Den Zylinderdruckverlauf mehrerer Glühzündungen zeigt Abbildung 1.10. Hier ist zu sehen, dass die Selbstzündung unabhängig von der Bestromung der Zündkerze ist, da die Glühzündung sowohl vor als auch nach dem Zündfunken auftritt. Ebenso ist zu erkennen, dass als Folge einer Glühzündung Klopferscheinungen auftreten, die zu einer weiteren Aufheizung des Brennraums führen. So kann es in Folge einer Glühzündung zu weiteren unerwünschten Selbstzündungsereignissen kommen, wobei der Brennbeginn immer weiter nach "früh" wandert, s. Abbildung 1.10. Der damit einhergehende Abfall des indizierten Mitteldrucks führt zum Absinken des thermodynamischen Wirkungsgrades.



Abbildung 1.9: Zylinderdruckverlauf von Zyklen mit klopfender Verbrennung; der Zündzeitpunkt liegt bei 10° KW n. ZOT

1.2.3 Charakterisierung von Vorentflammungen

Das Phänomen Vorentflammung ist erst seit wenigen Jahren bekannt und bisher Gegenstand weniger Forschungsvorhaben [/10/, /19/, /47/, /77/, /79/]. Typisch für eine Vorentflammung ist die Zündung des Kraftstoff-Luft-Gemisches vor der eigentlichen Zündungseinleitung mittels Zündkerze, die meistens in sehr hohen Zylinderdrücken münden und hochfrequente Schwingungen aufweisen, s. Abbildung 1.11. Hierbei können maximale Zylinderdrücke von über 200 bar auftreten, die zu starken Motorschäden führen und im normalen Motorbetrieb unbedingt zu vermeiden sind. Vorzugsweise treten Vorentflammungen im Bereich niedriger Drehzahlen und hoher Last auf, vgl. Abbildung 1.1, denn nur hier liegen die thermochemischen Bedingungen vor und ist genügend Zeit zur Verfügung, damit der kritische Selbstzündungszustand auftritt. Der kritische Zustand ist dann erreicht, wenn der Radikalpool ein durch die thermodynamischen Bedingungen bestimmtes Konzentrationsmaximum erreicht hat und es zu einem vorzeitigem Umsatz des Kraftstoff-Luft-Gemisches kommt.

Weiterhin ist aus Abbildung 1.11 zu entnehmen, dass ein Zyklus mit Vorentflammung i.d.R. nicht durch ein vorhergegangenes Arbeitsspiel angedeutet wird. Sie besitzen also keinen Selbstverstärkungseffekt, wie das bei einer Glühzündung zu beobachten ist. Zaccardi et al. /79/ führten eine Vielzahl von Messungen durch, die belegen, dass es keinen kausalen Zusammenhang zwischen einer VE und dem vorigen Zyklus oder dem auf eine VE folgenden Arbeitsspiel gibt. Vielmehr können VE als sporadisch auftretende Ereignisse angesehen werden, die als Einzelphänomen oder als Abfolge weniger Ereignisse auftreten.

Abbildung 1.11 zeigt klar, dass für den Fortgang und die Klopfstärke einer VE der Beginn der Selbstzündung entscheidend ist. Kommt es zu einer Verlagerung der Selbstzündung in Richtung "früh", treten die stärksten Klopfintensitäten auf. Wird der Brennbeginn noch weiter nach "früh" verlagert,



Abbildung 1.10: Zylinderdruckverlauf von Zyklen mit Glühzündung; der ZZP liegt bei 10°KW n. ZOT

nimmt die Klopfintensität wiederum ab. Dies lässt sich damit erklären, dass das Kraftstoff-Luft-Gemisch bei einer Selbstzündung lange vor dem oberen Totpunkt noch nicht soweit aufbereitet ist, dass in Folge der Flammenfrontausbreitung weitere Selbstzündungen im Endgas stattfinden können. Dazu liegt bei einer frühbeginnenden Selbstzündung im Zylinder ein größeren Volumen vor, so dass der Druckanstieg geringer ausfallen muss. Michels et al. /47/ geben an, dass die höchsten Klopfintensitäten auftreten, wenn der Brennbeginn bei 10°KW vor dem ZOT liegt.

Dahnz et al. /19/ haben eine Reihe optischer Untersuchungen durchgeführt, mit dem Ziel den bevorzugten Ort für den Beginn der Selbstzündung zu untersuchen. Hierbei konnte gezeigt werden, dass Vorentflammungen vorzugsweise in der Nähe der Zylinderkopfdichtung auftreten. Jedoch ergaben die Experimente keine präferierte Lage des Selbstzündungsort im Brennraum. Weiterhin konnte keine Korrelation von Selbstzündorten einer Vorentflammungsserie festgestellt werden.

Nachdem in diesem Abschnitt das Phänomen Vorentflammung nach seinen Eigenschaften hin untersucht wurde, sollen im nachfolgenden Abschnitt mögliche Entstehungshypothesen diskutiert werden.

1.2.4 Diskussion von Entstehungshypothesen

Bevor auf die einzelnen Entstehungshypothesen eingegangen wird, soll zunächst geklärt werden, warum Vorentflammungen vorrangig im Bereich hoher Lasten und niedriger Drehzahlen auftreten. Die Frage ist also, welchen Einfluss hat der Betriebspunkt auf eine Vorentflammung? Hierbei sind zwei Faktoren besonders entscheidend. Zum einen sind die thermodynamischen Bedingungen (Druck und Temperatur) auf Grund des in dieser Arbeit untersuchten hohen Lastpunktes von $M_D = 229$ Nm derart, dass hohe Kompressionsdrücke und -temperaturen erreicht werden. Somit verschiebt sich die Zündverzugszeit des Kraftstoff-Luft-Gemisches in Richtung früh, vgl. Abschnitt 1.2.1 und besonders Abbildung 1.6.



Abbildung 1.11: Zylinderdruckverlauf mehrerer aufeinanderfolgender Zyklen mit Vorentflammungen (rote Linien); der ZZP liegt bei 10°KW n. ZOT

Zum Anderen hat der Betriebspunkt direkten Einfluss auf die für chemische Reaktionen zur Verfügung stehende Zeit. In einem direkteinspritzenden Motor ergibt sich die Zeit, die chemischen Reaktionen verbleibt, aus der Zeitspanne vom Einspritzbeginn bis zum Zeitpunkt der Zündungseinleitung mittels Zündkerze. Der hier betrachtete Betriebspunkt ($M_D = 229$ Nm, $n = 1500 \, \text{l/min}$) begünstigt diese Zeitspanne auf zwei verschiedene Weisen:

- erstens steht den chemischen Prozessen auf Grund der niedrigen Drehzahlen mehr Zeit pro Arbeitsspiel zur Verfügung im Vergleich zu höheren Drehzahlen und
- zweitens begünstigt der nach spät verlagerte Zündzeitpunkt (ca. 15°KW n. ZOT) ebenfalls die zur Verfügung stehende Zeitspanne, wobei dies eine Maßnahme zur Vermeidung klopfender Verbrennung darstellt.

Hierbei führt der nach spät gesetzte Zündzeitpunkt zu dem weiteren Effekt, dass das chemische Gemisch den thermodynamischen Bedingungen (Druck und Temperatur) um den ZOT ausgesetzt ist. Dabei führen höhere Temperaturen bzw. Drücke i.d.R. zu niedrigeren Zündverzugszeiten, vgl. Abbildung 1.6. In anderen Lastpunkten wird aus Verbrauchsgründen der Zündzeitpunkt nach früh verstellt.

Im Abschnitt 1.2.1 konnte aufgezeigt werden, dass die Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen dann erfolgt, wenn der Radikalenpool ein kritisches Konzentrationsmaß überschreitet. Die Bedingungen, die den Aufbau des Radikalpools beeinflussen, sind:

- Zeit
- Druck
- Temperatur und
- Zusammensetzung der Mischung.

Somit existieren neben der Zeit noch weitere Einflussfaktoren auf die Selbstzündung. Alle Prozesse, die die eben genannten Faktoren in Richtung Vorentflammungsbegünstigung verschieben, werden als kritische Prozesse angesehen.

Umfangreiche Untersuchungen zu möglichen Erklärungsansätzen wurden durch Dahnz et al. durchgeführt /19/. Sie ordnen die Ursachen nach deren physikalischen Wirkungen in einer Baumstruktur, auf die im Folgendem eingegangen wird, s. Abbildung 1.12.



Abbildung 1.12: Strukturdiagramm der möglichen Ursachen für Vorentflammungen nach /19/

In der ersten Hierarchiestufe wird zwischen homogenen und inhomogenen Effekten unterschieden. Erstgenannte sind für den instationären Motorbetrieb vorrangig theoretischer Natur, denn homogene Bereiche sind im Brennraum auf Grund der turbulenten Natur der Strömung nicht zu erwarten. Jedoch gibt es auch im Brennraum Bereiche in denen die räumlichen Gradienten weniger stark ausgeprägt sind, weshalb die in diesen Bereichen stattfindenden Prozesse zu den homogenen Ursachen zu zählen sind.

Die inhomogenen Effekte können weiter nach der Anzahl der beteiligten Phasen unterschieden werden, wobei die linke Seite reine Gasphasenprozesse widerspiegelt. Wie oben genannt, sind maßgebende Einflussfaktoren für den Selbstzündprozess von Kohlenwasserstoffen die Temperatur und Gemischzusammensetzung. Eine unterschiedliche räumliche Verteilung der Brennraumtemperatur kann auf strömungsphysikalischen Prozessen, dem thermischen Einfluss des Restgases und der Wärmeübertragung an den Brennraumwänden beruhen. Unterschiede in der Gemischzusammensetzung können aus dem Luft-Kraftstoff-Verhältnis durch den Verdampfungsprozess der eingespritzten Kraftstoffmasse und dem chemischen Einfluss des Restgases resultieren.

Werden die Eigenschaften der Gasphase durch das Vorhandensein einer anderen Phase bzgl. der Vor-

entflammungsneigung beeinflusst, wird von Mehrphaseneffekten gesprochen, die in der rechten Baumstruktur von Abbildung 1.12 Berücksichtigung finden. Physikalisch-chemische Prozesse, die zwischen gasförmiger und fester Phase stattfinden, können z.B. Wärmeübertragung zwischen freischwebenden Partikeln und Gas oder ablaufende Oberflächenreaktionen an Ablagerungen sein. Flüssige Stoffe, die auf die Gasphase zurückwirken, können neben Kraftstoff in den Brennraum eingebrachtes Schmieröl darstellen. Eine weitere Untergliederung ergibt sich bei Aufschlüsselung des Entstehungsortes für die Ölfreisetzung.

Dahnz et al. führen den Einfluss von Schmieröl als nahezu einzige wahrscheinliche Ursache für Vorentflammungen auf [/19/, /20/]. Alle anderen möglichen Erklärungsansätze aus Abbildung 1.12 gelten demnach als unwahrscheinlich. Hierbei schränken die Autoren ihre Ergebnisse auf den verwendeten Versuchsträger ein, so dass sie die Wichtung der einzelnen Erklärungsansätze stark vom betrachteten Motor abhängen.

Willand et al. /77/ können weitere Einflussfaktoren auf die Vorentflammungsbildung identifizieren, wobei vorrangig experimentelle Methode und reaktionskinetische Untersuchungen zur Anwendung kommen. Es konnte gezeigt werden, dass der Einfluss des Ladungswechsels auf die Vorentflammung ebenso die Grenzen des Downsizings beeinflussen. Weitere vermutete aber nicht weiter untersuchte Ursachen sind heiße Bauteile, Ablagerungen und in den Brennraum eingebrachte Öltröpfchen.

Umfangreiche Untersuchungen zum Thema Vorentflammung und deren Beeinflussung durch motorische Parameter haben auch Hofmann et al. durchgeführt /33/. Hier konnte gezeigt werden, dass durch ungünstige Einlassventilsteuerzeiten Vorentflammungen begünstigt werden können, wobei eine Einlasssteuerzeit (ESZ) von 4°KW nach dem Ladungswechsel oberen Totpunkt (LWOT) besonders kritisch wirkt. Bei Früh- bzw. Spätverstellung der ESZ nimmt die Vorentflammungsneigung wieder ab. Zudem konnten Hofmann et al. die Zündkerze als präferierten Ort der Selbstzündung feststellen /33/. Weiterhin ist gezeigt worden, dass durch eine externe, gekühlte Abgasrückführung Vorentflammungen vermieden werden konnten und somit der indizierte Mitteldruck erhöht werden konnte.

Zahdeh et al. weisen anhand von Experimenten und 3D-CFD-Simulation nach, dass durch eine stärkere Ladungsschichtung die Vorentflammungsneigung zunimmt /80/. Weiterhin zeigen sie, dass durch vermehrten Kontakt des eingespritzten Kraftstoffs mit der Laufbuchse vermehrt Vorentflammungen auftreten. Sowohl die Vermeidung des Wandkontakts als auch die Homogenisierung des Kraftstoff-Luft-Gemisches kann durch Doppeleinspritzung verbessert werden.

In der vorliegenden Arbeit können weitere mögliche Ursachen aus Abbildung 1.12 mit einer hohen Eintrittswahrscheinlichkeit bzgl. Vorentflammungen detektiert werden. Dies stellt somit eine Erweiterung des Kenntnisstands in Bezug auf die Entstehungsmechanismen von Vorentflammungen dar, die zum Erschließen neuer Verbrauchspotentiale eminent sind. Die dafür nötigen Arbeitsschritte und wissenschaftlichen Erkenntnisse sind Gegenstand des nächsten Kapitels.

2 Ziel, Methodik und Aufbau der Arbeit

Ein Ziel der Arbeit ist es, die im Abschnitt 1.2.4 diskutierten Entstehungshypothesen, welche eine Vorentflammung hervorrufen können, mit Hilfe numerischer Methoden zu untersuchen. Somit können neue Erklärungsansätze für die Ursache von Vorentflammungen identifiziert und Gegenstrategien abgeleitet werden. Die Untersuchung von Vorentflammungen mittels experimenteller Methoden wird bereits in einigen wenigen Literaturstellen beschrieben [/19/,/33/, /47/, /77/, /79/, /80/]. Problematisch hierbei ist der hohe experimentelle Aufwand, der betrieben werden muss, um einen detaillierten Einblick in die komplexen Vorgänge zu erlangen, siehe Abschnitte 1.2.3 und 1.2.4. Zudem wird der hohe Einsatz an Material hinsichtlich von Vorentflammungsuntersuchung sehr kritisch vom Autor bewertet.

Ein weiteres Augenmerk der Arbeit ist die Erarbeitung von Gegenmaßnahmen, die sich aus der Identifizierung wahrscheinlicher Ursachen für Vorentflammungen ableiten lassen. Dadurch können neue Verbrauchseinsparpotentiale mit dem Downsizing-Ansatz erschlossen werden. Aus den Ergebnissen der numerischen Simulation können direkt Gegenmaßnahmen abgeleitet werden, wobei versucht wird, den Motor als komplexes System zu betrachten.

Eine Möglichkeit, die Nachteile experimenteller Methoden, wie z.B. optische Zugänglichkeit oder Materialeinsatz, zu umgehen, bieten rechnergestützte, numerische Methoden. Hierbei bietet vor allem das Werkzeug der 3D-CFD-Simulation beste Voraussetzungen, um einen detaillierten Einblick in die innermotorischen Prozesse zu erlangen. Auf Grund der Komplexität der Einflussfaktoren auf die Vorentflammung muss ein ganzheitliches Modell erstellt werden, das die ablaufenden Prozesse möglichst genau wiedergibt.

In dieser Arbeit werden alle CFD-Simulationen mit dem Programmpaket OpenFOAM durchgeführt. OpenFOAM ist ein quellcodeoffenes Programm zum Lösen von Feldproblemen im Bereich der Kontinuumsmechanik. Die Basis bilden dabei die in C++ geschriebenen Bibliotheken, in denen die Funktionalitäten gesammelt sind. Mittels eigenen oder vorgefertigten Anwendungen kann auf die Funktionen der Bibliotheken zurückgegriffen werden, um damit strömungsmechanische und thermodynamische Probleme lösen zu können. Sowohl für das Pre- als auch für das Post-Processing der Aufgabenstellungen bietet OpenFOAM eine Reihe von Möglichkeiten. Weitere Informationen zu OpenFOAM sind in /50/ und /51/ aufgeführt.

Zur Beschreibung der turbulenten Strömung im Brennraum bilden die Navier-Stokes-Gleichungen, die Massenbilanz und die Energiebilanz das mathematische Grundgerüst. In dieser Arbeit wird die statistische Behandlung der turbulenten Strömung mittels Reynolds-Zerlegung und anschließender zeitlicher Mittelung verfolgt. Im Kapitel 3 erfolgt die Darstellung der Grundgleichungen, sowie deren Anwendung auf turbulente Strömungen.

Die Berücksichtigung der direkten Kraftstoffeinspritzung erfolgt über ein gesondertes Spraymodell, was im Kapitel 4 beschrieben wird. Dies bildet die Grundlage zur Berechnung der zusätzlichen Quellterme in den Bilanzgleichungen.

Da das Phänomen der Vorentflammung stark abhängig von chemischen Prozessen ist, steht deren Beschreibung im Vordergrund der Arbeit. Hierfür kommt ein Mechanismus für die Verbrennung von iso-Oktan/n-Heptan in Luft zum Einsatz, der auf den Niedertemperaturbereich optimiert wird. Diese Optimierung kann mit Hilfe von 0D-Reaktorsimulationen erreicht werden /18/. Die Interaktion von chemischer Reaktionskinetik und turbulenter Strömung ist ein zentraler Punkt in dieser Arbeit. Hierfür kommt ein Interaktionsmodell zur Anwendung, was an der Chalmers University of Technology in Göteborg entwickelt und in OpenFOAM implementiert wurde. Die direkte Kopplung von chemischer Kinetik und hochauflösender CFD-Simulation im Zusammenhang der Vorentflammungsuntersuchung stellt ein Werkzeug dar, um neue wissenschaftliche Erkenntnisse hinsichtlich der Vermeidung von Vorentflammungen zu erzielen. Diese Herangehensweise wird in der vorliegenden Literatur noch nicht erwähnt und stellt somit ein Novum zur Beschreibung von Vorentflammungsphänomenen dar. Das Modell zur Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion ist Gegenstand des Kapitels 5.

Im Kapitel 6 wird die Strategie zur Gittererstellung erläutert. Hierfür wird ein blockstrukturierter Ansatz verfolgt, der die Geometrie in eine endliche Anzahl von Blöcken unterteilt. Zudem erfolgt eine Übersicht zu den Anfangs- und Randbedingungen der numerischen Simulation.

Jedes numerische Modell muss auf seine Genauigkeit hin validiert werden. Auf Grund der schwierigen experimentellen optischen Zugänglichkeit eines Motors wird in dieser Arbeit die Strategie verfolgt, nach der die Einzelmodelle für sich validiert werden. Hierbei wird angenommen, dass sich die Güte des Gesamtmodells aus der Güter der Einzelmodelle ergibt. Von den Ergebnissen der Validierung berichtet Kapitel 7.

Nach dem das Gesamtmodell an einfachen Testfällen validiert wird, beschreibt Kapitel 8 den Einfluss ausgewählter Parameter auf die Vorentflammung. Die Parameterauswahl stützt sich dabei auf die umfangreiche Literaturrecherche, die Sensitivitätsuntersuchungen mit 0D-Reaktorsimulationen sowie experimentelle Untersuchungen beim Projektpartner, der Volkswagen AG.

Den Abschluss der Arbeit bildet eine Zusammenfassung im Kapitel 9, wo die Kernaussagen dieser Arbeit resümiert werden. Des Weiteren erfolgen Vorschläge für zukünftige Aufgabenstellungen, die sich aus der vorliegenden Arbeit ergeben.

Aus den bis hierin sowie im Kapitel 1 diskutierten Inhalten lassen sich die Schwerpunkte, die in dieser Arbeit erarbeitet werden, ableiten und wie folgt zusammenfassen:

- Klärung grundsätzlicher Abhängigkeiten der Zündverzugszeit von thermodynamischen Größen wie Druck, Temperatur und Zusammensetzung,
- Erarbeitung eines ganzheitlichen Modells zur Beschreibung innermotorischer Prozesse,
- Verwendung eines Kopplungsmodells zur Berücksichtigung der Chemie-Turbulenz-Interaktion,
- Entwicklung einer Blockstruktur für die Erstellung eines numerischen Gitters auf Basis einer realen, ottomotorischen Zylindergeometrie,
- Validierung und Verifikation des Gesamtmodells f
 ür den ottomotorischen Arbeitsprozess,
- systematische Parametervariation zur Identifikation ursächlicher Zusammenhänge ausgewählter Parameter bzgl. Vorentflammung sowie
- Entwicklung von Gegenmaßnahmen, um neue Verbrauchseinsparpotentiale mit dem Downsizing erschließen zu können.

Durch die Anwendung des Chemie-Turbulenz-Interaktionsmodells für die direkte Kopplung detaillierter Reaktionskinetik und turbulenter Strömung im Bereich der Vorentflammung, können weitere wahrscheinliche Ursachen identifiziert sowie neue wissenschaftliche Erkenntnisse erschlossen werden, deren praktische Umsetzung das Potential des Downsizings steigern können.

3 Simulation der Zylinderinnenströmung

Im nachfolgenden Kapitel werden die thermodynamischen und strömungsmechanischen Grundlagen zur Beschreibung turbulenter Strömungen inkompressibler Fluide gelegt. Dafür sollen im Abschnitt 3.1 zunächst die Erhaltungsgleichungen aufgezeigt werden, die die Bewegung von Fluiden sowie deren thermodynamischen Zustand beschreiben. Des Weiteren erfolgt eine kurze Einführung in numerische Methoden der Strömungsmechanik, wobei sich hier auf das Finite Volumen Verfahren beschränkt wird, s. Abschnitt 3.2. Den Abschluss des Kapitels bildet Abschnitt 3.3, in dem auf das Thema der Turbulenz und deren Modellierung eingegangen wird.

Ausführliche Literatur zur Herleitung der Bilanzgleichungen finden sich in den Standardwerken [/30/, /60/, /65/]. Weiterführende Informationen zum Themengebiet "Numerik" lassen sich in [/3/, /24/, /72/] nachlesen.

3.1 Bilanzgleichungen zur Beschreibung reaktiver Strömungen

Die Grundgleichungen der Strömungsmechanik und Thermodynamik sind die mathematische Formulierung der physikalischen Erhaltungssätze, angewendet auf ein geschlossenes System:

- die Masse eines geschlossenen Systems bleibt erhalten,
- die Änderung des Impulses eines Systems ist gleich der Summe der Kräfte, die auf das System wirken,
- die Änderung des Energieinhaltes eines Systems ist gleich der übertragenden Wärmemenge und der am System verrichteten Arbeit.

In der Beschreibung solcher Systeme bzw. Fluide wird von der Annahme eines Kontinuums ausgegangen /30/, so dass die molekulare Struktur oder die Molekülbewegung keine Beachtung beim Aufstellen der Gleichungen findet. Eine weitere Besonderheit ergibt sich aus dem Umstand, dass in dieser Arbeit reaktive Strömungen behandelt werden, die sich von nichtreaktiven Strömungen durch folgende Aspekte abgrenzen:

- Repräsentation des Fluids in reaktiven nicht-isothermen Strömungen durch multiple Spezies, die durch ihren Massenbruch Y_k dargestellt werden,
- Spezies in reaktiven Strömungen unterliegen chemischen Reaktionen, die mit modelliert werden müssen,
- da das Gas eine Mischung aus Einzelspezies ist, muss bei der Berechnungen der thermodynamischen Daten, wie z.B. der Wärmekapazität (ändern sich stark mit der Zusammensetzung) und den Transporteigenschaften (z.B. Viskosität), diesem Umstand Rechnung getragen werden /60/.

Die Eigenschaften reaktiver Strömungen werden durch makroskopische Eigenschaften beschrieben, die hier noch einmal zusammengefasst sind:

- die Dichte $\rho = \frac{m}{V}$,
- dem Geschwindigkeitsvektor \vec{u} ,
- dem Druck p,
- der Temperatur T und
- dem Massenbruch Y_{α} der Spezies α .

In den nachfolgenden Unterabschnitten 3.1.1 - 3.1.5 werden die einzelnen Grundgleichungen angegeben, wobei auf eine ausführliche Herleitung verzichtet wird. Die folgende Zusammenfassung stützt sich hauptsächlich auf die Werke von Ferziger et al. und Poinsont et. al. [/24/, /60/]. Zusätzliche Informationen finden sich außerdem in den Standardbüchern [/3/, /6/, /30/, /72/].

3.1.1 Gesamtmassenbilanz

Die Massenbilanz sagt aus, dass die zeitliche Änderung der Masse eines im Raum fixierten Kontrollvolumens (KV) gleich der Summe aus ein- und ausströmenden Massenströmen über die Grenzen des KV und der Masse, die im System produziert wird oder verschwindet, ist. Dies führt zur integralen Form der Massenbilanz

$$\int_{V} \frac{\partial \rho}{\partial t} \,\mathrm{d}V + \int_{A} \rho \,\vec{u} \,\mathrm{d}\vec{A} = \int_{V} \dot{\rho} \,\mathrm{d}V.$$
(3.1)

Unter Anwendung des gaußschen Integralsatzes und Einsetzen der Massenquelle für die Berücksichtigung der Einspritzung ($\dot{\rho}^{S}$), kann Gleichung (3.1) umgeschrieben werden zu

$$\int_{V} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \rho \vec{u} \right] \, \mathrm{d}V = \int_{V} \dot{\rho^{S}} \, \mathrm{d}V.$$
(3.2)

Wird der Grenzprozess $V \rightarrow 0$ für verschwindend kleine Volumina vollzogen und auf Gleichung (3.2) angewendet, resultiert daraus die differentielle Form der Massenbilanz unter Anwendung der Einstein'schen Summenkonvention

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = \dot{\rho}^S. \tag{3.3}$$

3.1.2 Speziesmassenbilanz

Neben der Gesamtmasse muss in reaktiven nicht-isothermen Strömungen die Zusammensetzung des Gases berücksichtigt werden. Hierzu wird der Massenanteil m_{α} jeder Spezies an der Gesamtmasse m in einem gegeben Volumen durch den Massenbruch Y_{α} definiert

$$Y_{\alpha} = \frac{m_{\alpha}}{m} \quad \text{mit} \quad \alpha = 1, \dots, N.$$
(3.4)

Die Massenbilanz für die Spezies α lautet in integraler Form

$$\int_{V} \frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_{\alpha}) \, \mathrm{d}V + \int_{A} (\rho (\vec{u} + \vec{V}_{\alpha}) Y_{\alpha}) \, \mathrm{d}A = \int_{V} \dot{\Omega}_{\alpha}^{C} \, \mathrm{d}V + \int_{V} \dot{\Omega}_{\alpha}^{S} \, \mathrm{d}V \quad \alpha \in [1, N].$$
(3.5)

Der erste Term auf der linken Seite gibt die zeitliche Änderung der Speziesmasse im KV an. Da im Gegensatz zur Gesamtmasse die Masse der Spezies α durch chemische Reaktionen vernichtet oder

produziert werden kann, muss auf der rechten Seite von Gleichung (3.5) der Quellterm $\dot{\Omega}_{\alpha}^{C}$ hinzugefügt werden. Der weitere Term auf der rechten Seite $\dot{\Omega}_{\alpha}^{S}$ berücksichtigt die Massenquelle auf Grund der Kraftstoffeinspritzung.

Die lokale Strömungsgeschwindigkeit von Spezies α in Gleichung (3.5) ist die Superposition aus der mittleren Strömungsgeschwindigkeit \vec{u} und der Diffusionsgeschwindigkeit \vec{V}_{α} , wobei die Diffusionsgeschwindigkeit vom Druck, der Temperatur und dem Gradienten der Konzentration abhängt. Im Allgemeinen wird in Verbrennungssimulationen nur die Abhängigkeit vom Konzentrationsgradienten betrachtet /74/, was unter Beachtung des Fick'schen Gesetzes sowie unter Anwendung des gaußschen Theorems auf die differentielle Form der Speziesmassenbilanz führt

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_{\alpha}) + \frac{\partial \rho u_i Y_{\alpha}}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i} \right) + \dot{\Omega}^C_{\alpha} + \dot{\Omega}^S_{\alpha}.$$
(3.6)

Hierin ist D_{α} der Diffusionskoeffizient der Spezies α .

3.1.3 Impulsbilanz

Die Impulsbilanz entspricht dem zweiten newtonschen Axiom, wonach die zeitliche Änderung des Impulses eines Fluidpartikels gleich der Summe der Kräfte ist, die auf das Fluid einwirken. Dies kann durch Gleichung (3.7) verdeutlicht werden.

$$\int_{V} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \, \vec{u}) \, \mathrm{d}V + \int_{A} (\rho \, \vec{u} \, \vec{u}) \, \mathrm{d}\vec{A} = \sum \vec{F}$$
(3.7)

Hierin bedeuten die Terme auf der linken Seite die zeitliche Änderung des Impulses im KV bzw. die lokalen konvektiven Impulsströme, die über die Ränder des KV übertragen werden. Auf der rechten Seite von Gleichung (3.7) stehen die Kräfte, die an das KV angreifen. Sie sind die Summe aus Oberflächen- bzw. Volumenkräften. Die Oberflächenkräfte setzen sich aus viskosen Kräften und Druckkräften zusammen, was für newtonsche Fluide auf folgende Gleichung führt:

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} = -p\delta_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k}\delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right).$$
(3.8)

Hierbei ist σ_{ij} der Spannungstensor, der sich aus dem viskosen Spannungstensor τ_{ij} und dem Drucktensor p bildet. Weiterhin stellt μ in Gleichung (3.8) die dynamische Viskosität des Fluids dar.

Unter Anwendung des gaußschen Integralsatzes folgt aus Gleichung (3.7) und unter Zuhilfenahme von (3.8)

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_i}\rho u_i u_j = \frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} + \rho F_j^S.$$
(3.9)

Dabei bedeutet ρF_j^S den Impulsquellterm, der die Sprayprozesse berücksichtigt.

Gleichung (3.9) ist sowohl für reaktive als auch nichtreaktive Strömungen gleichbedeutend, denn es tritt kein expliziter Reaktionsterm auf. Dennoch wird die Impulsbilanz durch chemische Reaktionen dadurch beeinflusst, dass sowohl die dynamische Viskosität als auch die Dichte stark von der Temperatur abhängen. Der Einfluss auf die Dynamik der Prozesse ist also implizit enthalten.

3.1.4 Energiebilanz

Die Energiebilanz stellt die Erhaltungsgleichung für die Energie dar, die sich aus der Bilanzierung der Energieströme über die Systemgrenzen und die Änderung der Energie im Inneren des Systems ergibt. Besondere Beachtung findet die Energiebilanz deshalb, weil verschiedene Formulierungsarten in der Literatur aufgeführt werden. In dieser Arbeit wird die Energiebilanz mit Hilfe der spezifischen Enthalpie h formuliert und verwendet

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h) = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial}{\partial x_i}\left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}\right) + \tau_{ij}\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\dot{Q}^S + \dot{Q}^C}{2}.$$
(3.10)

Die über die Systemgrenzen bilanzierten Energieströme ergeben sich aus:

- der zeitlichen Änderung des Energieinhaltes $\frac{\partial}{\partial t}(\rho h)$,
- dem durch Konvektion transportierten Enthalpiestrom $\frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i h)$,
- der Arbeit $\frac{Dp}{Dt}$, wobei der Term die substantielle Ableitung des Drucks nach der Zeit darstellt
- dem Wärmestrom infolge eines Temperaturgradienten $\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right)$,
- den Quelltermen \dot{Q}^S und \dot{Q}^C , die Sprayprozesse bzw. Energieumwandlung durch Verbrennung berücksichtigen und
- der Arbeit, hervorgerufen durch viskose Vorgänge $\tau_{ij}(\nabla \cdot \vec{u})$.

Bei niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten wird der viskose Anteil in Gleichung (3.10) vernachlässigt /25/.

3.1.5 Zustandsgleichungen

Zusätzlich zu den oben angeführten Bilanzgleichungen werden weitere Gleichungen benötigt, um das Gleichungssystem zu schließen. So wird z.B. eine Gleichung benötigt, um eine Beziehung für die Temperatur, den Druck und die Dichte zu besitzen.

Abbildung 3.1 zeigt den Realgasfaktor für Luft in Abhängigkeit von Druck und Temperatur. Die Zahlenwerte stammen aus dem VDI-Wärmeatlas /71/. Je stärker der Realgasfaktor von eins abweicht, um so stärker weicht das Verhalten des realen Gases vom idealen Gas ab. Für den in dieser Arbeit interessanten Druckbereich von 1 bar $\leq p \leq 50$ bar sowie das untersuchte Temperaturintervall von 25 °C $\leq \vartheta \leq 400$ °C zeigt die Abbildung 3.1 eine Abweichung von $\pm 2\%$. Dieser Fehler wird als akzeptabel angesehen, insbesondere bei Berücksichtigung für den Aufwand einen Realgasansatz zu implimentieren.

Unter der Annahme des idealen Gases für alle Spezies wird zur Verknüpfung von Temperatur, Druck und Dichte die themische Zustandsgleichung für ideale Gase verwendet

$$p = \rho R T. \tag{3.11}$$

Die kalorische Zustandsgleichung verbindet die spezifische Enthalpie mit der spezifischen Wärmekapazität und der Temperatur

$$\mathrm{d}h = c_p(T)\,\mathrm{d}T,\tag{3.12}$$


Abbildung 3.1: Realgasfaktor von Luft in Abhängigkeit von Druck und Temperatur

wobei c_p eine Funktion der Temperatur ist und hier anhand des JANAF-Polynomansatzes berechnet wird /51/.

Da in dieser Arbeit multiple Spezies betrachtet werden, ergibt sich die spezifische Wärmekapazität unter zu Hilfenahme des massegewichteten Ansatzes zu

$$c_p = \sum_{i=1}^{N} c_{p,\alpha} Y_{\alpha}.$$
(3.13)

Als weitere Stoffgröße wird die dynamische Viskosität μ mittels Sutherland-Formel bestimmt /51/

$$\mu = \frac{A_1 T^{3/2}}{T + A_2}.\tag{3.14}$$

Hierin sind A_1 und A_2 stoffspezifische Kenngrößen. Aus der dynamischen Viskosität ergeben sich dann weiterhin der Diffusionskoeffizient und die Wärmeleitfähigkeit nach

$$D_{\alpha} = \frac{\mu}{\rho \text{Sc}} \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{\mu c_p}{\rho \text{Pr}}.$$
 (3.15)

In Gleichung (3.15) sind Sc und Pr die Schmidt- bzw. die Prandtl-Zahl.

3.2 Numerische Strömungsmechanik

Im Abschnitt 3.1 wird ein Gleichungssystem beschrieben, dass zur Beschreibung von Strömungen reaktiver, inkompressibler Fluide geeignet ist und aus $\alpha + 5$ partiellen, nicht linearen Differentialgleichungen besteht. Gerade dieser mathematische Charakter der Grundgleichungen macht es notwendig, dass numerische Methoden zur Lösung des Problems herangezogen werden, denn es gibt nur für einfache Problemstellungen analytische Lösungen der Grundgleichungen.

Im Bereich der numerischen Strömungssimulation hat sich vor allem die Finite-Volumen-Methode (FVM) durchgesetzt. Bei diesem Ansatz wird das Lösungsgebiet durch eine endliche Anzahl von Volumenzellen diskretisiert, wobei die Kanten der Zellen die Ränder der physikalischen Domain abbilden und die physikalischen Zustandsgrößen in den Zellmittelpunkten vorliegen. Die Erhaltungsgleichungen aus Abschnitt 3.1 gelten sowohl für die einzelnen Kontrollvolumen als auch für die gesamte Domain. Als Ausgangspunkt für die weitere Betrachtung sei die Integralform einer generischen Erhaltungsgleichung für die allgemeine Größe ϕ gegeben

$$\int_{V} \frac{\partial \rho \phi}{\partial t} dV + \int_{A} \rho \phi \vec{u} \cdot \vec{n} dA = \int_{A} \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dA + \int_{V} q_{\phi} dV. \quad (3.16)$$

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{Zeitliche}}_{\text{Änderung}} \underbrace{\sum_{i=1}^{A} \rho \phi \vec{u} \cdot \vec{n} dA}_{\text{Aderung}} = \underbrace{\sum_{i=1}^{A} \Gamma \nabla \phi \cdot \vec{n} dA}_{\text{diffusiver Fluss}} \underbrace{\sum_{i=1}^{V} q_{\phi} dV}_{\text{Quellterm}}.$$

Durch die räumliche und zeitliche Diskretisierung der Oberflächen- und Volumenintegrale in Gleichung (3.16) entsteht aus einer partiellen, nichtlinearen Differentialgleichung eine algebraische Gleichung, die dann mittels iterativem Verfahren gelöst werden kann. Die nachfolgenden Abschnitte sollen eine kurze Einführung in die Grundlagen der räumlichen und zeitlichen Diskretisierung ausgehend vom FVM-Ansatz geben.

3.2.1 Räumliche Diskretisierung

Zur Lösung der generischen Erhaltungsgleichung (3.16) ist zuerst eine räumliche Diskretisierung des Rechengebiets durch eine endliche Anzahl an Kontrollvolumen notwendig. Mit diesem Ansatz können die Volumenintegrale als Produkt aus Zellmittelwert einer Variable multipliziert mit dem Volumen der Zelle approximiert werden, wobei die Zellmittelwerte unmittelbar zur Verfügung stehen. Zusätzlich zu den Volumen- treten auch Flächenintegrale in Gleichung (3.16) auf. Hierbei ist zu beachten, dass der Wert der Variable ϕ nicht auf den Kantenflächen des KV vorliegt, weshalb der Wert durch Interpolation der Zellmittelwerte benachbarter Zellen bestimmt werden muss. Hierfür kommen Verfahren unterschiedlicher Ordnung zur Anwendung. Der Nettofluss über die Oberfläche des Kontrollvolumens ist gleich der Summe der Flüsse über die einzelnen Begrenzungsflächen.

Je nach Anwendungsfall existieren verschiedene Diskretisierungsansätze, die alle ihre Vor- und Nachteile besitzen. Für einfache Geometrien können strukturierte Gitter verwendet werden, wobei die einzelnen KV Hexaeder-Form aufweisen. Eine Erweiterung der strukturierten Gitter stellen blockstrukturierte Rechennetze dar. Hierbei wird die Rechendomain in mehrere zusammenhängende Blöcke unterteilt. In jedem dieser Blöcke liegt ein strukturiertes Netz vor. Ein großer Vorteil dieser Methode ist, dass auch komplexe Geometrien diskretisiert werden können. Nachteilig wirkt sich der größere Aufwand für die Gittergenerierung aus.

Die größte Flexibilität in der Gittererstellung bieten unstrukturierte Netze, wobei jedes Element nach der blockstrukturierten Sichtweise als Einzelblock gedacht werden kann. Die Elemente eines solchen Gitters besitzen meist Tetraeder-Form, wobei der wandnahe Bereich durch eine oder mehrere Prismenschichten diskretisiert wird. Ein großer Vorteil unstrukturierter Netze ist die Möglichkeit der Automatisierung der Vernetzung. Der Nachteil dieser Methode liegt in der deutlich größeren Anzahl an Volumenelementen, was sich direkt auf die Rechenzeiten auswirkt.

3.2.2 Zeitliche Diskretisierung

Nachdem nun mit Hilfe der räumlichen Diskretisierung die Volumen- und Flächenintegrale approximiert werden, verbleibt in der generischen Integralgleichung (3.16) der erste Term auf der linken Seite als einziges unbekanntes Integral. Zur Annäherung des Integrals kommen zwei unterschiedliche Methoden zum Einsatz. Zum einen gibt es *explizite* Verfahren, wobei der Wert im nächsten Zeitschritt nur durch bekannte Werte aus dem aktuellen Zeitschritt angenähert wird. Und zum anderen existieren *implizite* Verfahren, die sowohl Informationen aus dem aktuellen und dem neuen Zeitschritt benötigen, um den Wert für den neuen Zeitschritt zu berechnen.

Der Vorteil expliziter Verfahren ist, dass sie auf den Werten des aktuellen Zeitschritts beruhen, einfach und effizient sind. Nachteilig wirkt sich das numerische Stabilitätsverhalten expliziter Verfahren aus, denn nur bei genügend kleinen Zeitschritten ist das erhaltene Gleichungssystem stabil. Im Gegensatz dazu sind implizite Verfahren uneingeschränkt stabil. Zur Wahrung der Genauigkeit sollten die Zeitschritte trotzdem nicht zu groß gewählt werden. Über das Courant-Friedrichs-Levy-Prinzip

$$Co = \frac{u\Delta t}{\Delta x} \tag{3.17}$$

kann die Zeitschrittweite adaptiv angepasst werden. Aus Stabilitätsgründen sollte die Courant-Zahl Co kleiner 1 sein [/3/, /24/]. Ein Nachteil der impliziten Methode ist, dass zur Berechnung der zukünftigen Werte das Lösen eines aufwendigen Gleichungssystems notwendig ist.

3.3 Turbulente Strömungen und Turbulenzmodellierung

Anhand des Ordnungszustandes einer Strömung werden grundsätzlich zwei Formen unterschieden, laminare und turbulente Strömungen. Eine laminare Strömung zeichnet sich durch ihre geschichtete Struktur aus, weshalb bei dieser Strömungsform Schichten unterschiedlicher Geschwindigkeit nebeneinander strömen, ohne einen merklichen Querimpuls aufzuweisen. Laminare Strömungen werden durch viskose Diffusion von Impuls dominiert. Überwiegen in Strömungen die Trägheitseinflüsse, liegt eine turbulente Strömung vor. Diese zeichnet sich durch eine chaotische, unregelmäßige und instationäre Bewegung von Fluidballen aus. Das Verhältnis aus Trägheits- und Zähigkeitskräften wird zu Ehren Osborne Reynolds als Reynolds-Zahl bezeichnet

$$\operatorname{Re} = \frac{u\,L}{\nu}.\tag{3.18}$$

In Gleichung (3.18) ist L eine charakteristische Länge, ν die kinematische Viskosität des Fluids und u die Strömungsgeschwindigkeit der Hauptströmung. Für niedrigviskose Fluide, wie Luft oder Wasser, genügen schon geringe Strömungsgeschwindigkeit, um hohe Re-Zahlen zu erreichen, so dass sich ein turbulenter Strömungszustand einstellt. Das Verständnis der Turbulenz ist also von großer Bedeutung bei der Betrachtung von technischen Prozessen.

Turbulente Strömungen weisen ein kontinuierliches Spektrum an unterschiedlichen Längen-, Zeitund Geschwindigkeitsskalen auf, das auf die Bildung von Wirbel unterschiedlicher Skalen zurückzuführen ist. Die großen Wirbel einer turbulenten Strömung erlangen ihre Energie aus der Hauptströmung und geben sie über einen Kaskadenprozess an kleinere Wirbel weiter. In den kleinsten Größenskalen dissipiert die Energie durch viskose Prozesse in innere Energie. Der Energietransfer von den großen zu den kleinsten Skalen wird als Energiekaskade bezeichnet. Sie ist charakteristisch für alle turbulenten Prozesse /76/.



Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Energiespektrums

Die Energieverteilung einer turbulenten Strömung über den Größenbereich der Wirbel kann anhand des Energiespektrums veranschaulicht werden (Abbildung 3.2). Hierin ist $E(\kappa)$ die spektrale Energiedichte und κ die Wellenzahl. Mittels Integration der Energiedichte über die Wellenzahl

$$k = \int_{0}^{\infty} E(\kappa) \mathrm{d}\kappa \tag{3.19}$$

kann die kinetische Energie der turbulenten Strömung berechnet werden. Im Bereich kleiner Wellenzahlen entstehen aus Instabilitäten in der Strömung große Wirbel, die einen Großteil der kinetischen Energie der Strömung beinhalten. Durch diese Wirbel werden die Gradienten der Geschwindigkeit, der Temperatur und Spezies derart erhöht, dass sich die molekularen Transportprozesse von Impuls, Energie und Massendiffusion erhöhen. Ein charakteristisches Längenmaß für diesen Wellenzahlbereich ist die Wellenzahl κ_L , die sich aus dem integralen Längenmaß l_t bestimmen lässt.

In Abbildung 3.2 ist ein Wellenzahlbereich zu sehen, in dem die spektrale Energiedichte $E(\kappa)$ proportional $\kappa^{-5/3}$ ist. Dieser Bereich wird Trägheitsbereich genannt. Er folgt direkt aus der Kolmogorov'schen universellen Gleichgewichtstheorie, nach der es einen Bereich der Wirbelgröße zwischen der größten und kleinsten Wirbelgröße gibt, für welchen der Kaskadenprozess unabhängig von der Statistik der energiereichen Wirbel und dem direkten Einfluss der molekularen Viskosität ist /76/.

Der dritte Wellenzahlbereich ist der viskose Bereich mit der entsprechenden Wellenzahl κ_{η} , in dem die Energie durch dissipative Prozesse in innere Energie umgewandelt wird. Die hierfür charakteristischen Skalen gehen auf Kolmogorov zurück und sind wie folgt definiert

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{1/4} \quad \tau = \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/2} \quad \upsilon = (\nu \epsilon)^{1/4}.$$
(3.20)

Darin ist η die Längen-, τ die Zeit- und v die Geschwindigkeitsskala der kleinsten turbulenten Wirbel.

3.3.1 Favre-gemittelte Bilanzgleichungen

Die Zustandsgrößen einer turbulenten Strömung weisen chaotische Fluktuationen auf, die zudem noch eine Funktion von Raum und Zeit sind. Zur Beschreibung solcher Strömungen werden statistische Ansätze herangezogen, die auf eine Reynolds-Zerlegung zurückgehen /64/. Für viele ingenieurtechnische Aufgabenstellungen ist dies eine hinreichend genaue Betrachtungsweise, denn statistische Aussagen genügen zumeist den Anforderungen. Zudem wäre die rechentechnische Auflösung aller Längen- und Zeitskalen durch die Diskretisierung sehr aufwändig.

Der Momentanwert $\phi(\vec{x}, t)$ wird in einen Mittelwert $\overline{\phi}(\vec{x}, t)$ und einen Schwankungswert $\phi'(\vec{x}, t)$ zerlegt

$$\phi(\vec{x},t) = \overline{\phi}(\vec{x},t) + \phi'(\vec{x},t) \quad \text{mit} \quad \overline{\phi'} = 0.$$
(3.21)

Die Definition des Ensemblemittels ist

$$\overline{\phi}(\vec{x},t) = \lim_{i \to \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \phi_i(\vec{x},t).$$
(3.22)

Für eine im Mittel stationäre Strömung sind Ensemblemittelwert und zeitlicher Mittelwert gleichbedeutend. Das zeitliche Mittel ist als

$$\overline{\phi}(\vec{x},t) = \frac{1}{T} \int_{0}^{T} \phi(\vec{x},t) \mathrm{d}t$$
(3.23)

definiert.

In dichteabhängigen Strömungen wird anstatt der Reynolds- die Favre-Zerlegung bevorzugt, denn dadurch können Korrelationen mit Dichtefluktuationen vermieden werden. Das Favre-Mittel einer unabhängigen Größe ist

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho}\,\overline{\phi}}{\overline{\rho}}.\tag{3.24}$$

Die entsprechende Favre-Zerlegung ergibt sich dann zu

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad \text{mit} \quad \widetilde{\phi''} = 0. \tag{3.25}$$

Die Anwendung der Reynolds-Zerlegung auf ein instationäres Geschwindigkeitssignal zeigt Abbildung 3.3. Das instationäre Signal resultiert aus einer Grobstruktursimulation, die am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der Universität Rostock durchgeführt wurde.

Werden nun die Momentanwerte der abhängigen Variablen u, p, h und Y_{α} aus den Bilanzgleichungen (3.3), (3.6), (3.9) und (3.10) mittels Favre-Zerlegung in Mittel- und Schwankungswert zerlegt, folgen nach anschließender Mittelung die Favre-gemittelten Transportgleichungen:

• Massenbilanz

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho} \, \tilde{u}_i) = \overline{\rho}^S \tag{3.26}$$

• Impulsbilanz

$$\frac{\partial \overline{\rho} \, \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho} \, \tilde{u}_i \, \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \overline{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\tau_{ij}} + \overline{\rho} \, \widetilde{u_i''} u_j'' \right) + \overline{\rho} \tilde{F_j^S}$$
(3.27)



Abbildung 3.3: Instationärer Geschwindigkeitsverlauf an einem Punkt aus einer Grobstruktursimulation

• Speziesmassenbilanz

$$\frac{\partial \overline{\rho} \, \tilde{Y}_{\alpha}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho} \, \tilde{u}_i \, \tilde{Y}_{\alpha}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\rho} \, D_{\alpha} \frac{\partial \tilde{Y}_{\alpha}}{\partial x_i} - \overline{\rho} \, u_i^{\prime\prime} \, \widetilde{Y}_{\alpha}^{\prime\prime} \right) + \overline{\dot{\Omega}_{\alpha}^C} + \overline{\dot{\Omega}_{\alpha}^S} \tag{3.28}$$

• Energiebilanz

$$\frac{\partial \overline{\rho} \,\tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\overline{\rho} \,\tilde{u}_i \,\tilde{h}_s) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} - \overline{\rho} \,\widetilde{u_i'' h''} \right) + \frac{\overline{\mathrm{D}p}}{\mathrm{D}t} + \overline{\dot{Q}^C} + \overline{\dot{Q}^S} + \overline{\tau_{ij}} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}. \tag{3.29}$$

3.3.2 Schließungsansatz

In den Bilanzgleichungen (3.26) bis (3.29) treten ungeschlossene Terme auf, die eine weitere Behandlung notwendig machen. Diese Ausdrücke entstehen durch die Favre-Zerlegung und der anschließenden Mittelung, wobei Korrelationen der Schwankungswerte resultieren, die nicht durch den Mittelungsprozess verschwinden. Werden für die ungeschlossenen Terme weitere Transportgleichungen benutzt, beinhalten diese dann wieder Terme, die ungeschlossen sind. Dieses Problem wird als Schließungsproblem der Turbulenz bezeichnet.

Zum Schließen des Gleichungssystem wird für die turbulenten Flüsse $\vec{u}'' \vec{Y}_{\alpha}''$ und $\vec{u}'' \vec{h}''$ klassischerweise ein Gradientenansatz verwendet. Dieser Ansatz, angewendet auf die turbulenten Speziesflüsse ergibt

$$\overline{\rho}\widetilde{u''Y}_{\alpha}'' = -\frac{\mu_t}{\mathrm{Sc}_{\alpha,t}}\frac{\partial\tilde{Y}_{\alpha}}{\partial x_i}.$$
(3.30)

Hierin ist μ_t die turbulente dynamische Viskosität, die aus dem Turbulenzmodell folgt, und $Sc_{\alpha,t}$ die turbulente Schmidt-Zahl für Spezies α .

Weiterhin ungeschlossen sind die turbulenten Reynoldsspannungen $u''_i u''_j$, die in der Impulsbilanz (3.27) auftreten. Sie werden mittels Boussinesq-Ansatz auf die mittleren Größen zurückführt und haben die Form des viskosen Spannungstensors aus Gleichung (3.9). Dies führt auf den Ausdruck

$$\overline{\rho}\widetilde{u_i''}\widetilde{u_j''} = -\mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}\right) + \frac{2}{3}\overline{\rho}k.$$
(3.31)

Darin ist k die turbulente kinetische Energie, die aus dem Produkt der Geschwindigkeitsschwankungen resultiert

$$k = \frac{1}{2}(u_i'' u_i''). \tag{3.32}$$

Aus den Gleichungen (3.30) und (3.31) ist zu ersehen, dass als einzige Unbekannte die turbulente dynamische Viskosität μ_t verbleibt. In dieser Arbeit wird ein Zwei-Gleichungsmodell verwendet, um die turbulente Viskosität nach

$$\mu_t = \overline{\rho} \frac{k}{\omega} \tag{3.33}$$

zu bestimmen. Die turbulente kinetische Energiekund die spezifische turbulente Dissipationsfrequenz ω sind über

$$\omega = \frac{1}{C_{\mu}} \frac{\epsilon}{k} \tag{3.34}$$

miteinander verknüpft. C_{μ} ist dabei eine Modellkonstante, die üblicherweise auf $C_{\mu} = 0,09$ gesetzt wird [/60/, /65/].

Zur Bestimmung von k und ω müssen zwei zusätzliche Differentialgleichungen gelöst werden, die sich zum k- ω -SST-Modell zusammenschließen. Dieses Modell stellt eine Weiterentwicklung des k- ω -Modells nach Wilcox /65/ dar, wobei es eine Überlagerung des reinen k- ϵ - und des k- ω -Modells ist. Dabei werden die Vorteile der Ausgangsmodelle im k- ω -SST-Modell vereinigt. In der Kernströmung wird das k- ϵ - und im wandnahen Bereich das k- ω -Modell verwendet. Die zum SST-Modell gehörenden Gleichungen lauten nach /45/:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + u_i \frac{\partial k}{\partial x_i} = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta^* \rho k \omega + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[(\mu + \sigma_k \mu_t) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$$
(3.35)

$$\frac{\partial\rho\omega}{\partial t} + u_i \frac{\partial\omega}{\partial x_i} = \frac{\gamma}{\nu_t} \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \beta \rho \omega^2 + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \sigma_\omega \mu_t\right) \frac{\partial\omega}{\partial x_j} \right] + 2 \left(1 - F_1\right) \rho \sigma_{\omega 2} \frac{1}{\omega} \frac{\partial k}{\partial x_j} \frac{\partial\omega}{\partial x_j}.$$
(3.36)

Die in den Gleichungen (3.35) und (3.36) vorkommenden Konstanten σ_k , σ_ω , β und γ werden aus dem Ansatz

$$\phi = F_1 \phi_1 + (1 - F_1)\phi_2 \tag{3.37}$$

berechnet, zusammen mit dem Konstantensatz aus Tabelle 3.1.

Tabelle 3.1: Konstantensatz für das k- ω -SST-Modell nach Menter /45/

σ_{k1}	$\sigma_{\omega 1}$	γ_1	β_1	σ_{k2}	$\sigma_{\omega 2}$	γ_2	β_2	β^*	a_1
0,85	0,5	$\frac{5}{9}$	$\frac{3}{40}$	1,0	0,856	$0,\!44$	0,0828	0,09	0,31

In Gleichung (3.38) stellt F_1 eine Wichtungsfunktion dar, die sich mittels Gleichung (3.38) ergibt

$$F_1 = \tanh\left\{\left\{\min\left[\max\left(\frac{2\sqrt{k}}{\beta^* \,\omega \, y_W}; \frac{500 \,\nu}{y_W^2 \,\omega}\right); \frac{4 \,\rho \,\sigma_{\omega 2} \,k}{C D_{k\omega} \,y_W^2}\right]\right\}^4\right\},\tag{3.38}$$

wobei y_W der Abstand zur nächsten Oberfläche ist. $CD_{k\omega}$ ist der positive Anteil der Kreuzdiffusion

aus Gleichung (3.36).

Im k- ω -SST-Modell nach Menter /45/ wird die turbulente Viskosität als

$$\nu_t = \frac{a_1 k}{\max\left(a_1 \,\omega; S \, F_2\right)} \tag{3.39}$$

definiert mit S als Wirbelstärke und der Funkion F_2 , die sich aus Gleichung (3.40) ergibt.

$$F_2 = \tanh\left[\max\left(2\frac{\sqrt{k}}{\beta^* \,\omega \, y_W}; \frac{500\,\nu}{y_W^2\,\omega}\right)\right]^2 \tag{3.40}$$

Mit den oben aufgeführten Gleichungen steht nun ein System aus partiellen Differentialgleichungen zur Verfügung, um turbulente, reaktive Strömungen mittels numerischen Methoden berechnen zu können. Hierin sind noch nicht bekannte Terme enthalten, die zur Berücksichtigung von Sprayprozessen und chemischen Vorgängen (gekennzeichnet mit dem hochgestellten ^S bzw. ^C) eingeführt werden. Deren weitere Behandlung sind Thema der Kapitel 4 und 5.

3.4 Zusammenfassung

In diesem Abschnitt werden die thermodynamischen und strömungsphysikalischen Grundlage für die Beschreibung turbulenter Strömungen reaktiver Fluide gelegt. Dabei besteht das Gleichungssystem aus den Erhaltungsgleichungen für Masse (Spezies- und Gesamtmasse), Impuls und Energie sowie den Zustandsgleichungen zur Kopplung der thermodynamischen Größen Druck, Temperatur und Enthalpie.

Da die Erhaltungsgleichungen nur in wenigen Fällen analytisch lösbar sind, müssen diese mit Hilfe numerischer Methode gelöst werden. Grundlage hierfür ist die räumliche und zeitliche Diskretisierung der Bilanzgleichungen. Die räumliche Diskretisierung erfolgt durch Approximation der Geometrie mittels numerischem Rechennetz, das aus einer endlichen Anzahl an Volumina besteht. Durch Aufteilung der Rechnung in viele Einzelzeitschritte erfolgt die zeitliche Diskretisierung.

Eine Möglichkeit die turbulente Strömung im Brennraum eines Ottomotors der Modellierung zugänglich zu machen, liegt in der statistischen Betrachtung der bilanzierten Zustandsgrößen. Für viele ingenieurtechnische Aufgabenstellungen genügen Aussagen über die mittleren Werte, so dass die bilanzierten Größen in einen Mittel- und Schwankungswert aufgespalten, in die Erhaltungsgleichungen eingesetzt und anschließend zeitlich gemittelt werden. Aus dieser Vorgehensweise resultieren zusätzliche ungeschlossene Terme, für die obendrein keinerlei weitere Gleichungen zur Verfügung stehen. Zum Schließen der RANS-Gleichungen wird der Wirbelviskositätsansatz verfolgt, wobei die turbulente dynamische Viskosität über das $k-\omega$ -SST-Modell bestimmt wird.

4 Modellierung der Gemischaufbereitung

Die Berücksichtigung der direkten Kraftstoffzufuhr in den Brennraum geschieht mittels Spraymodell, das die wesentlichen physikalischen Effekte bei der Einspritzung abbildet. In diesem Kapitel sollen die einzelnen Modelle vorgestellt werden, die in ihrer Gesamtheit das Spraymodell bilden. Sie spiegeln den Primär- und Sekundäraufbruch der Tropfen, den Einfluss der Gasphase auf das Spray, die Verdampfung und den Impulsaustausch wider. Das Spraymodell wird zur Berechnung zusätzlicher Quellterme in den Bilanzgleichungen aus Abschnitt 3.1 benötigt.

Abschnitt 4.1 gibt einen Überblick über die Grundidee zur Spraymodellierung und die verschiedenen Lösungsansätze. Anschließend präsentiert Abschnitt 4.2 eine Übersicht der verwendeten Untermodelle.

4.1 Spraygleichung und Modellierungsstrategien

Die Spraywolke in einem direkteinspritzenden Motor besteht aus einer großen Anzahl kleiner Tropfen, so dass die direkte Auflösung jedes Tropfens zu einem sehr großen Rechenaufwand führen würde. Deshalb werden statistische Methoden verwendet, um das Spray zu beschreiben.

Das Spray ist durch die Verteilung von Tropfengröße, den Ort, die Geschwindigkeit und durch seine Eigenschaften (z. B. Temperatur) charakterisiert, weshalb es sinnvoll ist, das Spray durch eine Verteilungsfunktion zu beschreiben /74/.

Die wahrscheinliche Anzahl an Tropfen pro Volumeneinheit zur Zeit t, die sich im Ortsintervall $[\vec{x}, \vec{x} + d\vec{x}]$ befinden und durch die Geschwindigkeit im Intervall $[\vec{u}_T, \vec{u}_T + d\vec{u}_T]$, einen Radius im Intervall $[r_T, r_T + dr_T]$, eine Temperatur im Intervall $[T_T, T_T + dT_T]$ und den Deformationsparametern im Intervall [y, y + dy] sowie $[\dot{y}, \dot{y} + d\dot{y}]$ charakterisiert sind, kann durch die Verteilungsfunktion

$$\frac{\text{mögliche Anzahl an Tröpfchen}}{\text{Volumeneinheit}} = f(\vec{x}, \vec{u}_T, r_T, T_T, y, \dot{y}, t) \,\mathrm{d}\vec{u}_T \,\mathrm{d}T_T \,\mathrm{d}y \,\mathrm{d}\dot{y}$$
(4.1)

beschrieben werden. f besitzt somit elf unabhängige Variablen:

- die drei Raumkoordinaten \vec{x} ,
- die drei Komponenten des Geschwindigkeitsvektors \vec{u}_T ,
- der Radius r_T (dem Modell liegt ein kugelförmiger Radius der Tropfen zu Grunde),
- die Tropfentemperatur T_T ,
- die Abweichung von der Kugelform y und
- die zeitliche Änderung von y ($\dot{y} = dy/dt$).

Eine Gleichung zur Beschreibung der zeitlichen Entwicklung der Verteilungsfunktion f kann in

Analogie zu den Erhaltungsgleichungen für die Gasphase aufgestellt werden

$$\frac{\partial f}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} (f u_{T,i}) - \frac{\partial}{\partial u_{T,i}} (f F_i) - \frac{\partial}{\partial r} (f R) - \frac{\partial}{\partial T_T} (f \dot{T}_T) - \frac{\partial}{\partial y} (f \dot{y}) - \frac{\partial}{\partial \dot{y}} (f \ddot{y})
+ \dot{f}_{coll} + \dot{f}_{bu}.$$
(4.2)

Hierin sind F_i , R, \dot{T}_T und \ddot{y} die zeitlichen Änderungsraten der Geschwindigkeit, des Radius, der Temperatur und der Oszillationsgeschwindigkeit, die aus der Verfolgung eines Tropfens entstehen. Die Quellterme \dot{f}_{coll} und \dot{f}_{bu} berücksichtigen die Änderung der Verteilungsfunktion einerseits in Folge von Zusammenstößen zwischen den Tropfen und andererseits dem Tropfenzerfall.

Die direkte Lösung von Gleichung (4.2) würde die Diskretisierung in elf Dimensionen bedeuten, was zu einem deutlichen Mehraufwand bereits bei wenigen Gitterpunkten führt. Eine andere Vorgehensweise bietet das discrete-droplet Modell nach Dukowicz /22/. Dabei wird das gesamte Spray durch eine endliche Anzahl diskreter, statistischer Pakete diskretisiert, die wiederum die gesamte Population an Tropfen repräsentieren. Jedes der einzelnen Pakete stellt eine Gruppe von Tropfen mit gleichen Eigenschaften wie Temperatur, Durchmesser und Zusammensetzung dar. Die Pakete können als eine Lösung der Gleichung (4.2) angesehen werden, so dass eine höhere Anzahl an solchen Paketen die Lösung verbessert.

Die Berücksichtigung des Sprays wird durch Einführung zusätzlicher Quellterme in die Bilanzgleichungen der Gasphase (3.3), (3.6), (3.9), und (3.10) Rechnung getragen. Durch Aufsummierung der Änderung der Tropfeneigenschaften über alle Pakete kann der Beitrag des Sprays zur Gasphase berechnet werden. Die Geschwindigkeit, mit der sich die Sprayeigenschaften ändern, kann mittels gewöhnlicher Differentialgleichungen für den Ort, den Impuls, die Temperatur und die Masse beschrieben werden. Den Gleichungen liegen dabei die folgenden Annahmen zu Grunde [/16/, /37/, /69/]

- die Tropfen sind sphärisch (Ausnahme bildet die Bestimmung des Widerstandskraftkoeffizienten, s. Abschnitt 4.2.3),
- Masse-, Energie- und Impulsübertragung erfolgt quasi-stationär,
- die Austauschkoeffizienten für Masse, Impuls und Energie werden nach empirischen Ansätzen bestimmt.

4.2 Spraymodell

4.2.1 Primär- und Sekundäraufbruch

Der Primäraufbruch beschreibt den Aufbruch der geschlossenen Flüssigkeitsphase in erste große Tropfen. Dieser Prozess beruht auf drei physikalischen Effekten:

- Turbulenz der Flüssigkeitsphase,
- Entstehung und Zerfall von Kavitationsblasen im Injektor und
- aerodynamische Kräfte, die auf die Flüssigkeit wirken /68/.

Je nachdem welcher Effekt überwiegt, wird zwischen verschiedenen Primäraufbruch-Regimen differenziert, wobei nach [/5/, /68/] das Atomization-Regime für Hochdruck-Einspitzsysteme vorherrschend

ist. Hierbei zeichnet sich das Atomization-Modell durch einen direkten Aufbruch der Tropfen am Düsenaustritt aus.



Abbildung 4.1: Prinzipskizze zum Blob-Sheet-Modell nach /5/

Zur Beschreibung des Primäraufbruchs wird das Blob-Sheet-Modell nach [/2/, /29/] verwendet. Abbildung 4.1 verdeutlicht die Grundidee des Modells, wonach aus dem Düsenaustritt große Tropfen ("Blobs") den Düsenaustritt verlassen. Die Größe der Tropfen wird mittels einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion berechnet, die an Messdaten angepasst wurde. Als Verteilungsfunktion für die Tropfendurchmesser kommt in dieser Arbeit eine Rosin-Rammler-Funktion zum Einsatz [/29/, /78/].

Die zeitliche Zufuhr neuer Blobs wird anhand eines Einspritzprofils gesteuert. Nachdem die Blobs einen bestimmten Abstand von der Düse erreichen, beginnt der Sekundäraufbruch. Reitz et al. /29/ schlagen zur Bestimmung der Aufbruchlänge L_A folgenden Ansatz vor

$$L_A = B \left(\frac{\rho_l \sigma_l d_T \cos \theta}{\rho_g^2 u_{rel}^2} \right)^{1/2}.$$
(4.3)

In Gleichung (4.3) sind ρ_l und ρ_g die Dichte der Flüssigkeits- bzw. der Gasphase, d_T der Durchmesser des Blobs, u_{rel} die Relativgeschwindigkeit zwischen Flüssigkeits- und Gasphase. *B* und θ sind Modellkonstanten, die an dieser Stelle den Wert 45 bzw. 10 annehmen.

Ist L_A kleiner als der tatsächliche Abstand zwischen Tropfen und Düsenaustritt, wird das Sekundäraufbruchsmodell verwendet. Dieses Modell beschreibt den weiteren Aufbruch der Tropfen bis zu dem Zeitpunkt, an dem die Tropfen komplett in die Gasphase übergehen. Für die Berechnung des Sekundäraufbruchs kommt in dieser Arbeit das Taylor-Analogy-Breakup-Modell (TAB) zur Anwendung.



Abbildung 4.2: Analogie zwischen dem System Tropfen-Gas und einem angeregten, gedämpften Feder-Masse-System nach /5/

Die Idee des TAB-Modells geht auf O'Rourke und Amsden /53/ zurück, wobei der weitere Aufbruchprozess des Tropfens in Analogie zu einem angeregten, gedämpften Feder-Masse-System betrachtet wird, vgl. Abbildung 4.2. Die Anregung, welche zu einer Verformung des Tropfens führt, wird durch aerodynamische Kräfte verursacht. Diese Kräfte sind proportional zur Relativgeschwindigkeit u_{rel} zwischen Tropfen und Gasphase. Die Oberflächenspannung σ_l des Tropfens wirkt dabei der Verformung entgegen. Viskose Effekte, in Abbildung 4.2 mit der dynamischen Viskosität der Flüssigkeit μ_l gekennzeichnet, beschreiben den inneren Widerstand des Fluids gegenüber von außen aufgeprägten Verformungen. Zur Beschreibung der dimensionslosen Verformung, ausgedrückt als Quotient der Tropfenauslenkung von der sphärischen Form und dem Tropfenradius $y = x/(C_b r_T)$ (Abbildung 4.2), wird eine zeitliche Differentialgleichung zweiter Ordnung verwendet

$$\ddot{y} = \frac{C_F}{C_b} \frac{\rho_g}{\rho_l} \frac{u_{rel}^2}{r_T^2} - C_k \frac{\sigma_l}{\rho_l r_T^3} y - C_d \frac{\mu_l}{\rho_l r_T^2} \dot{y}.$$
(4.4)

Hierin sind C_F , C_k , C_d und C_b dimensionslose Konstanten, die in Tabelle 4.1 angegeben werden.

Unter der Bedingung, dass die Relativgeschwindigkeit für einen Zeitschritt konstant bleibt, kann Gleichung (4.4) analytisch gelöst werden, was auf folgende Gleichung führt

$$y(t) = \frac{C_F}{C_k C_b} \operatorname{We} + \exp(-t/t_d) \left[\left(y_0 + \frac{C_F}{C_k C_b} \operatorname{We} \right) \cos(\omega_{bu} t) + \frac{1}{\omega_{bu}} \left(\dot{y} + \frac{y_0 - \frac{C_F}{C_k C_b} \operatorname{We}}{t_d} \right) \sin(\omega_{bu} t) \right]. \quad (4.5)$$

Hierin ist We = $(\rho_g r_T u_{rel}^2)/\sigma_l$ die Weber-Zahl der Gasphase, das Verhältnis von Trägheits- zu Oberflächenspannungskraft. Sie ist die bestimmende dimensionslose Kennzahl für den Sekundäraufbruch /36/. Weiterhin beeinflusst die Eigenfrequenz ω_{bu} und t_d den Aufbruchprozess. Sie ergeben sich nach

$$\omega_{bu}^{2} = C_{k} \frac{\sigma_{l}}{\rho_{l} r^{3}} \quad \text{und} \quad \frac{1}{t_{d}} = \frac{C_{d} \mu_{l}}{2 \rho_{l} r^{2}}.$$
(4.6)

Als Aufbruchbedingung wird beim TAB-Modell $y \ge 1$ verwendet. Das bedeutet, dass die sphärische Auslenkung halb so groß wie der Durchmesser der Tropfen ist. Weiterhin werden die Initialwerte für y, \dot{y} sowie die Konstanten C_F, C_k, C_d und C_b benötigt, um Gleichung (4.5) zu lösen. Tabelle 4.1 gibt einen Überblick über die angenommenen Werte.

Tabelle 4.1: Konstantensatz für das TAB-Modell

y_0	\dot{y}_0	C_F	C_k	C_d	C_b
0	0	$\frac{1}{3}$	8	10	$\frac{1}{2}$

4.2.2 Wärme- und Stoffübertragung

Dringt das Kraftstoffspray in den Brennraum ein, beginnt zunächst der Primäraufbruch. In die dabei entstehende Tropfenwolke strömt zunehmend warme Luft aus dem Brennraum, was auch als Entrainment bezeichnet wird. Hierbei findet Wärmeübertragung zwischen Gas und den Tropfen statt, was zur Erwärmung und Verdampfung des Kraftstoffes führt, wobei der Übergang vom flüssigen Kraftstoff in den gasförmigen Zustand auch durch den Konzentrationsunterschied zwischen Flüssigkeitsund Gasphase getrieben wird, s. Abbildung 4.3. So kommt es auch vor Erreichen der Siedetemperatur des Kraftstoffes zu einem Stofftransport von Kraftstoff in die Gasphase, so dass immer $\dot{m}_{verd} < 0$ für den verdampften Kraftstoffmassenstrom gilt, solange die umgebende Luft im ungesättigten Zustand vorliegt. Die Energie zur Überwindung der Verdampfungsenthalpie h_{verd} kommt dabei vom Tropfen. Sollte die an den Tropfen durch Konvektion zugeführte Wärmeenergie kleiner als die durch Verdampfung abgeführte Wärmeenergie sein, so sinkt die Tropfentemperatur.



Abbildung 4.3: Energie- und Stoffströme an einem Modelltropfen

Die unterschiedlichen Wärmeströme sowie die zeitliche Änderung der Tropfentemperatur zeigt Gleichung (4.7)

$$m_T c_{p,l} \frac{dT_T}{dt} = \dot{Q}_{konv} + \dot{Q}_{Verd} = \pi \, d_T \, \lambda_s \, \mathrm{Nu} \left(T_\infty - T_T \right) f_{Verd} + \dot{m}_T \, h_{Verd}(T_T). \tag{4.7}$$

Der in Gleichung (4.7) eingeführte Korrekturfaktor f_{Verd} dient zur Berücksichtigung der Verdampfung auf die Wärmeübertragung an den Tropfen. f_{Verd} wird nach /49/ und /68/ wie folgt berechnet

$$f_{Verd} = \frac{\varsigma}{e^{\varsigma} - 1} \quad \text{mit} \quad \varsigma = \frac{c_{p,l} \dot{m}_T}{\pi \, d_T \, \lambda_s \, \text{Nu}}.$$
 (4.8)

Die in Gleichung (4.7) auftretende zeitliche Änderung der Tropfenmasse \dot{m}_T infolge der Verdampfung kann anhand einer Massenbilanz für den Tropfen bestimmt werden, wobei hier davon ausgegangen wird, dass die Brennraumluft unlöslich im flüssigen Kraftstoff ist. Die Verdampfungsrate ergibt sich dann aus

$$\frac{\mathrm{d}m_T}{\mathrm{d}t} = \dot{m}_{Verd} = -\pi \, d_T \, D_s \, \rho_s \, \mathrm{Sh} \, \ln\left(\frac{1 - x_{v,\infty}}{1 - x_{v,s}}\right). \tag{4.9}$$

Eine ausführliche Herleitung findet sich in /70/. In Gleichung (4.9) sind $x_{v,s}$ und $x_{v,\infty}$ der Molenbruch des Kraftstoffdampfes an der Oberfläche des Tropfens resp. weit davon entfernt, ρ_s die Dichte und D_s der Massendiffusionskoeffizient des Dampfes an der Tropfenoberfläche.

Zur Lösung von Gleichung (4.7) und (4.9) werden weiterhin Korrelationen für die Nusselt- und Sherwood-Zahl benötigt. In der Literatur /16/ werden verschiedene Ansätze verfolgt und verglichen, wobei an dieser Stelle die Beziehungen von Ranz und Marshal /68/ zur Anwendung kommen

$$Nu = 2, 0 + 0, 6 \operatorname{Re}^{1/2} \operatorname{Pr}^{1/3}$$

Sh = 2, 0 + 0, 6 Re^{1/2} Sc^{1/3} (4.10)

mit der Prandtl-Zahl, die das Verhältnis aus viskosem Impulstransport zur Wärmeleitung bildet und sich aus

$$\Pr = \frac{\mu_s \, c_{p,s}}{\lambda_s} \tag{4.11}$$

ergibt sowie der Schmidt-Zahl, die das Verhältnis aus viskosem Impulstransport zur Massendiffusion bildet

$$Sc = \frac{\mu_s \rho_s}{D_s}.$$
(4.12)

Für die Stoffwertberechnung wird die Temperatur der Oberfläche nach der 1/3-Regel aus Tropfenund Gastemperatur bestimmt

$$T_s = \frac{2T_T + T_g}{3}.$$
 (4.13)

4.2.3 Impulsübertragung und Tropfentracking

Die Hochdruckeinspritzung von Kraftstoff in den Brennraum führt zu einer starken Beschleunigung der eingespritzten Flüssigkeit. Auf Grund der hohen Relativgeschwindigkeit zwischen Gas- und Flüssigkeitsphase kommt es zu einem Impulsaustausch, wobei der Impulsbeitrag des Sprays durch einen Quellterm in Gleichung (3.9) Berücksichtigung findet. Die Spraytropfen werden durch die aufgeprägte Widerstandskraft abgebremst. Hierbei kann die zeitliche Änderung des Impulses für einen Tropfen nach dem zweiten Newtonschen Axiom wie folgt ausgedrückt werden

$$m_T \frac{\mathrm{d}\vec{u}_T}{\mathrm{d}t} = \vec{F}.\tag{4.14}$$

Hierin ist m_T die Tropfenmasse, \vec{u}_T die Geschwindigkeit des Tropfens und \vec{F} die an den Tropfen angreifende Kraft. \vec{F} setzt sich nach Gleichung (4.15)

$$\vec{F} = -\frac{\pi d_T^2}{8} \rho_l C_{D,Kugel} \left| \vec{u}_T - \vec{u} \right| \left(\vec{u}_T - \vec{u} \right) + m_T \vec{g}$$
(4.15)

aus der aerodynamischen Widerstandskraft und der Gewichtskraft zusammen. In Gleichung (4.15) ist \vec{u} die Geschwindigkeit der Gasphase und $C_{D,Kugel}$ der Widerstandskraftkoeffizient für steife Kugeln. Zur Berücksichtigung turbulenter Strömungen wird $C_{D,Kugel}$ je nach Re-Zahl dynamisch berechnet. Hierfür kommt folgende Korrelation

$$C_{D,Kugel} = \begin{cases} \frac{24}{\text{Re}} \left(1 + \frac{\text{Re}^{2/3}}{6} \right) & \text{Re} \le 1000 \\ 0.424 & \text{Re} > 1000 \end{cases}$$
(4.16)

zum Einsatz. In Gleichung (4.16) erfolgt die Bestimmung der Re-Zahl anhand von

Re =
$$\frac{2 r_T |\vec{u}_T - \vec{u}| \rho_g}{\mu_g}$$
. (4.17)

Wird ein sphärischer Tropfen mit genügend großer We-Zahl einer Gasströmung ausgesetzt, erfährt der Tropfen eine Verformung, so dass die Annahme einer Kugelform nicht länger gerechtfertigt ist [/5/, /68/]. Um diesem Umstand gerecht zu werden, wird der Widerstandskoeffizient $C_{D,Kugel}$ mittels linearer Gleichung in Abhängigkeit der Verformung y nach

$$C_D = C_{D,Kugel}(1+2,632y) \tag{4.18}$$

berechnet.

Mittels Gleichung (4.14) kann die Änderung des Impulses für jedes Lagrange Partikel bestimmt werden. Aus der aktuellen Geschwindigkeit ist es dann möglich die aktuelle Position des Partikels nach

$$\frac{\mathrm{d}\vec{x}_T}{\mathrm{d}t} = \vec{u}_T \tag{4.19}$$

zu berechnen.

4.3 Zusammenfassung

Für die Abbildung der Prozesse bei der Direkteinspritzung werden zusätzliche Modelle benötigt. Weiterhin werden die Informationen des Spraymodells zur Schließung der Erhaltungsgleichungen benötigt, in denen Sprayquellterme auftreten. Das für diese Arbeit verwendete Spraymodell wurde in diesem Kapitel vorgestellt. Die einzelnen zu betrachtenden Prozesse sind:

- Einspritzung,
- Primär- und Sekundäraufbruch,
- Wärmeübertragung- und Verdampfung sowie
- Impulsübertragung.

Der Modellierungsansatz zur Beschreibung des Sprays geht von diskreten statistischen Tropfenpaketen aus, die für sich Tropfen gleicher Eigenschaft repräsentieren. So kann auf diese Weise mittels weniger Tropfenpakete eine große Population an Einzeltropfen abgebildet werden. Auf Grund der sehr hohen Anzahl an Tröpfchen im realen Kraftstoffspray, ist der gewählte Ansatz geeignet, effiziente Rechenzeiten zu gewährleisten.

Unter Anwendung diesen Ansatzes und Verwendung von Einzelmodellen zur Abbildung der oben genannten physikalischen Prozesse ist das in diesem Kapitel vorgestellte Modell in der Lage, wesentliche Eigenschaften des Spray wieder zu geben.

5 Modellierung der Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen

Im Abschnitt 1.2.1 ist bereits auf die Vorgänge bei der Entwicklung von Selbstzündungen von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen eingegangen worden. Hierbei spielen mannigfaltige thermochemische Vorgänge eine Rolle, die zu einem Aufbau des Radikalpools in dem zündfähigen Gemisch führen. Wird dabei eine bestimmte kritische Konzentration an reaktiven Spezies erreicht, kommt es zum Hauptumsatz des Kraftstoff-Luft-Gemisches und zur spontanen Energiefreisetzung. Da in dieser Arbeit die turbulente Strömung innerhalb des Brennraums betrachtet wird, kommt es zu einer Interaktion der chemischen und turbulenten Prozesse. Dabei führt die statistische Betrachtung der Strömung, s. Abschnitt 3.3 zu ungeschlossenen Termen in den Transportgleichungen, die über zusätzliche Modelle bestimmt werden müssen.

Zum Verständnis der thermochemischen Vorgänge bei der Selbstzündung gibt der Abschnitt 5.1 grundlegende Zusammenhänge für die Beschreibung chemischer Reaktionen wieder. Dadurch werden die Grundlagen zur Bestimmung der chemisches Quellterme in den Gleichungen (3.6) und (3.10) gelegt. Im darauf folgenden Abschnitt 5.2 soll ein Überblick über Möglichkeiten zur Beschreibung von Selbstzündungen unterschiedlicher Detailtiefe und Modellierungsaufwand gegeben werden. Das Unterkapitel 5.3 stellt unterschiedliche Möglichkeiten der Berücksichtigung der Chemie-Turbulenz-Interaktion dar, wobei im Abschnitt 5.3.1 speziell auf das in dieser Arbeit verwendete Modell des Partially-Stirred-Reactor (PaSR) eingegangen wird.

5.1 Grundlagen chemischer Reaktionskinetik

Der Umsatz eines Mols eines beliebigen Kraftstoffes F mit Hilfe von a Molen eines Oxidanten zu b Molen von Verbrennungsprodukten Pr kann durch die Bruttoreaktion

$$F + aOx \xrightarrow{k_f} bPr$$
 (5.1)

beschrieben werden. Der zeitliche Verbrauch in der Konzentration des Brennstoffes wird durch folgende gewöhnliche Differentialgleichung dargestellt

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{F}]}{\mathrm{d}t} = -k_f(T)[\mathrm{F}]^n[\mathrm{Ox}]^m,\tag{5.2}$$

in der die in eckigen Klammern aufgeführten Größen die molaren Konzentrationen der Stoffe aus (5.1) bedeuten. Gleichung (5.2) sagt aus, dass der Verbrauch von F proportional zur den Konzentrationen der Reaktanden ist, wobei der Proportionalitätsfaktor $k_f(T)$ der Geschwindigkeitskoeffizient der Bruttoreaktion (5.1) genannt wird. Die Exponenten n, m sind Reaktionsordnungen bezogen auf die einzelnen Spezies. Die Summe der Exponenten entspricht der Gesamtreaktionsordnung /74/.

Problematisch bei Verwendung von Bruttoreaktionen ist, dass sie sehr komplexe Zeitgesetze haben können und die Reaktionsordnungen keine geraden Zahlen sind, negativ sein können und sowohl von der Zeit als auch von den Reaktionsbedingungen abhängen [/70/, /74/]. Weiterhin bleibt festzuhalten, dass Bruttoreaktionen nicht dazu geeignet sind, ein tieferes Verständnis der wahren chemischen Prozesse zu erlangen. Deshalb werden anstatt dessen Elementarreaktionen verwendet. Diese laufen auf molekularer Ebene genauso ab, wie die Reaktionsgleichung sie beschreibt /74/. Weiterhin ist die Reaktionsordnung einer Elementarreaktion in jedem Fall konstant und sie ist gleich der Molekularität der betrachteten Elementarreaktion [/17/, /74/].

Damit nun die Umsatzraten dieser Elementarreaktionen bestimmt werden können, müssen die beteiligten Spezies durch N_R Elementarreaktionen der Form

$$\sum_{\alpha} \nu'_{\alpha,k} \alpha \Longleftrightarrow \sum_{\alpha} \nu''_{\alpha,k} \alpha, \quad k \in \{1, N_R\}$$
(5.3)

in Beziehung gesetzt werden. Die stöchiometrischen Koeffizienten, welche die Anzahl an Molekülen der einzelnen Stoffe α in der k-ten Reaktion angeben, sind hier mit $\nu'_{\alpha,k}$ bzw. $\nu''_{\alpha,k}$ bezeichnet. Da chemische Reaktionen sowohl vorwärts als auch rückwärts mit einer jeweiligen Produktions- bzw. Abbaurate ablaufen können, wird hier zwischen einer Vorwärts- resp. Rückwärtsreaktionsrate unterschieden. Durch die Reaktionsraten wird für die jeweilige Reaktion implizit ein chemisches Zeitmaß eingeführt /63/. Das Zeitmaß kann durch eine Eigenwertanalyse (vgl. /73/, /74/) berechnet werden. Unter Berücksichtigung aller an der Reaktion k teilnehmenden Spezies lassen sich die Reaktionsraten r (f forward, b backward) nach

$$r_{f,k} = k_{f,k} \prod_{\alpha} \left(\frac{\rho Y_{\alpha}}{M_{\alpha}}\right)^{\nu'_{\alpha,k}} \quad \text{und} \quad r_{b,k} = k_{b,k} \prod_{\alpha} \left(\frac{\rho Y_{\alpha}}{M_{\alpha}}\right)^{\nu''_{\alpha,k}}$$
(5.4)

bestimmen. Hier bezeichnen $k_{f,k}$ und $k_{b,k}$ die Geschwindigkeitskoeffizienten der k-ten Reaktion. M_{α} stellt das Molekulargewicht der Spezies α dar. Durch Summation über alle im Reaktionsmechanismus enthaltenen Elementarreaktionen kann der chemische Quellterm der Spezies α , der in die Speziestransportgleichung (3.5) eingeht, bestimmt werden.

$$\dot{\Omega}_{\alpha}^{C} = M_{\alpha} \sum_{k} (\nu_{\alpha,k}^{''} - \nu_{\alpha,k}^{'})(r_{f,k} - r_{b,k})$$
(5.5)

Für die Berechnung der Reaktionsraten werden die Geschwindigkeitskoeffizienten k_f bzw. k_b benötigt. Die Herleitung von k_f , ausgehend von der Stoßtheorie für Moleküle, findet sich bei Turns /70/, jedoch wird im Allgemeinen ein Arrhenius-Ansatz (5.6) verwendet, um den Geschwindigkeitskoeffizienten zu berechnen [/70/, /74/].

$$k_f(T) = BT^n \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{R_m T}\right)$$
(5.6)

B wird als präexponentieller Faktor bezeichnet, der leicht von der Temperatur abhängig ist, was durch

den Faktor T^n ausgedrückt werden soll. E_a ist die Aktivierungsenergie und R_m die universelle Gaskonstante. Mit Hilfe von (5.6) lässt sich auch die starke Temperaturabhängigkeit chemischer Reaktionen erklären. In /73/ sind für viele Elementarreaktionen aus dem $H_2 - CO - C_1 - C_2 - O_2$ -System die Faktoren zur Bestimmung des Geschwindigkeitskoeffizienten angegeben.

Der chemische Quellterm, der in der Erhaltungsgleichung für die Energie (Gleichung (3.10)) auftritt, kann nun wie folgt geschrieben werden:

$$\dot{Q}^{C} = \sum_{k} (r_{f,k} - r_{b,k}) \sum_{\alpha} (\nu_{\alpha,k}^{'} - \nu_{\alpha,k}^{''}) (\Delta h_{f}^{0})_{\alpha}.$$
(5.7)

Es ist hierin $(\Delta h_f^0)_{\alpha}$ die Standardbildungsenthalpie der Spezies α .

5.2 Strategien zur Modellierung von Zündvorgängen

Da die Zündungsmodellierung zu einem zentralen Punkt bei der rechentechnischen Erfassung einer VE zählt, soll an dieser Stelle ein Überblick über mögliche Strategien gegeben werden. Zum Schluss der Gegenüberstellung erfolgt ein Vorschlag, welche Strategie am vielversprechendsten erscheint. Eine ausführliche Übersicht gibt /9/ wieder, auf die sich die folgende Darstellung stützen soll.

- 1. Detaillierter Reaktionsmechanismus: Im Abschnitt 1.2.1 konnte aufgezeigt werden, dass der Zündprozess langkettiger Kohlenwasserstoffe nur durch die detaillierte Darstellung der komplexen chemischen Vorgänge abbildbar ist. Detaillierte chemische Reaktionsmechanismen für höhere Kohlenwasserstoffe enthalten mehrere hundert bzw. tausend Elementarreaktionen und mehrere hundert Spezies. So setzt sich z.B. ein Reaktionsmechanismus zur Beschreibung der Methanverbrennung bereits aus 53 Spezies und 325 Reaktionen zusammen /66/. Ein großer Vorteil von detaillierten Reaktionsmechanismen ist deren Gültigkeit über einen großen Zustandsraum, d.h. sie decken einen großen Druck- und Temperaturbereich ab. Nachteilig wirkt sich dahingegen deren Anwendung auf die Rechenperformance aus, denn für alle im Mechanismus enthaltenen Spezies wird eine eigene Speziesmassenbilanzgleichung (Vgl. dazu Gleichung (3.6)) gelöst.
- 2. Reduzierte Kinetik: Im obigen Punkt ist gesagt worden, dass detaillierte Kinetiken einen hohen Rechenaufwand bedeuten. Zur Umgehung dieses Umstandes können reduzierte Kinetiken zum Einsatz kommen. Eine Möglichkeit besteht nun darin, unter Annahme von partiellem Gleichgewicht und Quasistationarität den vollständigen Mechanismus so zu reduzieren, dass dieser für die 3D-Simulation anwendbar ist. Mit Hilfe homogener Reaktorberechnungen werden die signifikanten Reaktionsschritte identifiziert. Hierfür steht eine Reihe von Programmen zur Verfügung. In /73/ und /74/ sind für die Annahme partiellen Gleichgewichts und Quasistationarität jeweils ein Beispiel gezeigt. Das Problem dieses Ansatzes liegt darin, dass für die Spezies, für die eine Quasistationaritätsannahme getroffen wurde, ein aufwändig gestaltetes algebraisches Gleichungssystem gelöst werden muss /9/, was sich wiederum nachteilig auf die Performance der Simulation auswirkt.
- 3. Globalkinetiken: Im Gegensatz zu den eben besprochenen reduzierten Kinetiken lassen sich die Reaktionsraten bei Verwendung einer Globalkinetik ähnlich wie bei Elementarreaktionen anhand

eines einfachen Arrhenius-Ansatzes bestimmen. Das Lösen aufwendiger Gleichungssysteme für die nicht über Differentialgleichungen zu bestimmenden Spezieskonzentrationen, für die ein Quasistationaritätsansatz gewählt wurde, entfällt. Globalkinetiken können über Quasistationaritätsoder partiellen Gleichgewichtsannahmen aber auch intuitiv gefunden werden. Im Gegensatz zu detaillierten Mechanismen, die für einen großen Bereich der Einflussgrößen gelten, ist bei Globalkinetiken darauf zu achten, dass die Reaktionsraten in diesem Bereich ebenfalls zuverlässig bestimmt werden können. Die in das Geschwindigkeit-Zeitgesetz eingehenden Exponenten (Gleichung (5.4)) stehen nicht mehr im Zusammenhang mit den stöchiometrischen Koeffizienten und können daher so gewählt werden, dass eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen des detaillierten Mechanismus vorliegt.

4. Lineares Zündfortschrittsmodell: Dieses Modell geht davon aus, dass Selbstzündung dann auftritt, wenn sich

$$1 = \int_{t=0}^{t=t_{Ind}} \frac{\mathrm{d}t}{\tau_{Ind}}$$
(5.8)

einstellt. Die Zeit t_{Ind} nach der sich ein beliebiges Gemisch selbst entzündet, wird durch Integration der zu einem Momentanzustand gültigen Zündverzugszeit τ_{Ind} über die Zeit t berechnet. Dem Modell liegt dabei die Annahme zu Grunde, dass der Zündfortschritt linear mit der Zeit ansteigt, d. h. die Reaktionsrate ist während der Induktionszeit nur von äußeren Parametern wie z. B. vom Druck und von der Temperatur abhängig und nicht vom Zündfortschritt selbst. Die momentanen Zündverzugszeiten können anhand von Reaktorsimulationen in Abhängigkeit der Einflussparameter oder über Korrelationen berechnet werden. Anschließend werden diese tabelliert, so dass die Berechnung des Strömungsfeldes von der Chemie entkoppelt wird. Trotz der Verwendung eines detaillierten Mechanismus kann die CFD-Simulation ohne großen Verlust an Performance durchgeführt werden.

5. Indikatorspezies: In Correa /17/ wird zur Repräsentation des Radikalpools der CO-Massenbruch genutzt. CO ist dadurch gekennzeichnet, dass es während der Induktionsphase in nur geringer Konzentration vorliegt, es aber zu einem steilen Anstieg kommt, sobald das explosionsfähige Gemisch zündet. Mit Hilfe von 0D-Reaktorsimulationen lässt sich die CO-Bildungsrate in Abhängigkeit der Größen Druck, Temperatur, Mischungsbruch und CO-Konzentration bestimmen. Die Werte können in eine Tabelle zusammengefasst und somit für die CFD-Simulation bereitgestellt werden. Die Chemie-Turbulenz-Interaktion wird mit Hilfe eines PDF-Ansatzes (Abschnitt 5.3) berücksichtigt, wobei die Faltung der Reaktionsrate über die PDF des Mischungsbruches, der Temperatur und des CO-Massenbruches geschieht. Für die Bildung der Verbundwahrscheinlichkeit (JPDF) wird statistische Unabhängigkeit zwischen den einzelnen Variablen angenommen, so dass sich die JPDF als Produkt der einzelnen PDFs schreiben lässt. Überschreitet der CO-Massenbruch einen bestimmten Wert, findet die Zündung statt.

Im Anschluss an die Zündung folgt die Wärmefreisetzungsphase. In dieser Phase wird in /17/ die ILDM-Methode (Intrinsic Low Dimension-Manifold) zur Bestimmung der Reaktionsraten genutzt. Mit der ILDM kann der chemische Reaktionsmechanismus anhand weniger Reaktionsfortschrittsvariablen beschrieben werden. Im Fall von /17/ wird hierfür der CO₂-Massenbruch

genutzt. Mittels PDF-Ansatz kann die ILDM-Methode auf turbulente Strömungen angewendet werden. Dabei erfolgt eine Faltung des momentanen chemischen Quellterms über die PDF, so dass dadurch der mittlere Quellterm resultiert.

Bei der Betrachtung der einzelnen Ansätze wird bereits auf die Vor- und Nachteile eingegangen. Der vierte Ansatz berücksichtigt dabei keine Vermischung der Reaktanden während der Induktionszeit und erscheint für den hier zu untersuchenden Anwendungsfall für ungeeignet. Beim fünften Ansatz ist die Bildung der Verbundwahrscheinlichkeit unter Annahme statistischer Unabhängigkeit mit Fehlern behaftet, die zu einer ungenügenden Vorhersage der Selbstzündung führen kann.

Die Verwendung detaillierter Reaktionskinetiken erscheint dabei am Besten geeignet, um die komplexen Vorgänge bei der Selbstzündung von Kraftstoff-Luft-Gemischen zu beschreiben. Jedoch resultieren aus der Anwendung detaillierter Reaktionskinetik hohe Anforderungen an die Rechenleistung und den Speicherbedarf. Diese können durch gezielte Optimierung des Reaktionsmechanismus an die Untersuchungsbedingungen und den Verwendungszweck reduziert werden.

In dieser Arbeit wird der Mechanismus von Ahmed et al. /1/ verwendet. Dieser beschreibt die komplexen thermodynamisch-chemischen Vorgänge bei der Verbrennung von iso-Oktan/n-Heptan-Luft-Gemischen über einen großen Bereich von Anfangsbedingungen (Druck, Temperatur, Luftverhältnis, Oktanzahl). Bei der Reduzierung wird von Beginn an der Fokus auf die chemischen Prozesse im Niedertemperaturbereich gelegt. Als Kriterium gilt die Übereinstimmung zwischen detaillierten und reduzierten Mechanismus im zeitlichen Auftreten des Selbstzündereignisses. Das Ergebnis des Reduzierungsprozesses ist ein Reaktionsmechanismus, der aus 176 Spezies und 280 Reaktionen besteht /18/.

Nachdem die Vorgehensweise zur Selbstzündungsmodellierung gezeigt wurde, soll anschließend dargelegt werden, wie die chemischen Prozesse mit der turbulenten Strömung vereinbart werden können. Vom Grundproblem der Chemie-Turbulenz-Interaktion und dem in dieser Arbeit gewähltem Lösungsansatz handelt der nächste Abschnitt.

5.3 Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion

Turbulente Strömungen sind durch starke Fluktuationen der Spezieskonzentrationen, der Geschwindigkeit und der Temperatur gekennzeichnet. Zur Behandlung solcher Strömungen haben sich statistische Ansätze bewährt. Diese sind Gegenstand des Abschnittes 3.3. Ergebnis dieser Methoden sind die favre-gemittelten Erhaltungsgleichungen für die Gesamtmasse, die Komponentenmasse, den Impuls und die Energie, dokumentiert durch das Gleichungssystem (3.26) bis (3.29). Zur Lösung dieser Gleichungen werden mittlere chemische Reaktionsraten und mittlere chemische Quellterme benötigt, die auf verschiedene Weise ermittelt werden können.

Im Allgemeinen ist die Reaktionsrate von den Größen Temperatur, Druck und den Spezieskonzentrationen abhängig, die in einen Zustandsraumvektor $\Phi = (p, T, Y_1, \ldots, Y_N)$ zusammengefasst werden können. Auf Grund der starken Nichtlinearität zwischen dem chemischen Quellterm und den Größen in Φ , s. die Gleichungen (5.4) und (5.6), gilt

$$\dot{\Omega}_{\alpha}(\Phi) \neq \dot{\Omega}_{\alpha}(\overline{\Phi}),$$
(5.9)

d. h. der mittlere chemische Quellterm $\dot{\Omega}_{\alpha}(\Phi)$, basierend auf den Momentanwerten des Zustandsvektors, ist nicht gleich dem mittleren Quellterm, basierend auf den mittleren Größen von Φ . Trotz dieser Erkenntnis wird in einigen Anwendungen die Berechnung des mittleren Quellterms anhand der Mittelwerte der Größen aus dem Zustandsraum Φ vorgenommen, was zu großen Fehlern in den Ergebnissen führen kann /17/.

Da die Fluktuationen der Größen aus dem Zustandsraumvektor nicht Teil der Lösung der favregemittelten Bilanzgleichungen sind, müssen diese mit geeigneten Modellen beschrieben werden /9/. Eine Möglichkeit besteht in der Faltung des instantanen chemischen Quellterms, beruhend auf den mittleren Werten, über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. Probably Density Function PDF) der turbulenten Schwankungen. Beruht die PDF auf mehreren abhängigen Variablen, wird sie Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion oder joint-PDF (JPDF) genannt. Die Bestimmung der joint-PDF stellt sich jedoch als schwierig dar und ist das eigentliche Problem bei der statistischen Beschreibung /63/. Prinzipiell kann die JPDF über das Lösen einer Transportgleichung bestimmt werden, wobei hier wiederum ungeschlossene Terme auftreten und ein hoher Rechenaufwand resultieren. Weiterhin kann a priori ein Formverlauf für die einzelnen PDF's angenommen werden, wobei häufig statistische Unabhängigkeit zwischen den Variablen angenommen wird, so dass sich die JPDF aus dem Produkt der Einzel-PDF's ergibt. Weitere Nachteile dieses Ansatzes sind zum einen ihr großer Rechenaufwand /17/ und die schwierige Anwendung detaillierter Reaktionskinetik /35/.

Eine weitere Kategorie von Modellen postuliert grundlegende Annahmen (Flamelet-Ansatz) oder beruht auf empirischen Ansätzen zur Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion. Das Flamelet-Konzept basiert auf der Annahme, dass sich die turbulente Flamme, in der die chemische Reaktion abläuft, als Ensemble von kleinen, sehr dünnen Flämmchen zusammensetzt (Reaktionszone) [/56/, /74/]. Da die Flamelets kleiner als die turbulenten Wirbel sind, werden sie, trotz dass sie in eine turbulente Strömung eingebettet sind, als laminare Flamme interpretiert und behandelt [/60/, /56/]. Die Beschreibung der Reaktionszone geschieht über das Lösen einer Transportgleichung passiver Skalare (z.B. Mischungsbruch für nicht-vorgemischte Systeme), wobei in deren Bilanzgleichung keine Quellterme auf Grund chemischer Reaktionen auftreten. Dies macht ihre Behandlung mit statistischen Methoden einfacher. Mittels der Flamelet-Gleichung können die reaktiven Skalare wie z.B. die Massenbrüche der beteiligten Spezies als Funktion des passiven Skalars berechnet werden.

Zu den auf empirischen Ansätzen basierenden Modellen gehören das Eddy-Breakup-Modell und das Eddy-Dissipation-Concept nach Magnussen und Hjertager [/41/, /44/]. Diese Modelle sind ursprünglich für unendlich schnelle Chemie hergeleitet worden, da sie chemische Kinetik nicht berücksichtigen und auf einer Bruttogleichung beruhen [/56/, /60/, /74/]. D. h., sobald Kraftstoff und Oxidationsmittel aufeinandertreffen, findet ein chemischer Umsatz statt (mixed=burnt). Sie können auch auf chemisch kontrollierte Prozesse angewendet werden [/42/, /43/].

Das in dieser Arbeit verwendete PaSR-Modell ist eine Erweiterung des Eddy-Dissipation-Modells /49/, welches auf Magnussen und Hjertager zurückgeht /44/. Es wurde auf den Bereich der endlich schnellen Chemie unter Berücksichtigung detaillierter Kinetiken ausgeweitet. Die Grundidee und die Berechnung des mittleren chemischen Quellterm auf Grundlage des PaSR-Modells sind Gegenstand des nachfolgenden Abschnitts 5.3.1.

5.3.1 Konzept des Partially-Stirred-Reactor Modells

Turbulente Strömungen bei genügend großen Re-Zahlen weisen ein großes Spektrum an Wirbeln unterschiedlicher Skalen auf. An den Grenzflächen zwischen den Wirbeln werden Zug- und Schubspannungen übertragen, was wiederum Grundlage des Energiekaskaden-Prozesses ist. Eine weitere Folge dieser übertragenen Spannungen ist die Vergrößerung von Konzentrationsunterschieden, die wiederum die molekulare Diffusion erhöhen und die Grundlage für die Durchmischung von Kraftstoff und Oxidationsmittel sind [/43/, /56/]. Der Prozess des turbulenten Mischens findet dabei auf den kleinsten Skalen statt /21/, den sogenannten Feinstrukturen. Diese Feinstrukturen bilden den Reaktionsraum und sind durch folgende Merkmale charakterisiert:

- sie nehmen nur einen geringen Anteil des Fluidvolumens ein,
- in ihnen finden die dissipativen Prozesse statt,
- ihre charakteristischen Abmaße sind im Bereich der Kolmogorov-Länge oder kleiner /43/.

Die Grundidee des Partially-Stirred-Reactor Konzepts ist es, eine Gitterzelle als in zwei Bereiche aufgespalten anzusehen, vgl. Abbildung 5.1. Hierbei stellt der grau schraffierte Bereich den reagierenden Anteil der Zelle auf dem Level der Feinstrukturen dar (Konzentration¹ c), während im restlichen Teil der Zelle keinerlei chemische Reaktionen ablaufen [/35/, /43/, /49/]. Die Konzentrationen c_0 und c_1 sind die zeit-gemittelten Konzentrationen, die in die Zelle ein- bzw. austreten. Als Annahme für die Reaktionszone gilt, dass sie wie ein perfekt gemischter Reaktor betrachtet wird. Dies hat zur Folge, dass Fluktuationen der Zustandsgrößen vernachlässigt werden und somit der laminare chemische Quellterm anhand des detaillierten Reaktionsmechanismus berechnet werden kann.



Abbildung 5.1: Grundidee des PaSR-Modells

Die Zusammensetzung im nicht schraffierten Gebiet ändert sich durch Massenaustausch mit der Reaktionszone. Dies kann aus Abbildung 5.1 abgeleitet und in folgende Gleichung

$$c_1 = \kappa^* c + (1 - \kappa^*) c_0 \tag{5.10}$$

übertragen werden. Hierbei ist κ^* der Massenanteil des Reaktionsraums an der Zellmasse. Gleichung (5.10) lässt sich auch grafisch darstellen, wie in Abbildung 5.2 zu sehen ist. Im ersten Schritt (I) werden über chemische Reaktionen die Konzentrationen im Reaktionsraum geändert. Hierbei liegt im Reaktionsraum dieselbe Anfangskonzentration c_0 vor. Im Anschluss (II) erfolgt die turbulente

¹Wenn in diesem Zusammenhang von Konzentration gesprochen wird, ist damit die Gesamtheit der Konzentrationen aller an den Reaktionen teilnehmenden Spezies gemeint.

Durchmischung der Konzentrationen aus dem reagierenden und nicht reagierenden Bereich der Zelle. Den zwei Teilprozessen können unterschiedliche Zeitskalen zugeordnet werden:

- da c_0 und c_1 die Konzentration zu Beginn bzw. zum Ende des Prozesses sind, ist die Zeitspanne dazwischen der Zeitschritt des Gesamtvorgangs τ ,
- die Zeit zwischen c und c_1 ist ein charakteristisches Zeitmaß für die Turbulenz.



Abbildung 5.2: Aufteilung des Prozesses in Reaktions- und Mischungsschritt

Aus Abbildung 5.2 können Relationen zwischen den Konzentrationen und den charakteristischen Zeitskalen aufgestellt werden. Es folgt daraus

$$\frac{c_1 - c_0}{\tau} = \frac{c - c_1}{\tau_{mix}} = \dot{\Omega}^C(c)$$
(5.11)

was wiederum zu einem Ausdruck für c_1

$$c_1 = \kappa^* c + (1 - \kappa^*) c_0 \quad \text{mit} \quad \kappa^* = \frac{\tau}{\tau + \tau_{mix}}$$
 (5.12)

führt. Das Problem ist nun, dass die Konzentration c und auch der chemische Quellterm $\dot{\Omega}^{C}(c)$ Informationen aus den Feinstrukturen sind, die nicht bekannt sind. Die Aufgabe besteht nun also darin, die unaufgelösten Informationen des Feinstrukturbereichs durch aufgelöste Größen zu ersetzen.

Hierzu führt Nordin /49/ eine Reihe von mathematischen Umformungen durch, die an dieser Stelle nicht wiederholt werden soll. Das Ergebnis der Argumentationskette ist

$$\dot{\Omega}_C(c) = \kappa \dot{\Omega}_C(c_1). \tag{5.13}$$

mit

$$\kappa = \frac{\tau_c}{\tau_c + \tau_{mix}}.$$
(5.14)

In Gleichung (5.14) stellt κ das Verhältnis aus chemischer Zeitskala τ_c und τ_{mix} dar. Die chemische Zeitskala wird mittels Speziesreferenztechnik bestimmt /49/. Dabei beschränkt die Spezies einer chemischen Reaktion, die Gefahr läuft bei zu großem Zeitschritt negativ zu werden, den Zeitintegrationsschritt. Solch eine Spezies liegt in der geringsten Konzentration vor und wird obendrein noch in der Reaktion verbraucht. Der komplementäre Reaktionspartner der Referenzspezies liegt demnach in einer höheren Konzentration vor und wird nach [/12/, /49/] zur Bestimmung der chemischen Zeitskala verwendet

$$\tau_c = \frac{1}{k_f c_{max}}.$$
(5.15)

Hierin ist k_f der Geschwindigkeitskoeffizient der Hinreaktion (s. Abschnitt 5.1) und c_{max} die maximale Konzentration der an der Reaktion beteiligten Spezies.

Gleichung (5.13) ist eine Korrelation, die den chemischen Quellterm, beruhend auf Feinstrukturinformation, zurückführt auf die Größen im Zustandspunkt 1 und damit auf bekannte aufgelöste Informationen.

Als einzige Unbekannte verbleibt nun τ_{mix} für die es mehrere Bestimmungsgleichungen gibt /35/. In OpenFOAM wird zur Bestimmung von τ_{mix} folgende Korrelation

$$\tau_{mix} = C_{mix} \sqrt{\frac{\mu_{eff}}{\rho C_{\mu} \omega k}} \quad \text{mit} \quad C_{mix} = 0.005$$
(5.16)

angewendet, worin C_{mix} eine Modellkonstante und μ_{eff} die effektive Viskosität darstellt. In /39/ wird vom geringen Einfluss von C_{mix} auf das Ergebnis berichtet. So ergibt sich ein verschwindender Einfluss, solange $C_{mix} < 1$ ist. Diese Arbeit folgt dem Vorschlag von Nordin /49/ für die Festsetzung von C_{mix} , gemäß Gleichung (5.16).

Das in diesem Kapitel vorgestellte PaSR-Modell ermöglicht die Modellierung der Interaktion der turbulenten Mischung und komplexer, chemischer Reaktionen. Hierbei werden detaillierte Chemie, großskalige Entmischung sowie die turbulente Mischung berücksichtigt. Die inhomogene Struktur der Reaktionszone in den Feinstrukturen wird nicht betrachtet. So ist es möglich den mittleren chemischen Quellterm auf den laminaren Quellterm nach Gleichung (5.13) zurückzuführen. Im Kapitel 8 auf Seite 71 wird das PaSR-Modell verwendet, um das Vorentflammungsphänomen mittels numerischer Methoden zu untersuchen.

5.4 Zusammenfassung

Die Beschreibung chemischer Vorgänge, darunter auch der Selbstzündprozess, kann auf unterschiedlichen Detailebenen geschehen. Den höchsten Detaillierungsgrad besitzen dabei Elementarreaktionen. Hierbei erscheint vor allem die detaillierte Reaktionskinetik als sehr geeignet, um den Selbstzündprozess zu betrachten. Der Nachteil dieser Methode ist die hohe Anforderung an die Rechenkapazitäten, denn detaillierte Reaktionsmechanismen für die Verbrennung von höheren Kohlenwasserstoffen bestehen aus einer großen Anzahl an Spezies und Elementarreaktionen. Für alle Spezies muss in der CFD eine eigene Erhaltungsgleichung gelöst werden. Außerdem sind große chemische Mechanismen zumeist sehr steif. Auf den gewünschten Einsatzbereich (z.B. Druck und Temperatur) optimierte Reaktionsmechanismen bieten den Vorteil eines hohen Modellierungsgrads in Verbindung mit einem geringeren Rechenaufwand.

In den Erhaltungsgleichungen für den Speziesmassenbruch und die Energie treten Quellterme auf, die auf die Berücksichtigung chemischer Reaktionen zurückgeführt werden können. Um diese zu berechnen, ist ein Verbrennungsmodell notwendig. Hierbei wird die Modellierung der ablaufenden Prozesse dadurch erschwert, dass die chemischen Prozesse in einer turbulenten Strömung ablaufen. Genauer gesagt liegt die Schwierigkeit darin, dass der chemische Quellterm der Speziesmassenbilanz, auf Basis der momentanen Strömungsgrößen, ungleich dem chemischen Quellterm ist, der auf den mittleren Zustandsgrößen beruht. Um diesem Problem entgegen zu treten, liegen in der Literatur Modelle zur Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion vor.

Für die vorliegende Arbeit wird das PaSR-Modell zur Modellierung der Chemie-Turbulenz-Interaktion verwendet. Hiermit können detaillierte Reaktionsmechanismen, großskalige Mischungsvorgänge sowie turbulente Mischung abgebildet werden. Das Ergebnis des Modells liegt in der Bestimmung des mittleren chemischen Quellterms aus dem laminaren Quellterm multipliziert mit einem Zeitskalenverhältnis, in das die chemische und turbulente Mischungszeitskala eingehen.

6 Gittererstellung, Anfangs- und Randbedingungen

Da für die Bilanzgleichungen aus Abschnitt 3.3 nur in wenigen Ausnahmefällen analytische Lösungen vorliegen, müssen diese mit Hilfe numerischer Methode berechnet werden. Um dies erreichen zu können, erfolgt eine räumliche Diskretisierung der Volumen- und Oberflächenintegrale aus Gleichung 3.16. Ausgehend von einer realen Motorgeometrie wird ein Rechengitter erstellt, das aus einer endlichen Anzahl von Teilvolumen besteht. Da die Geometrien heutiger realer Motoren sehr komplex sind, ist die Verwendung geeigneter Vernetzungsstrategien von Nöten, so dass als Resultat ein Gitter mit entsprechender Qualität vorliegt.

Die Betrachtung der Simulation beschränkt sich dabei auf die Abbildung der Prozesse eines Zylinders, so dass als Grundlage für das numerische Gitter ein Zylinder eines 1,4 l TSI Vierzylindermotors von VW verwendet wird. Die geometrischen Daten werden dem Autor als CAD-Datei vom Projektpartner zur Verfügung gestellt.

Der Abschnitt 6.1 gibt eine kurze Übersicht über die angewendete Strategie zur Vernetzung und das dabei verwendete Programm. Im nachfolgenden Abschnitt 6.2 erfolgt die Darstellung der Anfangsund Randbedingungen für die 3D-CFD-Simulation. Das Kapitel schließt mit dem Abschnitt 6.3, in dem der Ablauf einer typischen Motorsimulation kurz erläutert werden soll.

6.1 Numerische Rechengitter für reale Motorgeometrien

OpenFOAM bietet für die Gittererstellung zwei unterschiedliche Anwendungen an. Zum einen kann der Anwender zur Erstellung eines blockstrukturierten Gitters *blockMesh* verwenden, wobei die Raumkoordinaten der Eckpunkte aller Blöcke anzugeben sind. Gerade bei sehr komplexen Geometrien ist die Verwendung von *blockMesh* jedoch enorm schwierig, weshalb dieses Programm hauptsächlich bei einfacheren Fällen Anwendung findet.

Eine weitere, neuartige Vernetzungsmethode stellt *snappyHexMesh* dar. Darin wird die Kontur der Geometrie automatisch über Hexaeder und Prismenschichten approximiert. Hierbei ist der Grad der Automatisierung sehr hoch. Gerade für komplizierte Geometrien bedeutet dies eine erhebliche Zeiteinsparung. Zum Beginn der Arbeit war *snappyHexMesh* noch nicht verfügbar, weshalb dessen Anwendung nicht in Frage kam. Für zukünftige Gitter könnte dieses Programm eine Alternative zur herkömmlichen Vorgehensweise darstellen.

Auf Grund der eingeschränkten Anwendbarkeit von OpenFOAM für die Gittererstellung komplexer Geometrien, wie sie beim realen Ottomotor vorliegen, fällt die Wahl auf das kommerzielle Programm ANSYS ICEM CFD. Dieses Programm gestattet dem Anwender die Wahl zwischen zwei unterschiedlichen Vernetzungsstrategien:

- Automatische Vernetzung: Die Geometrie wird durch Tetraeder approximiert. Dabei muss der Anwender die Größe der Gitterzellen explizit vorgeben. Über eine Reihe von Funktionen kann die räumliche Diskretisierung von Kurven, Flächen und ausgewählten Volumina explizit verändert werden. Die wandnahe Grenzschicht wird bei dieser Methode über separat eingeführte Prismenschichten abgebildet. Ein großer Vorteil dieser Methode liegt in der automatischen Vernetzung, so dass keine Blockstruktur entwickelt werden muss. Der Nachteil dieser Methode ist die erhöhte Anzahl an benötigten Gitterzellen im Vergleich zum blockstrukturierten Ansatz sowie die geringen Eingriffsmöglichkeiten auf den Generierungsprozess.
- Blockstrukturierte Vernetzung: Dieser semi-automatische Ansatz beruht auf der Unterteilung der Geometrie in diskrete Blöcke. Hierbei wird die geeignete Aufteilung der Blöcke durch die Komplexität der Geometrie bestimmt. Neben der Blockaufteilung hat der Benutzer Einfluss auf die Knotenverteilung entlang der Blockkanten und damit auf die Anzahl der endlichen Hexaeder, die in der Summe das numerische Rechengitter bilden. Der Vorteil dieses Ansatzes ist die deutlich reduzierte Anzahl an Gitterzellen im Vergleich zur Tetraeder-Vernetzung. Nachteilig wirkt sich bei dieser Methode die Zeit für die Erstellung einer geeigneten Blockstruktur aus, wobei die Erfahrung des Anwenders von entscheidender Bedeutung ist.

Auf Grund der eben genannten Fakten fällt die Entscheidung auf ANSYS ICEM CFD Hexa für die Gittergenerierung sowie die Anwendung des blockstrukturierten Ansatzes für die räumliche Diskretisierung der untersuchten Geometrie.

6.1.1 Allgemeine Herangehensweise

Grundlage für jeden Gittergenerierungsprozess ist eine vorliegende CAD-Datei oder die Kenntnis der geometrischen Verhältnisse des jeweiligen Versuchsträger. In dieser Arbeit liegen die geometrischen Details in einer CAD-Datei vor. Sie stellt die geometrischen Daten eines Zylinders eines 1,4 l TSI Vierzylinder-Ottomotors mit vier Ventilen pro Zylinder und einer variablen Ladungsbewegungsklappe (LBK) bereit.

Ausgangspunkt für den Gittergenerierungsprozess ist die Aufbereitung der CAD-Daten. Hierfür muss zunächst die Geometrie über ein Interface in ICEM CFD Hexa importiert werden, so dass die geometrischen Daten dem Programm zur Verfügung stehen. Der erste Schritt zur Aufbereitung der Geometrie ist die Bereinigung etwaiger Löcher in der Geometrie. Hierfür bietet ICEM CFD spezielle Funktionen an.

Nachdem die Geometrie von Fehlern bereinigt ist, folgt die eigentliche Erarbeitung der Blockstruktur. Ein Block besteht dabei aus acht Knotenpunkten, 12 Kanten und sechs Seitenflächen. Hierbei können Knotenpunkte auf geometrische Punkte, Kurven und Oberflächen, Blockkanten auf Kurven oder Oberflächen und Seitenflächen der Blöcke auf Oberflächen der Geometrie assoziiert werden. Somit wird eine sehr gute Annäherung der Geometrie durch das numerische Gitter erzielt.

6.1.2 Generierung der Blockstruktur mit ANSYS ICEM CFD

Auf Grund der komplexen Geometrie moderner Zylinder stellt die Vernetzung derselben den Anwender vor eine große Herausforderung. Hierbei bietet es sich an, die Zylindergeometrie in kleinere Einheiten aufzuteilen, um somit einfachere Blockstrukturen entwickeln zu können. Die Abbildung 6.1 zeigt einen Schnitt in der x-z-Ebene bei y = -0,017 m. Hierin lässt sich anhand der gestrichelten Linien die räumliche Unterteilung der Geometrie erkennen. Das Resultat des Trennprozesses sind drei eigenständige Regionen:

- Einlasskanal,
- Einlasseite und
- Auslasseite.

Nachdem die Auslassventile geschlossen sind, findet der Auslasskanal keine Berücksichtigung mehr in der betrachteten Geometrie. Auf ähnliche Weise wird bei Einlass schließt verfahren. Ab diesem Zeitpunkt liegen die Vorgänge innerhalb des Einlasskanals außerhalb des Betrachtungsrahmens.



Abbildung 6.1: Aufteilung der komplexen Zylindergeometrie in einzelne Abschnitte

Mit Hilfe der Aufspaltung, entlang der y-z-Ebene bei x = 0 (Abbildung 6.1), ist es möglich, die Bewegung der Ventile und somit auch die Verzerrung des Gitters voneinander zu entkoppeln. Die weitere Auftrennung der Einlassseite am Ende der LBK ergibt sich aus dem Umstand, dass damit auf dieser Seite keine gegenläufigen O-Grids entstehen und somit ungünstige Gitterverhältnisse vermieden werde können.

Aufbauend auf den eben genannten Erkenntnissen kann nun eine geeignete Blockstruktur erarbeitet werden. Hierfür wird zunächst ein Block über die gesamte Geometrie gelegt, Abbildung 6.2 (a). Dieser umspannende Block wird anschließend in mehrere kleinere Blöcke aufgespalten. Hierbei ergibt sich die Anzahl der Aufspaltungen anhand der geometrische Komplexität. Überflüssige Blöcke, wie z.B. links und rechts vom Zylinder, werden entfernt. Das Ergebnis des Trennprozesses in der x-z-Ebene zeigt Abbildung 6.2 (b), wobei die grauen Striche den Blockkanten entsprechen.

Auf ähnliche Weise wird in der x-y-Ebene verfahren, dabei wird sich nachfolgend auf die Darstellung des Zylinder mit den vier Ventilen konzentriert. In Abbildung 6.3 ist auf der linken Seite die Auftrennung des initialen Blocks in immer feinere Strukturen zu erkennen. Maßgebend für die Struktur ist in diesem Fall das Vorhandensein der Ventile. Auf der rechten Seite von Abbildung 6.3 lässt sich die Untergliederung der Blockstruktur, hervorgerufen durch die Ventile und den Zylinderkopf, gut erkennen.



Abbildung 6.2: Blockstruktur in der x-z-Ansicht



Abbildung 6.3: Blockstruktur in der x-y-Ansicht und detaillierte Darstellung der Blockstruktur im Einlassventilschnitt

Nachdem die Blöcke unterteilt wurden, müssen nun die einzelnen Blockelemente auf geometrische Elemente bezogen werden. Hierfür bietet es sich an, formgebende Kurven aus dem Schnitt zweier Ebenen zu erstellen. Blockkanten können nun auf die Kurven oder auch Oberflächen projiziert werden. Somit wird die Anpassung an krummlinige Bauteile erheblich verbessert.

Im nächsten Schritt erfolgt die Angabe der Knotenverteilung auf jeder Blockkante. Über eine Ungleichverteilung der Knotenabstände können kritische Bereiche, wie z.B. Wände, besser angenähert werden, ohne die Gesamtanzahl an Rechenzellen zu erhöhen. Danach erfolgt die Berechnung des Gitters, wobei anschließend die Qualität desselbigen getestet werden sollte. Während eine erste Prüfung auf optischem Wege erfolgen kann, bietet ICEM CFD Hexa weitere mathematisch-basierte Prüfungsmöglichkeiten an, um nicht konvexe Zellen oder Zellen mit negativen Volumen zu identifizieren. Die Beseitigung dieser schlechten Zellen nimmt einen Großteil der Zeit für die Erstellung des Gitters in Anspruch.

Das Ergebnis dieses iterativen Prozesses ist ein numerisches Rechengitter, das aus einer endlichen Anzahl von Teilvolumen besteht und damit zur räumlichen Diskretisierung verwendet werden kann. Abbildung 6.4 zeigt einen Ausschnitt der Ventilregion solch eines Gitters zum Startzeitpunkt der Motorsimulation. Die schwarzen Streifen entstehen aus sehr eng liegenden Zellkanten, so dass eine Unterscheidung nicht mehr möglich ist. Es wurde während der ganzen Simulation darauf geachtet die Wandauflösung fein genug zu bewerkstelligen. Im Mittel liegt in der Domain eine Zellauflösung von 1 mm vor. Goryntsev führt mit einer ähnlichen Zellauflösung Grobstruktursimulationen durch /27/, so dass davon ausgegangen werden kann, dass sie für RANS ebenfalls genügt. So kommt das Rechengitter im oberen bzw. unteren Totpunkt auf eine Zellanzahl von ca. 250.000 bzw. 740.000.



Abbildung 6.4: Ausschnitt von der Ventilregion des numerischen Rechengitters für die Motorsimulation

6.2 Anfangs- und Randbedingungen für die Motorsimulation

Da es sich bei der Lösung der Bilanzgleichungen aus Abschnitt 3.3 um ein Anfangs- und Randwertproblem handelt, müssen zum Startzeitpunkt der Rechnung Initialwerte für die bilanzierten Zustandsgrößen vorgegeben werden. Neben diesen Anfangswerten erfordert eine erfolgreiche Berechnung die Vorgabe der Größen an den Randflächen der Rechendomain. Die folgenden beiden Abschnitte geben eine Übersicht über die angewendete Strategie zur Vorgabe der Anfangs- und Randbedingungen.

6.2.1 Anfangsbedingungen

Auf Grund fehlender experimenteller Daten über die räumliche Verteilung der Zustandsgrößen im Brennraum, Einlass- und Auslasskanal müssen zwangsweise andere Strategien zur Bestimmung der Initialwerte angewendet werden. Hierfür gibt es zwei grundsätzliche Herangehensweisen:

- Zum einen ist es möglich, die Anfangsbedingungen aus einer vorher durchgeführten Berechnung des gleichen Falls zu verwenden. Aus Stabilitätsgründen ist dieser Ansatz der günstigere, jedoch ist der zeitliche Aufwand relativ groß.
- Eine weitere Möglichkeit besteht darin, den Beginn der Simulation so zu legen, dass keinerlei markante oder ausgeprägte Strömungsstrukturen zu erwarten sind. Im Ottomotor ist dies im Ausstoßtakt sehr gut gegeben, denn hier liegt eine reine Auslassströmung vor. Des Weiteren können hier die betrachteten Größen gut vorhergesagt werden. Zudem wird empfohlen, der Simulation einen gewissen Zeitraum zum Einschwingen zu geben, weshalb der Beginn deutlich vor dem LWOT gelegt werden sollte.

In dieser Arbeit wird zur Bestimmung der Initialwerte für die 3D-CFD nach der zweiten Methode verfahren.

6.2.2 Randbedingungen an festen Wänden und Einströmrändern

Für die erfolgreiche Durchführung des Randwertproblems müssen an den Randflächen des Rechengitters feste Werte oder Gradienten der Zustandsgrößen vorgegeben werden. Auf Grund der unsymmetrischen Geometrie können keine Symmetrie oder periodische Randbedingungen ausgenutzt werden, so dass nur zwei Arten von Randflächen vorkommen: feste Wände und Einströmränder.

Für viskose Fluide gilt an festen Wänden die Haftbedingung, so dass die Fluidgeschwindigkeit direkt an der Wand der Wandgeschwindigkeit an sich entspricht. Bei wandgeführten Strömungen entsteht auf Grund der Haftbedingung und der Viskosität des Fluids eine dünne, wandnahe Grenzschicht, wobei die Grenzschichtdicke für niederviskose Fluide gering ist /65/. Die direkte Auflösung der Grenzschicht würde relativ viele Gitterzellen benötigen, so dass normalerweise Wandfunktionen zur Beschreibung der Wandeffekte benutzt werden /72/. Hierfür bietet OpenFOAM die Anwendung von automatischen Wandfunktionen an, die in Verbindung mit dem k- ω -SST-Modell eingesetzt werden. Bei Vorgabe einer festen Temperatur an der Wand wird der Wärmestrom von oder an die Wand berechnet, um daraus den Wert für die Temperatur in der ersten Gitterzelle zu bestimmen. Für die Turbulenzvariablen und den Druck wird der Gradient zur Wand zu null gesetzt.

Einströmränder bilden in der Motorsimulation der Ein- bzw. der Austrittsquerschnitt im Ein- sowie im Auslasskanal. Für die Vorgabe der Größen an diesem Randflächentyp werden Dirichlet oder Neumann Randbedingungen eingesetzt. Auf Grund des instationären Charakters der Motorsimulationen stellen die Randbedingungen an den Einströmrändern Funktionen der Zeit dar.

Die Bestimmung der Dirichlet-RB für Temperatur und Geschwindigkeit am Ein- und Auslass beruhen auf 1D-Simulationen mit dem Programm GT-Power, wobei die Grundlage hierfür der indizierte Druck im Zylinder, welcher über mehrere Arbeitsspiele gemittelt ist, verwendet wurde. Auf Grund fehlender experimenteller Daten erfolgt die Abschätzung der Turbulenzgrößen am Einlassrand mittels dem Turbulenzgrad Tu für k nach

$$k = \frac{3}{2} \operatorname{Tu} \tilde{u}^2 \quad \text{mit} \quad \operatorname{Tu} = 5\% \tag{6.1}$$

und der Mischungslänge l für ω nach

$$\omega = \frac{\sqrt{k}}{lC_{\mu}^{1/4}} \quad \text{mit} \quad l = 0,07d_h.$$
(6.2)

Hierbei ist d_h der hydraulische Durchmesser des Einlassquerschnitts. Genauere Angaben zu den einzelnen Größen finden sich in den jeweiligen Abschnitten, in denen numerische Rechenergebnisse präsentiert werden.

6.3 Zeitlicher Ablauf der Motorsimulation

An dieser Stelle erfolgt eine Übersicht zum grundsätzlichen Ablauf numerischer Simulation von Motorinnenprozessen. Die Besonderheit bei der Modellierung von Motorprozessen ist das Vorhandensein bewegter Bauteile, weshalb es zu Verzerrungen innerhalb des Gitters, vor allem in der Nähe bewegter Randflächen wie den Ventilen, kommt, die die Gitterqualität entscheidend beeinflussen. Deshalb ist es üblich, mehrere Gitter für ein komplettes Arbeitsspiel zu verwenden.

Die Geometrie für die einzelnen Rechengitter ergibt sich aus der Kolbenweg-Gleichung (s. [/23/, /31/]) sowie den Ventilhubkurven für die Ein- bzw. Auslassventile. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass topologische Änderungen der Gitterstruktur, d.h. Entfernen oder Hinzufügen neuer Zellschichten, nicht Bestandteil der Gitterbewegung sind. Diese Möglichkeiten bestehen in OpenFOAM derzeit nur für vertikal geführte Ventile. Änderungen in der Topologie sind erst bei Erstellung des neuen Gitter möglich. Dadurch kann die räumliche Auflösung des Rechengitters an die individuellen Bedingungen (z.B. unterschiedliche Ventilstellungen) eines jeden Rechenintervalls angepasst werden. Dies ermöglicht dem Anwender ein hohes Maß an Flexibilität.

Um eine Serie von Rechengitter entwickeln zu können, wird zunächst ein Startgitter zu einem bestimmtem Grad Kurbelwellenwinkel erstellt (Abbildung 6.5 auf der linken Bildhälfte). Für die bewegten Randflächen erfolgt die Festlegung der Verschiebung oder Verschiebungsgeschwindigkeit als Randbedingung, so dass die Punktverschiebung durch die Anwendung bestimmt werden kann. Nach jedem Zeitschritt wird die Qualität des Rechengitters geprüft, um etwaige Verschlechterungen früh zu erkennen. Weist das Gitter zu viele nicht-konvexe oder schräge Zellen auf¹, wird für die erreichte Kolbenstellung ein neues Gitter erstellt und dem Prozess neu zugeführt. Die Schleife wird solange durchlaufen, bis der Endzeitpunkt erreicht ist. Zur Abdeckung des gesamten Ladungswechsels, des Kompressions- und Teile des Arbeitstaktes, sind insgesamt mehr als 35 Einzelnetze notwendig.



Abbildung 6.5: Schematischer Ablauf der Gittererstellungsprozedur (links) und der Motorsimulation (rechts)

¹In OpenFOAM wird hauptsächlich die Orthogonalität und die Schrägheit als Qualitätsmerkmal verwendet, wobei die Grenzwerte bei 70 bzw. vier liegen

Nachdem die Serie aus Einzelgittern erstellt ist, erfolgt im nächsten Schritt die eigentliche Simulation der Motorinnenprozesse, s. Abbildung 6.5 (rechts). Als Ausgangspunkt wird wiederum das Startgitter verwendet, für das die Rand- und Anfangsbedingungen aller betrachteten Zustandsgrößen gesetzt werden. Anschließend beginnt die globale Schleife mit dem Bewegen der Randflächen. Dann werden die Untermodelle für Chemie und Spray gelöst, woraus die Quellterme für die Bilanzgleichungen aus Abschnitt 3.3 resultieren. Zu diskreten Zeitpunkten der instationären Rechnung werden die berechneten Feldgrößen als ASCII-Dateien gespeichert, womit sie einer späteren Auswertung zugänglich gemacht werden. Erreicht die Rechnung das Ende eines Gitters, wird der Wechsel auf das nächste Zwischengitter vollzogen, wobei mittels Interpolation (Mapping) die Felder vom alten auf neue Gitter übertragen werden. Am Ende der Simulation steht dem Anwender ein Lösungsvektor φ über der Zeit für die weitere Auswertung zur Verfügung.



Abbildung 6.6: Zeitlicher Ablauf der Motorsimulation

Der physikalische Ablauf der Motorsimulation ist in Abbildung 6.6 dargestellt. Hierin lässt sich erkennen, dass die Simulation zum Zeitpunkt des maximalen Auslassventilhubs gestartet wird. Dadurch wird ein Einschwingen der Rechnung sichergestellt. Die Einspritzung des Kraftstoffes findet während der Ladungswechselphase bei 440°KW n. ZOT ² statt.

Das Ende der Simulation wird bei 740°KW n. ZOT erreicht. Dies ergibt sich aus der Überlegung, dass im Rahmen des Projekts Selbstzündvorgänge des Kraftstoff-Luft-Gemisches vor der eigentlichen Zündungseinleitung mittels Zündkerze untersucht werden sollen. Somit stellt der Zündzeitpunkt den limitierenden Faktor für die Bestimmung des Rechenendes dar. Der Zündwinkel für den untersuchten Betriebspunkt liegt bei ca. 735°KW n. ZOT .

6.4 Zusammenfassung

Für die Generierung der numerischen Rechengitter, die in der Motorsimulation eingesetzt werden, kommt das Programm ANSYS ICEM Hexa zur Anwendung, wobei ein blockstrukturierter Ansatz

²Die Angabe des Kurbelwellenwinkels bezieht sich auf den ZOT vom vorherigen Arbeitsspiel.

verfolgt wird. Die Vernetzung komplexer Motorgeometrien bedarf der Entwicklung von Blockstrukturen. Dabei kann es hilfreich sein, die Geometrie in mehrere separate Bereiche aufzutrennen, so dass jeder Bereich einzeln vernetzt werden kann. Neben der Erarbeitung einer geeigneten Blockstruktur stellt die Beseitigung fehlerhafter Zellen den Anwender vor große Herausforderungen.

Auf Grund von Verzerrungen während der Gitterbewegung ist für die Berechnung eines Arbeitsspiels eine Reihe von Einzelgittern notwendig. Hierbei wird die Verschiebung der Randflächen anhand der Kolbenweg-Gleichung für den Kolben und den Ventilerhebungskurven für die Ein- bzw. Auslassventile bestimmt. Für den in dieser Arbeit betrachteten Kurbelwellenwinkelbereich von 255-740°KW n. ZOT sind insgesamt über 35 Einzelgitter nötig.

Neben dem Gitter müssen für eine erfolgreiche Simulation Anfangs- und Randbedingungen vorgegeben werden. Diese sind sehr stark von der experimentellen Zugänglichkeit des zu untersuchenden Falls und der Strömungskonfiguration abhängig. Für die Motorsimulation wird der Startzeitpunkt so gewählt, das keine markanten Strömungsstrukturen auftreten und die zu bilanzierenden Größen gut bestimmbar sind. Dies ist näherungsweise im Ausstoßtakt gegeben. Randbedingungen sind an festen Wänden und Einströmrändern vorzugeben, wobei Dirichlet oder Neumann Bedingungen angewendet werden. Genauere Angaben zu den AB und RB finden sich in den jeweiligen Abschnitten, in denen Rechenergebnisse Bestandteil sind.

7 Validierung

Das in den Kapiteln 3, 4 und 5 vorgestellte numerische Modell zur Beschreibung der innermotorischen Prozesse soll anhand ausgewählter Testfälle validiert werden, um dessen Funktionalität nachzuweisen. Auf Grund der schwierigen experimentellen Zugänglichkeit an einem Vollmotor wird in dieser Arbeit die Strategie verfolgt, die präsentierten Modelle getrennt voneinander zu validieren. Dabei bleibt anzumerken, dass die Güte des Gesamtmodells nur so gut ist wie die Modellgüte des schlechtesten Untermodells. Um eine Aussage über die Verlässlichkeit des Gesamtmodells in OpenFOAM treffen zu können, wird dieses unter den gleichen Rand- und Anfangsbedingungen mit dem 3D-CFD-Programm VECTIS der Fa. Ricardo verifiziert.

Die Validierung des Partially-Stirred-Reactor-Modells zur Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion findet nicht im Zuge dieses Projekts statt. Dies hat der zeitliche Rahmen nicht hergegeben. Aus der Literatur zum PaSR-Modell [/16/, /35/, /49/, /69/] konnte die Eignung des Modells zur Beschreibung von Zündvorgängen bereits nachgewiesen werden.

Abschnitt 7.1 befasst sich mit der erfolgreichen Validierung des Strömungsmodells. Hierzu liegen experimentelle Daten aus einer Particle-Image-Velocimetry (PIV) Messung vor. Die überzeugende Validierung des Spraymodells an Messdaten aus einer Druckkammermessung wird im Abschnitt 7.2 dargelegt. Im Abschnitt 7.3 erfolgt eine Darstellung des gelungenen Vergleichs zwischen OpenFOAM und VECTIS, wobei hierin das Gesamtmodell zur Beschreibung des innermotorischen Prozesses die Grundlage bildet. Dieser Vergleich gilt als Nachweis zur Eignung des Gesamtmodells in OpenFOAM für eine erfolgreiche Motorsimulation.

7.1 Strömungsmodell

Die Validierung des Strömungsmodells anhand experimenteller Daten ist Gegenstand des nachfolgenden Abschnitts. Mit dem PIV-Verfahren ist es möglich, das zweidimensionale Geschwindigkeitsfeld von strömenden Fluiden zu messen. Dem strömenden Fluid werden dazu kleine Partikel zugeführt, die der Strömungsbewegung möglichst schlupffrei folgen sollten. Mittels Laserstrahl wird eine Messebene aufgespannt, um die darin strömenden Partikel zu beleuchten. Das gestreute Licht der Partikel wird dann durch eine auf die Messebene um 90° verdrehte Kamera aufgenommen und digital verarbeitet. Aus der Wegänderung zwischen zwei Bildaufnahmen kann auf die räumliche Geschwindigkeitsverteilung der Partikel in der beleuchteten Ebene geschlossen werden.

Im nachfolgenden Abschnitt sollen die Randbedingungen des Experiments präsentiert und die Ergebnisse des Vergleichs mit der Simulation diskutiert werden.

7.1.1 Testfallbeschreibung

Der hier untersuchte Testfall ist dem PIV-Experiment beim Projektpartner VW nachempfunden, s. Abbildung 7.1. Hierfür wird eine Nachbildung der Ansaugstrecke, inklusive der Einlassventile und des Zylinderkopfs angefertigt. Während die Einlassventile bei einem Hub von 4 mm fixiert sind, finden die Auslassventile keine Berücksichtigung im Experiment. Die LBK ist für den hier untersuchten Fall offen gehalten, so dass der gesamte Einlasskanalquerschnitt durchströmt wird. Die Partikelzufuhr wird über einen Schlauch realisiert, der oberhalb des Einlassquerschnitts befestigt ist. Mittels eines Absauggebläses wurde am Boden der transparenten Laufbuchse ein Unterdruck erzeugt, damit sich eine Strömung durch die Konfiguration einstellen konnte.



Abbildung 7.1: Darstellung des PIV-Prüfstands bei der VW AG

Die in Abbildung 7.1 schematisch dargestellte Geometrie wird mittels ANSYS ICEM CFD bei Vorlage einer CAD-Geometrie in ein Rechengitter übertragen. Abbildung 7.2 zeigt einerseits die verwendeten Randflächen und andererseits das Ergebnis der Gittererstellung. Das abgebildete Gitter setzt sich aus ca. 600.000 Gitterzellen zusammen. Bis auf den Ein- und Auslass sind alle anderen Randflächen starre Wände.

Über den Einlassquerschnitt, Abbildung 7.2 links, strömt die Luft aus dem umgebenden Raum in den Versuchsträger hinein, wobei die Strömung durch den Einlasskanal zu den Ventilen geführt wird. An den Einlassventilen erfolgt die gezielte Umlenkung der Luft, die im realen Motor zu einer Tumble-Strömung führt. Am offenen Auslassquerschnitt verlässt das Fluid den Versuchsträger.

Ebenso wichtig wie das Rechengitter sind für eine numerische Simulation die verwendeten Randund Anfangsbedingungen. In der Tabelle 7.1 ist für alle Größen wie Temperatur, Druck, Geschwindigkeit sowie für die turbulente kinetische Energie k und die spezifische Dissipationsfrequenz ω die Rand- und Anfangsbedingung aufgeführt. Am Einlassrand wird für die Geschwindigkeit eine Massenstromrandbedingung benutzt, aus der sich bei Kenntnis der Dichte die Geschwindigkeit ergibt. Da kund ω weder gemessen noch aus anderen Quellen bekannt sind, müssen diese abgeschätzt werden. Für k wird hierfür der Turbulenzgrad Tu und für ω die Mischungslänge l vorgegeben. Am Auslassrand ist für den Druck eine Dirichlet-Randbedingung gesetzt, so dass sich eine entsprechende Druckdifferenz zwischen Ein- und Auslass einstellt, die den vorgegebenen Massenstrom erfüllt. Die gemessene Druck-


Abbildung 7.2: Randflächenbezeichnung bei der Strömungsmodellvalidieurng (links) und Ausschnitt des blockstrukturierten Gitters (rechts)

differenz im Experiment war $\Delta p = 5000$ Pa. Diese konnte auch in der Simulation für den aufgeprägten Massenstrom nachgewiesen werden.

	T	p	u	k	ω
Einlass	\tilde{T} = 296 K	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\dot{m}=0.0439{\rm kg/s}$	Tu=5~%	l = 0.00182 m
Auslass	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\overline{p} = 95000 \text{ Pa}$	$\operatorname{grad}(\tilde{\vec{u}}) = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Einlasskanal	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Einlassventile	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Zylinderkopf	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Laufbuchse	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Anfangsbedingung	$\tilde{T} = 296 \text{ K}$	$\overline{p} = 95000$ Pa	$\tilde{u}_i = 0$	$k = 1 \mathrm{m}^2/\mathrm{s}^2$	$\omega=200\mathrm{l/s}$

Tabelle 7.1: Rand- und Anfangsbedingungen für die Validierung des Strömungsmodells

7.1.2 Ergebnisse und Diskussion

Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse zum Vergleich des Strömungsmodells mit experimentellen PIV-Daten vorgestellt. Hierfür werden sowohl die globale Strömungsstruktur anhand von Vektorplots und die räumliche Verteilung von der z-Komponente der Strömungsgeschwindigkeit (u_z) auf der x-z-Ebene bei y = 0 verglichen, s. Abbildung 7.3 (a). Die Ebene ist zwischen den Einlassventilen aufgespannt.

Für einen quantitativen Vergleich wird u_z entlang ausgewählter Profillinien ausgewertet. Die räumliche Lage der Linien zeigt Abbildung 7.3 (b).

Zur Beurteilung des globalen Strömungscharakters soll zunächst das Geschwindigkeitsfeld, dargestellt durch Vektoren, in der x-z-Ebene bei y = 0 betrachtet werden, Abbildung 7.4. Hierzu sind die



Abbildung 7.3: Auswerteebene und -linien für den PIV-Vergleich



Abbildung 7.4: Gegenüberstellung der globalen Strömungsstruktur in der x-z-Ebene bei y = 0 zwischen Experiment und numerischer Simulation

Vektoren mit ihrem Betrag normalisiert, d.h. sie besitzen alle dieselbe Länge. Markant ist in beiden Bildern die erkennbare Richtungsänderung der Strömung in der linken oberen Bildhälfte. Die Lage der Richtungsänderung zeigt gewisse Differenzen zwischen Simulation und Experiment, denn während die Umlenkung im Experiment bei x = -20 mm und z = -30 mm auftritt, findet in der CFD bei x = 0 und z = -40 mm statt. Gut wird in der CFD-Simulation die Zusammenführung der Strömung bei x = 15 mm wiedergegeben. Der Vergleich der globalen Strömungsstruktur dokumentiert eine gute Übereinstimmung.

Als weitere Vergleichsgröße bietet sich die räumliche Verteilung der z-Komponente des Geschwindigkeitsvektors an. Die Gegenüberstellung zwischen Experiment und numerischer Simulation zeigt Abbildung 7.5, hierbei liegt beiden Teilbildern der gleiche Wertebereich zu Grunde. Die Geschwindigkeitsverteilung bei y = 0 weist im Experiment drei Gebiete starker negativer Geschwindigkeiten auf, wovon zwei auch in der numerischen Simulation zu sehen sind. Zwei wesentliche Minima von u_z liegen im Experiment bei x = 15 mm und z = -20 mm sowie bei x = 30 mm und z = -50 mm.



(a) Experiment

(b) Simulation

Abbildung 7.5: Gegenüberstellung von u_z in der x-z-Ebene bei y = 0 zwischen Experiment und numerischer Simulation

Diese Bereiche werden durch die Simulation gut wiedergegeben. In der Kernströmung zeigen CFD und Experiment eine gute bis sehr gute Übereinstimmung

Die Abweichung zwischen Experiment und numerischer Simulation in Bezug auf das Geschwindigkeitsminimum bei x = -30 mm und z = -70 mm kann mit Messungenauigkeiten des PIV-Systems im Randbereich und Unsicherheiten in der 3D-CFD-Simulation erklärt werden. Auch bei Variation der Einlassrandbedingungen und der Gitterauflösung kann keine wesentliche Verbesserung erzielt werden, so dass festzuhalten bleibt, dass trotz kleiner Abweichungen in der zweidimensionalen Geschwindigkeitsverteilung, die Übereinstimmung zwischen Experiment und numerischer Simulation als gut bewertet wird.

Abbildung 7.6 zeigt die quantitative Gegenüberstellung der z-Komponente des Geschwindigkeitsvektors zwischen Experiment und numerischer Simulation auf vier ausgewählten Profillinien, deren räumliche Lage auf der x-z-Ebene bei y = 0 in Abbildung 7.3 zu sehen ist. Entlang aller Profillinien kann eine gute qualitative Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation festgestellt werden. Dies bestätigt die obigen Erkenntnisse beim Vergleich der globalen Strömungsstruktur. Eine sehr gute quantitative Gleichheit der Ergebnisse zeigt sich vor allem in der Kernströmung. Abweichungen treten vorwiegend im Randbereich auf, wobei über die Güte der Messdaten in diesem Bereich keine Aussagen gemacht werden können. In der Summe kann eine sehr gute qualitative bzw. eine gute quantitative Ähnlichkeit in den Resultaten festgestellt werden.

Die gezeigten Ergebnisse lassen darauf schließen, dass das im Abschnitt 3.3 vorgestellte Modell, sehr gut zur Simulation von typischen ottomotorischen Strömungen geeignet erscheint. So zeigt der qualitative Vergleich der globalen Strömung und der räumlichen Verteilung der z-Komponente des Geschwindigkeitsvektors in der x-z-Ebene bei y = 0 eine gute Deckung. Der quantitative Vergleich entlang ausgewählter Profillinien zeigt gute bis sehr gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Hier liefern vor allem wandferne Bereiche überzeugende Ergebnisse. Die Erkenntnisse aus diesem Abschnitt, vor allem in Bezug auf die Gitterauflösung, werden für die Vernetzung der realen Motorgeometrien berücksichtigt.



Abbildung 7.6: Quantitative Gegenüberstellung von u_z entlang ausgewählter Profillinien zwischen Experiment und numerischer Simulation, vgl. Abbildung 7.3

7.2 Spraymodell

Die Berücksichtigung der direkten Kraftstoffeinspritzung in den Brennraum erfolgt mittels des Spraymodells aus Abschnitt 4.2. Als Versuchsträger für die Untersuchung dient die Druckkammer beim Projektpartner VW, in die der verwendete Injektor IHP2-79 der Firma Magneti Marelli integriert ist. Gegenstand der Analyse sind dabei die makroskopischen Eigenschaften des Sprays wie Penetration und Spraykegelwinkel. Diese können durch gezielte Änderung der Modellparameter angepasst werden.

7.2.1 Testfallbeschreibung

Die Nachbildung der Druckkammer entspricht einer geraden Kreiszylindergeometrie, die allseits mit starren Wänden abgeschlossen ist. Der Zylinder besitzt einen Durchmesser von d = 113 mm und eine Höhe von h = 200 mm, was den geometrischen Dimensionen der Druckkammer beim Projektpartner entspricht. Auf Grundlage der geometrischen Vorgaben wird mit dem OpenFOAM Werkzeug blockMesh ein blockstrukturiertes Gitter erzeugt, wobei der Injektor nicht explizit im Rechengitter enthalten ist. Abbildung 7.7 zeigt geometrische Details der Druckkammer und darüber hinaus die Oberflächenstruktur des Rechengitters.



(a) Geometrie der Druckkammer (b) Oberflächennetz

Abbildung 7.7: Geometrie und Rechengitter der Druckkammernachbildung

Weiterhin werden neben dem Rechengitter Rand- und Anfangsbedingungen für die numerische Simulation gebraucht. Tabelle 7.2 fasst die verwendeten Bedingungen an den jeweiligen Randflächen zusammen. Als Startbedingung für die CFD wurde ruhende Luft bei p = 1 bar und T = 300 K vorausgesetzt. Als Turbulenzmodell kommt das k- ω -SST-Modell zur Anwendung.

	T	p	u	k	ω
Deckel oben	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Mantelfläche	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Deckel unten	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Anfangsbedingung	\tilde{T} = 300 K	$\overline{p} = 1$ bar	$\tilde{u}_i = 0$	$k = 1 {\rm m}^2 / {\rm s}^2$	$\omega=200{\rm l/s}$

Tabelle 7.2: Rand- und Anfangsbedingungen für die Validierung des Spraymodells

Für das eigentliche Spraymodell sind weitere Informationen zur eingespritzten Masse und zur Tropfengrößenverteilung notwendig. Der zeitliche Verlauf des Massenstroms kann aus der Messung des Volumenstroms und der Kraftstoffdichte errechnet werden. Während des gesamten Einspritzvorgangs wird eine Kraftstoffmasse von $m_{KS} = 15,075$ mg in die Druckkammer eingespritzt. Die Tropfengrößenverteilung stammt aus Messungen, wobei die Messdaten mit einer Rosin-Rammler-Verteilungsfunktion mit den Formparametern $d_T = 16 \ \mu m$ und n = 1,8 angenähert wurde. Die Randbedingungen für das Spraymodell sind in Abbildung 7.8 dargestellt. Ein binäres Kraftstoffgemisch, bestehend aus iso-Oktan und n-Heptan mit den Volumenanteilen von 95% bzw. 5% in der Flüssigkeitsphase, wird vorausgesetzt. Das Gemisch liegt bei einer Temperatur von $T_{KS} = 373$ K während der Einspritzung vor.



Abbildung 7.8: Randbedingungen für die Spraymodellierung

7.2.2 Ergebnisse und Diskussion

Für den Vergleich zwischen Experiment und numerischer Simulation werden in dieser Arbeit die Penetration des Kraftstoffstrahls und dessen eingeschlossener Spraywinkel gewählt. Die Penetration ist hierbei definiert als der axiale Abstand der Spraywolke bei 95% der Kraftstoffmasse zum Düsenaustritt. Der Düsenaustritt liegt bei den Koordinaten x = 0, y = 0 und z = 200 mm. Der Spraykegelwinkel ist per Definition der Winkel, der vom Spray bei einem definiertem Abstand vom Düsenaustritt gebildet wird. Für den hier präsentierten Vergleich erfolgt die Berechnung des Spraywinkels bei einem axialen Abstand von 10 mm vom Düsenaustritt. Eine grafische Darstellung der Auswertegrößen ist in Abbildung 7.9 zu finden.



Abbildung 7.9: Schematische Darstellung von Penetration und Spraykegelwinkel

Zur Bestimmung von Penetration und Winkel aus der numerischen Simulation wird die Position der einzelnen Tropfenpakete zu diskreten Zeitpunkten herausgeschrieben und einem externen Auswerteschritt zugeführt. Die Berechnungen werden mit dem Programm MATLAB durchgeführt.

In der linken Bildhälfte von Abbildung 7.10 ist der zeitliche Verlauf der axialen Eindringtiefe als Vergleich zwischen Experiment und numerischer Simulation dargestellt. Zu Beginn der Einspritzung ist die Penetration des Kraftstoffes in das umgebende Fluid vom hohen Impuls geprägt. Nach ca. 0,8 ms nach Einspritzbeginn zeigt sich im Anstieg der Penetration ein anderes Verhalten, was auf den zunehmenden Verdampfungseinfluss zurückzuführen ist. Hierbei wird durch Abbildung 7.10 (a) deutlich gezeigt, dass das Spraymodell in OpenFOAM sehr gut das unterschiedliche Verhalten des Sprays im Vergleich mit dem Experiment wiedergeben kann.



Abbildung 7.10: Gegenüberstellung ausgewählter Sprayeigenschaften von Experiment und numerischer Simulation

Als weitere Vergleichsgröße wird der durch den Kraftstoffstrahl eingeschlossene Winkel in 10 mm Entfernung vom Düsenaustritt betrachtet. Die Ergebnisse zum Vergleich zwischen Experiment und CFD sind in Abbildung 7.10 (b) dargestellt. Zu Beginn der Einspritzung ist der Winkel sowohl im Experiment als auch in der Simulation 0, was daran liegt, dass der Spray noch nicht bis zu einer Entfernung von 10 mm penetriert ist, Abbildung 7.10 (a). Nach ca. 0,35 ms erreicht das Spray die 10 mm, wobei die experimentellen Daten einen stärkeren zeitlichen Anstieg des Winkels als die Simulation aufweisen. Ab 0,5 ms erreicht der Winkel im Experiment einen nahezu stationären Zustand bei $\alpha = 80^{\circ}$, bis er dann bei 1,3 ms beginnt zu fallen. Der errechnete Winkel aus der numerischen Simulation erreicht den stationären Zustand auf ähnlichem Niveau wie das Experiment nach 0,8 ms und zeigt in diesem Zeitraum eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Es zeigt sich weiter, dass der Winkel in der Simulation auch noch nach dem Abfall im Experiment auf dem hohen Niveau verbleibt. Hierbei erscheint der Abfall wenig plausibel, denn die Einspritzung erfolgt deutlich länger als 1,4 ms, vgl. Abbildung 7.8 (a). Somit zeigt die Simulation einen schlüssigeren Verlauf. Eine Fehlerbetrachtung des Experiments kann an dieser Stelle nicht erfolgen, da dem Autor keine Kenntnisse über die Durchführung der Versuche vorliegen.

Da in der späteren Motorsimulation über ein größeres Zeitfenster (ca. 6,3 ms) eingespritzt wird, kommt dem stationären Zustand eine größere Bedeutung zu, weshalb die Abweichung zu Beginn der Einspritzung als weniger kritisch betrachtet wird. Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation kann demnach für die nachfolgenden Betrachtungen als sehr gut angesehen werden.

Die Ergebnisse zum Vergleich des Spraymodells zeigen eindeutig, dass das in Kapitel 4 zusammengetragene Spraymodell sehr geeignet ist, das makroskopische Verhalten des Kraftstoffsprays vorherzusagen. Sowohl Penetration als auch der Spraykegelwinkel weisen eine hohe Deckung mit experimentellen Daten auf.

7.3 Verifikation des Gesamtmotormodells

7.3.1 Testfallbeschreibung

In den beiden vorangestellten Abschnitten 7.1 und 7.2 kann gezeigt werden, dass die Modelle zur Beschreibung der turbulenten Strömung respektive der Gemischbildung sehr gut mit experimentellen Daten übereinstimmen. Das folgende Kapitel soll nun zeigen, dass auch das Gesamtmodell den Anforderungen genügt, wozu ein Vergleich mit dem Simulationstool VECTIS, das beim Projektpartner VW zum Einsatz kommt, vorgenommen wird. Das Ziel dieses Vergleiches ist die Überprüfung der Anwendbarkeit von OpenFOAM im Bereich der Modellierung von Motorinnenprozessen. Die Vorgehensweise entspricht dem beschriebenen Ablauf im Abschnitt 6.3 auf Seite 52.

Benennung	Wert	Einheit
Hub	80	cm
Bohrung	$74,\!5$	cm
Pleuellänge	140	cm
Kurbelwellenradius	40	cm
maximaler Ventilhub	9	mm
geometrisches Verdichtungsverhältnis	9,2	-
Einlass öffnet	347	°KW n. ZOT
Einlass schließt	565	°KW n. ZOT
Auslass öffnet	151	°KW n. ZOT
Auslass schließt	359	°KW n. ZOT
Einspritzbeginn	440	°KW n. ZOT
Einspritzende	497	°KW n. ZOT
Kraftstofftemperatur	353	К
Einspritzmenge	$65,\!5$	mg

Tabelle 7.3: Geometrische Daten und Betriebsdaten für den Vergleichsfall

Der folgende Testfall stellt für die im nächsten Kapitel gezeigten Parametervariationen die Grundlage dar, weshalb an dieser Stelle eine ausführliche Präsentation und Diskussion erscheint.

Grundlage für den hier betrachteten Testfall ist ein 1,4 l
 TSI Vierzylindermotor von VW /38/. Hierbei ist zu beachten, dass nur ein Zylinder in der numerischen Simulation betrachtet wird. Der Motor besitzt sowohl eine mechanische als auch eine Turbo-Aufladungsstufe, wobei der mechanische Kompressor im unteren Drehzahlbereich zur Anwendung kommt. Der Zylinder weist eine Bohrung von d = 74,5 mm sowie einen Hub von s = 80 mm auf. Das geometrische Verdichtungsverhältnis des Zylinders beträgt $\epsilon = 9,2$. Der untersuchte Lastpunkt liegt bei einer Drehzahl von $n = 1500 \, \text{l/min}$ und einem Drehmoment von $M_D = 229$ Nm. Die geometrischen Grunddaten sowie die Leistungsdaten sind in Tabelle 7.3 zusammengefasst. Hierin bezieht sich die Lage der Steuerzeiten auf den ZOT vom vorherigen Arbeitsspiel. Diese Notation wird ab jetzt beibehalten.

Abbildung 7.11 zeigt auf der linken Bildhälfte die Geometrie des hier verwendeten Zylinders mit der Bezeichnung der einzelnen Randflächen. Auf der rechten Seite ist die aus der Geometrie abgeleitete Gitterstruktur dargestellt, hierbei wurde für die Gittererstellung wieder auf ANSYS ICEM CFD



Abbildung 7.11: Geometrie und Rechengitter für den Referenzfall

zurückgegriffen.



Abbildung 7.12: Instationärer Massenstromverlauf am Einlass- bzw. Auslasskanalquerschnitt

Für alle in Abbildung 7.11 aufgezeigten Randflächen sind Informationen für die bilanzierten Zustandsgrößen bereit zu stellen. Eine Übersicht der verwendeten RB und AB für den Referenzfall zeigt Tabelle 7.4. Am Einlassrand wird der instationäre Massenstrom in diesem Querschnitt vorgegeben, woraus sich dann unter Kenntnis der Dichte die Geschwindigkeit ergibt. Die Dichte des Fluids errechnet sich aus der Temperatur, dem Druck und der Zusammensetzung, wobei das Fluid im Auslass als trockene Luft angesehen wird. Für den Auslassquerschnitt wurde auf ähnliche Weise verfahren. Der zeitliche Verlauf des Massenstroms am Einlass- bzw. Auslasskanalquerschnitt zeigt Abbildung 7.12.

Die Turbulenzvariablen k und ω werden durch den Turbulenzgrad Tu und die Mischungslänge l bestimmt. Die jeweiligen Temperaturen an den Randflächen beruhen auf den VECTIS Einstellungen sowie auf Erfahrungswerten beim Projektpartner. Die Verschiebungen der bewegenden Randflächen wie den Ventilen und dem Kolben ergeben sich aus den Ventilhubkurven bzw. aus den geometrischen Daten des Motors.

Zum Startzeitpunkt der Rechnung müssen für die Zustandsgrößen Initialwerte vorgegeben wer-

	T	p	u	k	ω
Einlass	$\tilde{T}=311~{\rm K}$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\dot{m}_{ein}=f(t)$	Tu=5~%	l = 0.00182 m
Einlasskanal	\tilde{T} = 363 K	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Ladungsbewegungsklappe	$\tilde{T} = 363 \text{ K}$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Einlassventile	$\tilde{T} = 423 \text{ K}$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Zylinderkopf	$\tilde{T} = 573 \text{ K}$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Kolben	$\tilde{T}=473~{\rm K}$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Auslassventile	$\tilde{T} = 773 \text{ K}$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Auslass	$\operatorname{grad}(\tilde{T}) = 0$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\dot{m}_{aus} = f(t)$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Auslasskanal	$\tilde{T}=723~{\rm K}$	$\operatorname{grad}(\overline{p}) = 0$	$\tilde{u}_i = 0$	$\operatorname{grad}(k) = 0$	$\operatorname{grad}(\omega) = 0$
Anfangsbedingung/Einlass Anfangsbedingung/Auslass	$\begin{array}{l} \tilde{T}=311~\mathrm{K}\\ \tilde{T}=978~\mathrm{K} \end{array}$	$\overline{p} = 2,57$ bar $\overline{p} = 1,25$ bar	$\begin{array}{l} \tilde{u}_i = 0 \\ \tilde{u}_i = 0 \end{array}$	$k = 10^{-4} \mathrm{m^2/s^2}$ k = 10^{-4} \mathrm{m^2/s^2}	$ \begin{aligned} \omega &= 1 {}^{1/s} \\ \omega &= 1 {}^{1/s} \end{aligned} $

Tabelle 7.4: Rand- und Anfangsbedingungen für die Verifikation des Gesamtmodells an Vectis

den, wobei die Schwierigkeit für die meisten Größen darin besteht, diese Werte aus Experimenten zu gewinnen. Im Abschnitt 6.2 auf Seite 51 wird bereits auf die verwendete Strategie eingegangen, die zur Bestimmung der Anfangsbedingungen zur Anwendung kommt. Da die Einlassventile zum Startzeitpunkt geschlossen sind, werden die Bereiche Einlasskanal und Auslasskanal bzw. Zylinder mit unterschiedlichen Anfangswerten initialisiert. Der Einlasskanal ist komplett mit trockener Luft gefüllt, während im Zylinder und Auslasskanal vollständig umgesetztes Abgas vorliegt. Alle übrigen Anfangsbedingungen finden sich in Tabelle 7.4, aufgeteilt in diese zwei Bereiche.

7.3.2 Ergebnisse

Der Vergleich zwischen den Simulationswerkzeugen erfolgt anhand zylindergemittelter Größen, wie z.B. Druck und Temperatur. Hierzu werden die Zustandsgrößen aller Zellen, die den Zylinder bilden, räumlich gemittelt und zu diskreten Zeitschritten in eine ASCII-Datei geschrieben. Die gemittelten Größen ergeben sich aus dem Produkt der Zellmasse m_i multipliziert mit dem Wert der Zustandsgröße ϕ_i in der Zelle, dividiert durch die Fluidmasse im Zylinder m_{zyl} zu

$$\phi_{zyl} = \frac{1}{m_{zyl}} \sum_{i=1}^{N} \phi_i \cdot m_i.$$
(7.1)

Den zeitlichen Verlauf vom massegemitteltem Zylinderdruck und -temperatur für drei Simulationswerkzeuge, einem 1D-Solver (GT-Power), OpenFOAM und Vectis, zeigt die Abbildung 7.13 in Bild (a) bzw. (b). Hierin ist zu erkennen, dass der mittlere Zylinderdruck von OpenFOAM und VECTIS sehr gut übereinanderliegen. Das Überschwingen um den LWOT, was aus dem hohen Druckgefälle zwischen Einlasskanal und Zylinder resultiert, wird durch OpenFOAM erfolgreich abgebildet. Dies wird in der Zoomansicht in Abbildung 7.13 (a) klar ersichtlich. Im ZOT liegt der Enddruck von OpenFOAM und VECTIS nahezu übereinander und erreicht einen Wert von 49,3 bar, während der Kompressionsenddruck des 1D-Solvers ca. 46,3 bar erreicht.

Der Vergleich der Zylindertemperatur in Abbildung 7.13 (b) dokumentiert ebenfalls eine gute Übereinstimmung zwischen den verschiedenen Werkzeugen. Hierbei treten die größten Abweichungen bei der Einlassventilsteuerzeit Einlass öffnet (EÖ) auf, was an der unterschiedlichen Behandlung dieses Ereignisses in den einzelnen Codes liegt. So ist in OpenFoam der Einlasskanal bereits zum Startzeitpunkt der Simulation in der Rechendomain vorhanden. Massen-, Impuls- und Enthalpieströme aus dem Einlasskanal in Richtung Zylinder oder vice versa werden hierbei durch eine Wand bis EÖ verhindert. Im Gegensatz dazu wird in VECTIS zum Zeitpunkt EÖ der Einlasskanal sowie der Ventilspalt im Zylinder in die Rechendomain integriert, woraus der starke Gradient in Abbildung 7.13 (b) resultiert. Zu Beginn der Ladungswechselphase liegen OpenFOAM und VECTIS dicht beieinander, während der 1D-Solver deutlich höhere Temperaturen aufweist. Am LWUT lassen sich nur geringe Differenzen zwischen den verschiedenen Programmen feststellen. Die Kompressionsendtemperatur demonstriert keine großen Abweichungen zwischen OpenFOAM und VECTIS auf der einen und GT-Power auf der anderen Seite.



Abbildung 7.13: Zeitlicher Verlauf ausgewählter, zylindergemittelter Größen jeweils berechnet mit einem 0D-Solver, OpenFOAM und VECTIS

Weitere Vergleichsgröße zwischen OpenFOAM und VECTIS sind die gesamte Zylindermasse, die Luftmasse und die verdampfte Kraftstoffmasse im Zylinder, s. dazu Abbildung 7.14. In der oberen Bildhälfte zeigt sich der zeitliche Verlauf der Zylinder- und der Luftmasse von OpenFOAM und VECTIS. Es ist deutlich zu sehen, dass nur geringe Abweichungen im Vergleich der Werkzeuge bestehen, so dass sich die Gegenüberstellung als sehr gut präsentiert.

Den instationären Verlauf der zugeführten, verdampften Kraftstoffmasse zeigt das untere Bild von Abbildung 7.14. Da der Kraftstoff erst bei 440°KW n. ZOT als Spray in den Brennraum gelangt, erfolgt die Zunahme der verdampften Kraftstoffmasse bei 450°KW n. ZOT. Hierbei kann ein Unterschied im zeitlichen Anstieg zwischen OpenFOAM und VECTIS festgestellt werden. Dies kann daran liegen, dass die Eigenschaften des betrachteten Kraftstoffs gerade in Bezug auf die Verdampfung abweichen, denn während in OpenFOAM der Kraftstoff als Zweikomponentenkraftstoff aus iso-Oktan und n-Heptan verwendet wird, nutzt VECTIS als Modellkraftstoff Indolen. Weitere Abweichungen ergeben sich bei den verwendeten Modellen in den einzelnen Simulationswerkzeugen.

Aus den präsentierten Ergebnissen lässt sich die Schlussfolgerung ableiten, dass das Simulationswerkzeug OpenFOAM ebenso gut wie VECTIS für die Modellierung von Motorinnenprozessen geeignet erscheint. Trotz kleinerer Abweichungen in den Resultaten ist der Vergleich sehr erfolgreich verlaufen, wenn die bestehenden Unterschiede zwischen den einzelnen Programmen in Betracht gezogen werden:



Abbildung 7.14: Zeitlicher Verlauf von Zylindermasse, Luftmasse und verdampfter Kraftstoffmasse jeweils berechnet mit OpenFOAM und VECTIS

- räumliche Diskretisierung,
- numerische Behandlung von Randflächen,
- unterschiedlich verwendete Untermodelle und
- allgemeine numerische Differenzen.

Das in diesem Abschnitt erfolgt verifizierte Gesamtmodell in OpenFOAM dient als Grundlage für die im nächsten Kapitel vorgestellten Parametervariationen. Hierbei werden die in Abschnitt 1.2.4 diskutierten Einflussfaktoren hinsichtlich ihrer Begünstigung von Vorentflammungen untersucht.

7.4 Zusammenfassung

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Validierung der Teilmodelle, d.h. dem Strömungs-, Spraysowie dem Gesamtmodell. Auf Grund der im Rahmen dieses Projekts zur Verfügung stehenden Zeit wird das Partially-Stirred-Reactor-Modell zur Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktion nicht validiert. Vielmehr wird den Ausführungen in der Literatur zu dessen Eignung, die Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen zu detektieren, vertraut.

Das Strömungsmodell kann im Vergleich zu experimentellen PIV-Daten zeigen, dass es gut geeignet ist, die wesentlichen Strukturen im Zylinder wieder zu geben. Dies lässt sich sowohl anhand des Vergleichs globaler Strömungsstrukturen aber auch auf ausgewählten Profillinien dokumentieren. Neben einer sehr guten qualitativen ist auch eine teilweise gute quantitative Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment vorhanden.

Das Spraymodell wird im Rahmen dieser Arbeit mit experimentellen Daten aus einer Druckkammer verglichen. Hierbei kann eine sehr gute Deckung der Simulationsdaten mit der Messung einerseits für die Penetration und für den stationären Zustand des Spraykegelwinkels festgestellt werden.

Für die Verifikation des Gesamtmodells stehen Simulationsdaten von VECTIS und GT-Power zur Verfügung. Es zeigt sich, dass das Gesamtmodell in OpenFOAM eine äußerst zufriedenstellende Übereinstimmungen mit VECTIS und, sofern vorhanden, mit GT-Power aufweist. Somit kann der Schluss gezogen werden, dass das Modell zur Beschreibung der Motorinnenprozesse sehr gut geeignet erscheint, um damit die im nächsten Kapitel diskutierten Parametervariationen durchzuführen.

8 Präsentation und Diskussion der Parametervariation

In diesem Kapitel erfolgt die Präsentation und Diskussion der Ergebnisse zu den Variationsrechnungen, die mittels 3D-CFD-Simulation berechnet werden. Hierfür kommt erstmals detaillierte Chemie, gekoppelt mit einer hochauflösenden 3D-CFD, zum Einsatz, um die Sensitivität ausgewählter Parameter auf ihre Vorentflammungsbegünstigung hin zu untersuchen.

Die Auswahl der Parameter beruht auf einer umfangreichen Literaturrecherche sowie reaktionskinetischen Untersuchungen mittels 0D-Reaktorsimulationen. Als ein möglicher Einflussfaktor wird die Auslassventil- und Zündkerzentemperatur angesehen. Diese stellen im Brennraum die höchsten Bauteiltemperaturen dar und können so die Ausbildung von Vorentflammungen begünstigen. Ein weiterer möglicher Einflussfaktor ist in den Brennraum eingeführtes Schmieröl, das auf Grund seiner chemischen Struktur die Ausbildung hochreaktiver Zentren begünstigen kann. Für die Analyse der Einflüsse wird folgende Vorgehensweise gewählt.

Zunächst werden im Abschnitt 8.1 die Methodik der Parametervariation und die Kriterien zur Beurteilung der Selbstzündung erläutert. In den Abschnitten 8.2, 8.3, 8.4, 8.5 und 8.6 werden die Ergebnisse zu den einzelnen variierten Parametern vorgestellt. Sollten spezifische Besonderheiten in den Falleinstellungen auftreten, wird auf diese in dem jeweiligen Kapitel hingewiesen.

8.1 Methodik

Die vorliegende Arbeit soll durch /18/ numerische Untersuchungen neue Erklärungsansätze für Vorentflammungen identifizieren und dabei einen tieferen Einblick in die Selbstzündungsvorgänge im direkteinspritzenden hochaufgeladenen Ottomotor schaffen. In der Literatur finden sich bereits mögliche Erklärungsansätze für das Entstehen von Vorentflammungen, die jedoch vorrangig durch Experimente und 0D-Reaktoruntersuchungen erzielt wurden [/19/, /33/ /47/, /77/, /79/, /80/], vgl. Abschnitt 1.2.4 auf Seite 11 ff. In dieser Arbeit sollen die in der Literatur gefundenen potentiellen Auslöser ausschließlich mit numerischen Methoden untersucht werden.

Im Kapitel 3 wird dazu ein mathematisches Modell präsentiert, das die Beschreibung turbulenter Strömungen reaktiver Fluide erlaubt. Eingebettet ist neben einem Spraymodell (s. Kapitel 4) für die Darstellung der Kraftstoffeinspritzung, ein Modell zur direkten Kopplung detaillierter Reaktionskinetik mit einer hochauflösenden 3D-CFD-Simulation, vgl. Abschnitt 5.3.1 auf Seite 43 ff. Dem Anwender steht mit dem vorgestellten Modell ein Werkzeug zur Verfügung, welches gestattet, einen genauen Einblick in die physikalisch-chemischen Vorgänge innerhalb des Brennraums eines Ottomotors zu erlangen. Die Anwendung des vorgestellten Chemie-Turbulenz-Ansatzes mit detaillierter Chemie zur Untersuchung von Vorentflammungsphänomenen stellt eine Innovation dar, wodurch neue wissenschaftliche Erkenntnisse erbracht werden können. Diese helfen das Verständnis über Vorentflammungen zu erweitern und neue Verbrauchseinsparpotentiale mit dem Downsizing-Konzept zu erschließen.

Zur Beschreibung der chemischen Vorgänge wird ein detaillierter Mechanismus für die Verbrennung von iso-Oktan und n-Heptan in Luft verwendet /1/, der sich aus 304 Spezies und 3158 Reaktionen zusammensetzt. Dieser kann mit Hilfe von Sensitivitätsstudien in 0D-Reaktoruntersuchungen soweit reduziert werden, dass nur noch die Niedertemperaturchemie Bestandteil des Mechanismus ist. Bei der Reduktion wird darauf geachtet, dass der Anstieg des Hydroxyl-Radikals OH zwischen dem kompletten und dem reduzierten Mechanismus zum Zeitpunkt der Zündung übereinstimmt, vgl. Abbildung 8.1, denn der erste signifikante Anstieg von OH hat in jedem Fall eine Selbstzündung zur Folge. Es zeigt sich weiterhin in Abbildung 8.1, dass die Quantität der berechneten Größen durch den reduzierten Mechanismus ungenügend wiedergegeben wird, was besonders deutlich bei der Temperatur erkennbar ist. Dies wird aber bewusst in Kauf genommen, um die Gesamtanzahl an Spezies und Reaktionen zu reduzieren. Das Ergebnis des Reduktionsprozesses ist ein Mechanismus, bestehend aus 176 Spezies und 280 Elementarreaktionen /18/.



Abbildung 8.1: Vergleich des kompletten und reduzierten chemischen Mechanismus

Der Auswahlprozess für die zu untersuchenden Parameter beruht auf der ausführlichen Literaturstudie, s. Abschnitt 1.2.4, sowie den umfangreichen 0D-Reaktorsimulationen, deren Ergebnisse teilweise in Abschnitt 1.2.1 gezeigt wurden. So ist z.B. die Auslassventiltemperatur ein möglicher fördernder Einflussfaktor für Vorentflammungen, da sie die Bildung von Hot-Spots im Brennraumgas bedingen kann. Um die Auswirkung der einzelnen Parameter zu beurteilen, wird ein Referenzfall eingesetzt, der auf der Vergleichsstudie zwischen OpenFOAM und VECTIS beruht. Hier konnte der Nachweis erbracht werden, dass über den gesamten Kompressions- sowie des Teils des Arbeitstaktes keine Vorentflammung auftritt.

Jeder ausgewählte Parameter wird in einem ersten Schritt mit den für Vorentflammungen begünstigenden Bedingungen untersucht. Sollte dabei eine spontane Selbstzündung auftreten, wird die Bedingung in einem nächsten Schritt in Bezug auf eine Vorentflammung ungünstiger gestaltet, bis keine Selbstzündung mehr auftritt. Somit können gezielt Grenzen für den Motorbetrieb gefunden und mögliche Gegenmaßnahmen entwickelt werden.



(c) T = 650K, p = 50bar (d) T = 700K, p = 50bar

Abbildung 8.2: Berechneter zeitlicher Verlauf von Temperatur, OH- und CO₂-Massenbruch in vier ausgewählten Zustandspunkten bei $\lambda\,=\,1$

Um festzustellen, ob eine Vorentflammung auftritt oder nicht, werden vorrangig die Massenbrüche bestimmter Spezies verwendet, die charakteristisch für die Zündung von Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischen sind. Hierzu zählt das Radikal OH und die stabile Spezies Kohlenstoffdioxid CO_2 , s. dazu Abbildung 8.2. Die Ergebnisse basieren auf 0D-Reaktorsimulationen mit Cantera und den Vorgaben:

- detaillierter Reaktionsmechanismus für die Verbrennung von iso-Oktan/n-Heptan-Luft-Gemischen,
- $\lambda = 1$,
- isochore Zustandsänderung und
- vier unterschiedlichen thermodynamischen Zuständen.

Sowohl OH als auch CO_2 weisen zum Zeitpunkt der Zündung einen großen Gradienten auf, so dass beide Spezies als Kriterium für eine Selbstzündung prädestiniert sind. Abbildung 8.2 weist nach, dass die Temperatur auch geeignet wäre eine Selbstzündung zu detektieren. Aus dem Vergleich von Abbildung 8.1 und 8.2 zeigt sich jedoch, dass der Hochtemperaturbereich nicht mehr Bestandteil des reduzierten Reaktionsmechanismus ist, weshalb ein starker Temperaturanstieg, nicht zu erwarten sein wird. Eine Selbstzündung liegt dann vor, wenn sowohl OH als auch CO_2 einen signifikanten Anstieg aufweisen. Um eine Vorentflammung in der 3D-CFD-Simulation zu detektieren, muss sowohl ein merklicher Anstieg des OH- und als auch des CO_2 -Massenbruchs in mehreren Rechenzellen auftreten.

Die direkte Kopplung von detaillierter reduzierter Chemie und 3D-CFD wird ab dem Zeitpunkt vorgenommen, ab dem die Einlassventile geschlossen sind, d.h. Einlass schließt (ES) bei 565°KW n. ZOT¹, und der Brennraum ein geschlossenes System bildet. Hierbei wird davon ausgegangen, dass der thermodynamische Zustand bis zu diesem Zeitpunkt nicht ausreicht, um chemische Reaktionen ausreichend schnell ablaufen zu lassen. Erst in der Kompressionsphase ist der thermodynamisch-chemische Zustand des Fluids im Brennraum soweit aufbereitet, dass ein merklicher Umsatz an Kraftstoff stattfindet. Dies konnte durch eine 3D-CFD-Simulation der Ladungswechselphase bis ES und anschließenden 0D-Reaktorsimulationen gezeigt werden, deren Ergebnisse aber nicht im Fokus dieser Arbeit liegen.

Die Startwerte der Bilanzgrößen für die Parametervariation ergeben sich aus einer 3D-CFD-Simulation der Ladungswechselphase sowie der Gemischaufbereitung bis ES.

Die numerischen Simulationen werden bis zu einer Kolbenstellung von 740°KW n. ZOT durchgeführt, was dem sehr späten Zündwinkel bei dem hier untersuchten Betriebspunkt Rechnung trägt. Sollte bis zum Endzeitpunkt der Simulation keine erhöhte Reaktivität auftreten, liegt keine Vorentflammung bei dem jeweiligen Parameter vor.

Für die Darstellung der Ergebnisse werden in den nächsten Abschnitten, die folgenden Ansichten verwendet:

- Draufsicht auf die Zylinderkopffläche
- x-z-Ebene durch die Einlassventilachse bei y = 0.017 m
- x-z-Ebene durch die Einlassventilachse bei y = -0.017 m, s. Abbildung 8.3.

Sollten andere Auswerteebenen verwendet werden, wird in dem jeweiligen Abschnitt darauf eingegangen.



Abbildung 8.3: Ausgewählte Darstellungsebenen für die Auswertung

 $^{^1\}mathrm{Es}$ sei nochmal darauf hingewiesen, dass sich die Angabe des Kurbelwellenwinkels auf den ZOT vom vorherigen Arbeitsspiel bezieht.

8.2 Oberflächentemperatur der Auslassventile

Auslassventile stellen in der Regel neben der Massenelektrode der Zündkerze die heißesten Bauteile innerhalb des Brennraums dar. Sie führen daher zu einer Aufwärmung des umgebenden Fluids, was in einer höheren Reaktivität dieser Fluidballen resultiert. Da die Auslassventile somit als potentielle Förderer von Vorentflammungen in Frage kommen, widmet sich der nachfolgende Abschnitt der Analyse ihres Einflusses auf die Vorentflammungsneigung.

Ausgehend von den sonstigen Vorgaben, vgl. Abschnitt 7.3 auf Seite 65 ff, wird nun die Auslassventiltemperatur über die gesamte Oberfläche um 200 K auf $T_{AV} = 973$ K erhöht. Dieser Wert bleibt über die Berechnung konstant. Alle anderen Rand- und Anfangsbedingungen entsprechen den Vorgaben in Tabelle 7.4 auf Seite 67. Für die Berechnung einer möglichen Grenztemperatur für die Auslassventile wird der folgende Algorithmus verwendet. Sollte bei der eben genannten Auslassventiltemperatur eine Selbstzündung im betrachteten Kurbelwellenwinkelbereich auftreten, wird diese um den halben Wert der Erhöhung von 200 K herabgesetzt und die Rechnung erneut gestartet. Tritt für die neu untersuchte Oberflächentemperatur keine Vorentflammung auf, dann erfolgt eine Erhöhung um den halben Wert. Dies erfolgt solange, bis keine Vorentflammung mehr detektiert wird. Auf diesem Wege kann zielgerichtet die Grenze für die niedrigste Temperatur der Auslassventile für die untersuchten Randbedingungen ermittelt werden, bei der es zu keiner Vorentflammung mehr kommt.

Tritt bei $T_{AV} = 973$ K keine VE auf, erfolgt eine weitere Anhebung der Auslassventiltemperatur.

Der nächste Untersuchungspunkt betrifft die Einflussanalyse der Temperaturverteilung über dem Auslassventilteller. Auf Grund der Temperaturverhältnisse im Bereich der Auslassventile wird eine radiale Temperaturverteilung erwartet. Um dies nachbilden zu können, wird die Temperatur, ausgehend vom Zentrum des Ventiltellers radial nach außen hin verkleinert. Interessant ist hierbei vor allem der Vergleich mit der Rechnung einer gleich verteilten Auslassventiltemperatur.

Startpunkt für die Berechnungen ist 565°KW n. ZOT, der Zeitpunkt des Ventilschließens. Bestandteil der Simulation sind der gesamte Kompressions- und ein Teil des Arbeitstaktes bis 740°KW n. ZOT. Um die in der 3D-CFD-Simulation berechneten Größen, wie z.B. Druck und Temperatur, dem nachgeschalteten Post-Processing zuzuführen, werden diese alle ein Grad Kurbelwellenwinkel aufgezeichnet. In den nächsten beiden Teilabschnitten erfolgt die Darstellung der wesentlichen Ergebnisse.

8.2.1 Auslassventiltemperaturvariation

Zunächst sollen hier die Ergebnisse zur Rechnung mit einer Auslassventiltemperatur von $T_{AV} = 973$ K vorgestellt werden. Die Temperatur wird als gleich verteilt über die Auslassventiloberfläche angenommen. Die ursprüngliche Temperatur der Ventile war $T_{AV} = 773$ K, was den VECTIS Randbedingungen entspricht.

Als erstes Kriterium zur Detektion einer Vorentflammung erfolgt an dieser Stelle die Diskussion über die räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs zu verschiedenen Kurbelwellenwinkeln. Hierzu zeigt Abbildung 8.4 in der oberen Bilderserie die zeitliche Entwicklung von OH in der Draufsicht auf den Zylinder. Bereits bei 10°KW vor dem Zündtotpunkt ist eine deutlich erhöhte Reaktivität im Bereich der Auslassventile gegenüber der Umgebung zu sehen. In den nachfolgenden Bildern der oberen Reihe lässt sich die weitere Ausbreitung der Reaktionszone gut erkennen. Hierbei werden auch Bereiche zwischen den Auslassventilen und der Zündkerze von den Vorreaktionen erfasst. Bei



740°KW n. ZOT ist ein Erlöschen der erhöhten Reaktivität festzustellen, was daran liegt, dass durch die Abwärtsbewegung des Kolbens die Temperatur und der Druck sinken.

Abbildung 8.4: Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellungen im Fall $T_{AV} = 973$ K; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

In der zweiten und dritten Reihe von Abbildung 8.4 ist die zeitliche Entwicklung des OH-Massenbruchs in der x-z-Ebene bei y = 0,017 m bzw. der x-z-Ebene bei y = -0,017 m dargestellt. Hierin ist klar ersichtlich, dass der Beginn der Selbstzündung im Spalt zwischen Auslassventil und Zylinderkopf stattfindet. Von da aus breitet sich die Reaktionsfront bei späteren Kurbelwellenwinkeln weiter in den Brennraum aus, wobei die Reaktionsfront als schmaler Streifen mit erhöhtem OH das Kraftstoff-Luft-Gemisch durchläuft. Die Reaktionszone erreicht sowohl den Kolben als auch die Laufbuchse in der Nähe des Feuerstegs. Nach dem Durchqueren der Reaktionsfront sinkt der OH-Massenbruch wieder ab und verbleibt danach auf relativ niedrigem Niveau.

Ein ähnliches Bild, jedoch mit zeitlicher Differenz, weist die räumliche und zeitliche Verteilung des zweiten Entscheidungskriteriums, dem CO₂-Massenbruch, auf (Abbildung 8.5). Im ersten Teilbild bei 710°KW n. ZOT und in allen Ansichten zeigt sich bereits ein beträchtlicher Anteil an CO₂ im Brennraum. Jenes stammt als Restgasanteil aus dem vorherigen Arbeitsspiel. Bei 720°KW n. ZOT ist in der Draufsicht eine deutliche Steigerung des CO₂-Gehalts im Bereich der Auslassventile zu erkennen, wobei sich der Anstieg schon sehr großflächig zeigt. Bei 730 und 740°KW n. ZOT findet die weitere Ausbreitung von CO₂ in Richtung der Brennraummitte und der Laufbuchse statt. Anders als OH liegt CO₂ nach dem Durchschreiten der Reaktionsfront als Verbrennungsprodukt auf einem augenscheinlich höheren Niveau im Brennraum vor.

Die zeitliche Differenz beim Anstieg des OH- und CO₂-Massenbruchs zu Beginn der Selbstzündung kann für den reduzierten Mechanismus auch in 0D-Reaktorsimulationen festgestellt werden. In der 3D-CFD-Simulation wird dieser Effekt zusätzlich durch Berücksichtigung von Mischungsvorgängen



beeinflusst. Somit erscheint es durchaus plausibel, dass die verwendeten Kriterien einen unterschiedlichen zeitlichen Verlauf aufzeigen.

Abbildung 8.5: Räumliche Verteilung des CO₂-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellungen im Fall $T_{AV} = 973$ K; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

Aus den gezeigten Ergebnissen zur Verteilung von OH und CO_2 lässt sich festhalten, dass eine Vorentflammung auftritt, sofern es zu einer Erhöhung der Auslassventiltemperatur um 200 K kommt, da beide ausgewählte Kriterien als positiv hinsichtlich einer Vorentflammung bewertet werden konnten.

Da die zeitliche Entwicklung der Reaktionsfront im Fall von OH und CO₂ unterschiedlich ausfällt, erfolgt nun die Darstellung der zeitlichen und räumlichen Entwicklung der Fluidtemperatur im Brennraum, Abbildung 8.6. Somit lässt sich der Selbstzündwinkel genauer bestimmen. Erste deutlich höhere Gastemperaturen sind im engen Ventilspalt bei 710°KW n. ZOT in der Draufsicht und den Schnittebenen ansatzweise erkennbar. Hieraus breitet sich die Temperatur entlang der Auslassventilteller in Richtung Brennraum aus, 720°KW n. ZOT. 10°KW nach dem oberen Totpunkt sind bereits große Bereiche unterhalb der Auslassventile vom Temperaturanstieg erfasst. Zum späteren Zeitpunkt ist der Einfluss der Entspannung auf die Temperatur zu erkennen, weshalb die Fluidtemperatur abzufallen beginnt.

Beim Vergleich der Abbildungen 8.5 und 8.6 lässt sich eine große Ähnlichkeit im zeitlichen und räumlichen Ausbreitungsverhalten von Kohlenstoffdioxid sowie der Temperatur feststellen. Dabei resultiert aus der Selbstzündung nur ein geringer Temperaturanstieg, was als Folge aus dem Reduzierungsprozess des chemischen Reaktionsmechanismus hervorgeht. Dies liegt jedoch in guter Übereinstimmung mit der Aufgabenstellung der Arbeit den Selbstzündbeginn abzubilden.

Um die Entstehung und den Fortgang einer Vorentflammung genau zu analysieren, bietet sich die Darstellung von OH auf Iso-Flächen an, so dass die räumliche Struktur der Reaktionszone erkennbar wird, Abbildung 8.7. Hierin ist für 705°KW n. ZOT zu sehen, dass sich die Reaktionszone zunächst im



Abbildung 8.6: Räumliche Verteilung der Temperatur im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellungen im Fall $T_{AV} = 973$ K; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

Spalt zwischen Auslassventil und Zylinderkopf entwickelt und danach den Auslassventilteller erreicht. Die thermodynamischen und strömungsmechanischen Bedingungen im Spalt begünstigen somit die Vorentflammungsentwicklung, denn in diesem Bereich sind auf Grund der Strömungsverhältnisse die Geschwindigkeiten des Fluids sehr klein und somit die Verweilzeiten von Teilchen groß.

Die Teilbilder 710, 715 und 720°KW n. ZOT zeigen die weitere Ausbreitung der Reaktionsfront, wonach immer größere Teile der reaktiven Zone in Richtung Brennraummitte und Kolben fortschreiten. Bei 725°KW n. ZOT und den nachfolgenden Bildern bis 740°KW n. ZOT ist zu erkennen, dass die Reaktionszone immer breiter wird, sie große Teile der Auslassventilseite bereits okkupiert hat und sich in Richtung Einlasseite ausdehnt. Trotz der zu erwartenden anders verlaufenden Reaktionsfrontausbreitung bei Verwendung eines kompletten Reaktionsmechanismus, hilft die genaue Betrachtung der iso OH-Flächen ein Verständnis der ersten Flammenfrontbildung zu erlangen.

Die obigen Abbildungen 8.4 bis 8.7 stellen die räumliche und zeitliche Entstehung einer Vorentflammung für eine Auslassventiltemperatur von $T_{AV} = 973$ K dar. Die Frage ist nun, zu welchem Zeitpunkt die Vorentflammung genau detektiert ist. Da sich die Bewertungskriterien in der zeitlichen Abfolge unterschiedlich verhalten, können zwei Antworten für die Frage gegeben werden. Bei $T_{AV} = 973$ K ergibt sich der Vorentflammungszeitpunkt bei Betrachtung von OH zu 716°KW n. ZOT und für CO₂ zu 721°KW n. ZOT. In dieser Arbeit ist das entscheidende Kriterium für den Beginn einer Vorentflammung der CO₂-Massenbruch. Bei Betrachtung der Temperatur ergibt sich ein Selbstzündwinkel von 719°KW n. ZOT. Die Differenz im Beginn der Selbstzündung kann auch in 0D-Reaktorsimulationen mit dem reduzierten Mechanismus festgestellt werden. Es erscheint somit plausibel, dass diese Differenz ebenfalls in der direkten Kopplung von 3D-CFD-Simulation und dem reduzierten Reaktionsmechanismus auftritt.



Abbildung 8.7: Struktur der Reaktionszone als OH-Isofläche im Brennraum zu verschiedenen Kurbelwellenwinkel

Für eine Auslassventiltemperatur von $T_{AV} = 973$ K konnte eine Vorentflammung erfolgreich bei 721°KW n. ZOT nachgewiesen werden, so dass die Auslassventiltemperatur sukzessive nach der in Abschnitt 8.1 beschriebenen Methode verringert worden ist. Auf eine detaillierte Ergebnisdarstellung wird an dieser Stelle verzichtet, da die physikalischen Effekte, die möglicherweise zu einer Vorentflammung führen würden, die gleichen sein werden, wie die bereits oben genannten. Vielmehr erfolgt die Zusammenfassung der Auslassventiltemperatur-Variation.

Das Ergebnis dieser Variation zeigt Abbildung 8.8, in der der Zündverzugswinkel, jeweils nach dem OH- bzw. dem CO₂-Kriterium bewertet, über die Auslassventiltemperatur aufgetragen ist. Hierin lässt sich erkennen, dass mit abfallender Temperatur die Selbstzündung in Richtung "spät" wandert, wobei die jeweiligen Kriterien einen unterschiedlich starken Gradienten zeigen. Während bei $T_{AV} = 973$ K die Differenz zwischen dem Induktionswinkel von OH und CO₂ nur 5°KW beträgt, weist die Differenz bei $T_{AV} = 923$ K bereits 17°KW auf. Auf Grund des zeitlichen Unterschieds verstärkt sich der Einfluss des Druck- und Temperaturabfalls im Arbeitstakt auf die chemischen Prozesse, so dass eine Zunahme der zeitlichen Differenz im Induktionswinkel von OH und CO₂ plausibel erscheint. Tendenziell bestätigt Abbildung 8.8 die Erwartung, dass mit abnehmender Temperatur die Induktionszeit anwächst und damit die Vorentflammungsneigung sinkt.

Zum Weiteren ist in Abbildung 8.8 zu sehen, dass bei einer Auslassventiltemperatur von 873 K nach dem OH-Kriterium eine Vorentflammung bei 729°KW n. ZOT, jedoch nach dem CO₂-Kriterium die Selbstzündung nicht mehr im betrachteten Zeitraum auftritt. Deshalb liegt die Grenze für Vorentflammungen unter den hier untersuchten Bedingungen bei $T_{AV} = 873$ K. Liegt die Auslassventiltemperatur im Wertebereich von [873, 973] K, kann eine mögliche Vorentflammung des Gemisches nicht ausgeschlossen werden. Durch zusätzliche Temperaturvariationen kann die hier festgestellte Grenztemperatur weiter angenähert werden, jedoch wird in dieser Arbeit auf Grund der Rechenzeiten davon abgesehen. Für eine Parameterrechnung und bei Verwendung des reduzierten chemischen Mechanis-



Abbildung 8.8: Induktionswinkel bewertet nach OH resp. CO₂ bei Variation der Auslassventiltemperatur

mus sind zwei Wochen Rechenzeit auf 48 Prozessorkernen einzuplanen. Dabei wurden die Rechnungen hauptsächlich auf einem Rechenknoten mit vier AMD Opteron Prozessoren, die eine Taktfrequenz von 2,2 GHz aufweisen und jeweils 12 Prozessorkerne besitzen, durchgeführt.

Aus den gezeigten Ergebnissen wird ersichtlich, dass die Vorentflammung ihren Entstehungsort im Bereich der Auslassventile hat, genauer gesagt im Spalt zwischen Ventil und Zylinderkopf. Die Gründe hierfür können wie folgt zusammengefasst werden:

- Schaffung eines Totgebietes, das zum einen die Durchmischung mit weniger reaktivem Gemisch behindert und zum anderen die Strömungsgeschwindigkeiten in diesem Bereich herabsenkt, so dass die Verweilzeit des Fluids ansteigt,
- Auslassventile stellen neben der Zündkerze die heißesten Bauteile im Brennraum dar, weshalb sie die Bildung von reaktiven Fluidballen begünstigen.

Diese beiden Faktoren führen dazu, dass heiße Auslassventile mit einer Temperatur höher als $T_{AV} = 873$ K als wahrscheinliche Ursache für Vorentflammungen in Frage kommen.

Auf Grund der konstruktiven Situation lässt sich der Spalt zwischen Ventil und Zylinderkopf nur schwer ganz vermeiden. Eine Möglichkeit besteht in der Anbringung einer zweiten Fase im Bereich des Auslassventiltellers. Hierdurch kann ein besseres Anschmiegen des Ventils an den Zylinderkopf erreicht werden, was wiederum die Vermeidung von Totgebieten in diesem Bereich begünstigt.

Weiteres Potential erschließt sich durch direkte Beeinflussung der Auslassventiltemperatur. Hierbei kann über mehrere Prozesse aktiv auf die Oberflächentemperatur eingewirkt werden. So ist z.B. durch eine günstig gelagerte Ventilüberschneidung und damit intensive Spülung ein Absinken der Ventiltemperatur zu erwarten. Wenn möglich sollte die Steuerzeit Einlass öffnet (EÖ) deutlich vor dem Druckanstieg im Auslasskanal gelegt werden. Dadurch ist eine effektive Spülung des Zylinders möglich und kalte Frischluft strömt in den Abgaskanal. Kommt es dann zum Anstieg des Drucks im Abgastrakt, strömt das Frischluft-Abgas-Gemisch aus dem Abgaskanal in den Zylinder zurück. Neben dem Transport der Frischluft in den Abgaskanal ergibt sich durch diese Maßnahme eine Verringerung der Auslassventiltemperatur durch:

 kalte Frischluft aus dem Einlasskanal überströmt auf ihrem Weg in den Abgaskanal die Auslassventile, so dass ein erhöhter konvektiver Wärmetransport von den Auslassventilen an das Brennraumfluid die Auslassventile kühlt und auf Grund der niedrigeren Fluidtemperatur im Brennraum, erhöht sich während der Ladungswechsel- und Kompressionsphase der von den geschlossenen Auslassventilen abgeführte Wärmestrom.

Weiterhin kann die Auslassventiltemperatur durch Verschiebung des Luftverhältnisses in Richtung "fett" gesenkt werden. Hierdurch sinkt die Gastemperatur des Gemisches, so dass der von den Auslassventilen abgeführte Wärmestrom ansteigt.

Ein weiterer Block von Gegenmaßnahmen erschließt sich durch Betrachtung der Kühlkonzepte der betroffenen Bauteile. Zum einen könnte versucht werden, durch neue Kühlkonzepte direkt auf die Auslassventiltemperatur im Bereich des Ventilsitzes einzugreifen, so dass der Wärmeeintrag in den Ventilspalt geringer ist. Hierbei muss allerdings die Festigkeit der Ventile mitberücksichtigt werden. Zusätzlich sollte das Kühlwasser im Bereich der Auslassventile zylinderkopfseitig möglichst nah an die Brennraumwand geführt werden, um somit die Wärmeübertragung in Bezug auf Vorentflammungen zu verbessern.

8.2.2 Variation der Temperaturverteilung

Zur genaueren Wiedergabe der Realität wird für die Auslassventile eine radiale Temperaturverteilung angenommen, um damit der unterschiedlichen Kühlung dieses Bauteils Rechnung zu tragen. In Abbildung 8.9 ist die zu Beginn der Rechnung festgelegte Verteilung der Auslassventiltemperatur über den Tellerradius der beiden Auslassventile dargestellt. In der Mitte des Ventiltellers tritt auf Grund ungünstiger Kühlbedingungen die höchste Oberflächentemperatur mit 1073 K auf, die zum Rand hin auf 873 K abfällt. Die Auslassventiltemperatur wird als zeitlich konstant während der Rechnung angenommen. Alle anderen Rand- und Anfangsbedingungen entsprechen dem Referenzfall aus Abschnitt 7.3.



Abbildung 8.9: Radiale Temperaturverteilung über den Auslassventiltellern

Zunächst soll die Ausbreitung einer möglichen Reaktionsfront mit Hilfe des OH-Massenbruchs verdeutlicht werden. Hierzu ist in Abbildung 8.10 die räumliche Verteilung von OH in der Draufsicht und zwei ausgewählten x-z-Ebenen dargestellt. Bei Betrachtung der Teilbilder in allen Ansichten zeigt sich eine deutlich verfrühte Selbstzündung des Kraftstoff-Luft-Gemisches vor der eigentlichen Zündung, wobei der Ausgangspunkt wieder im Spalt zwischen Auslassventil und Zylinderkopf liegt. Im



Abbildung 8.10: Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum zu verschiedenen Zeitpunkten bei radialer Auslassventiltemperatur; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

Vergleich zur Rechnung mit homogener Ventiltemperatur ist jedoch kaum ein Unterschied weder in der zeitlichen noch in der räumlichen Entwicklung zu sehen, vgl. Abbildung 8.4. Dies lässt sich auch anhand des CO₂-Massenbruchs zeigen, auf dessen Darstellung aber verzichtet wird, denn es sind keine wesentliche Unterschiede im Ergebnis vorhanden.

Die gezeigten Ergebnisse lassen den Schluss zu, dass die Art der Temperaturverteilung auf die Vorentflammungen einen geringen bis gar keinen Einfluss hat. Es erscheint nur wichtig, die globale Ventiltemperatur zu senken, um die thermodynamischen Bedingungen im Spalt ungünstiger im Bezug auf Vorentflammungen zu gestalten. Mögliche Maßnahmen zur Senkung der Auslassventiltemperatur sind im vorigen Abschnitt 8.2.1 beschrieben.

Es konnte durch die 3D-CFD-Rechnungen eindeutig gezeigt werden, dass die Vorentflammung ihren Entstehungsort im Spalt zwischen Auslassventil und Zylinderkopf hat. Hierbei konnte über eine gezielte Verringerung der Auslassventiltemperatur die Grenze für die Vorentflammung identifiziert werden. Es ergibt sich hierfür ein Wert von $T_{AV} = 873$ K. Bleibt die Temperatur unter dieser Grenze, ist eine Vorentflammung wenig wahrscheinlich.

Weiterhin wird der Einfluss der Temperaturverteilung über die Auslassventiloberfläche untersucht. Hierbei zeigt sich kein Unterschied in den Ergebnissen zu einer gleichverteilten Oberflächentemperatur.

Vom Autor werden zur Vermeidung der Vorentflammungsbildung, hervorgerufen durch erhöhte Auslassventiltemperaturen und die Bildung von Totgebieten im Auslassventilbereich, folgende Gegenmaßnahmen vorgeschlagen:

- konstruktive Anpassung des Ventiltellers an die Form des Zylinderkopfs,
- Timing der Ventilüberschneidung auf ein positives Spülgefälle hin auslegen,

- Verschiebung des Luftverhältnisses zu Werten kleiner eins und
- Verbesserung der Kühlung sowohl auf der Auslassventilseite als auch auf der Zylinderkopfseite.

8.3 Zündkerze

Im folgenden Abschnitt werden die Ergebnisse hinsichtlich der Untersuchung des Einflusses der Zündkerze auf eine mögliche Vorentflammung gezeigt. Hierfür erfolgt die Integration der Zündkerze in das ursprüngliche numerische Rechengitter, wozu die bisherige Blockstruktur auf geeignete Weise abgeändert wird. Das Resultat dokumentiert Abbildung 8.11, in der die Zündkerze aus der Dachelektrode und der Massenelektrode besteht.



Abbildung 8.11: Integration der Zündkerze in das bestehende Rechengitter

Für die Untersuchung wird auf folgende Art und Weise vorgegangen. In einem ersten Schritt erfolgt die Untersuchung der Zündkerzentemperatur. Hierzu liegen im Experiment ermittelte Oberflächentemperaturen der Dach- und Massenelektrode vor. Im nächsten Schritt soll der Einfluss der konstruktiven Gestaltung der Zündkerze analysiert werden. Dazu wird ein Ringspalt zwischen Dachelektrode und Isolator eingeführt. In einer letzten Variationsrechnung soll die räumliche Orientierung der Zündkerze variiert und die daraus resultierenden Folgen auf eine Vorentflammung untersucht werden.

8.3.1 Einfluss der Zündkerzentemperatur

Mittels Infrarot-Thermometrie, die durch den Projektpartner durchgeführt wurde, kann die Temperaturverteilung auf der Zündkerzenoberfläche bestimmt werden. Den Messungen lässt sich für die Temperatur der Massenelektrode ein Wert von $T_{ME} = 973$ K und für die Dachelektrode ein



Abbildung 8.12: Räumliche Verteilung von OH auf Isoflächen

Wert von $T_{DE} = 773$ K entnehmen. Diese Temperaturen werden als Randbedingung für die 3D-CFD-Simulation verwendet, Abbildung 8.11. Alle anderen Randbedingungen sind mit den ursprünglichen Einstellungen aus Abschnitt 7.3 identisch. Der Startzeitpunkt für die Simulation liegt bei 565°KW n. ZOT und der Endzeitpunkt bei 740°KW n. ZOT.

Unter den oben genannten Randbedingungen kann keine erhöhte Reaktivität sowohl bei OH als auch bei CO_2 über die gesamte Rechenzeit festgestellt werden. Zur Verdeutlichung zeigt Abbildung 8.12 zu ausgewählten Zeitpunkten die Verteilung von OH auf Isoflächen im Brennraum, wobei die Skala im Wertebereich von 0 bis $1 \cdot 10^{-10}$ liegt. Hierin ist klar ersichtlich, dass es ausschließlich im Bereich des Spalts zwischen Auslassventil und Zylinderkopf zu einem Anstieg an OH kommt. Es bleibt jedoch festzuhalten, dass der OH-Massenbruch im Vergleich zu den Ergebnissen im Abschnitt 8.2 auf einem viel niedrigeren Niveau vorliegt, so dass in diesem Fall von keiner Vorentflammung gesprochen werden kann. Im Bereich der Zündkerze ist über die gesamte Rechenzeit keinerlei erhöhte Reaktivität zu verzeichnen.

Die Ursache für den nicht wahrnehmbaren Einfluss der Zündkerze begründet sich zu einem großen Teil durch die exponierte Lage der Zündkerze innerhalb des Brennraums. Grundsätzlich treten hier zwei Haupteinflüsse auf, wobei beide ein Resultat der typischen ottomotorischen Tumble-Strömung² sind. Auf Grund der hohen Strömungsgeschwindigkeiten im Bereich der Zündkerze sind die daraus resultierenden Verweilzeiten des Fluids sehr kurz. Um dies zu verdeutlichen, stellt Abbildung 8.13 die Strömungsstruktur um die Zündkerze dar, wobei der Betrag der Geschwindigkeit auf zwei ausgewählten Ebenen in der x-z bzw. in der y-z-Ebene durch die Zündkerze alle 45°KW abgebildet ist. Hierin zeigt sich zu allen Zeitpunkten eine deutlich höhere Geschwindigkeit des Fluids im Bereich der Dachund Massenelektrode gegenüber dem umgebenden Fluid. Hohe Strömungsgeschwindigkeiten bedeuten kurze Verweilzeiten, die einen direkten Einfluss auf die chemischen Prozesse haben.

²Sofern ein Ottomotor mit Benzindirekteinspritzung vorliegt, wird die Tumble-Strömung für eine bessere Vermischung von Frischluft und Kraftstoff benutzt.



Abbildung 8.13: Strömungsverhältnisse um die Zündkerze; oben: Räumliche Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages, unten: Geschwindigkeitsfeld repräsentiert durch Vektorpfeile

Den weiteren Einfluss der Tumble-Strömung auf die chemischen Prozesse zeigt Abbildung 8.13 in der unteren Bildreihe. Hier ist die Wirbelstruktur in der x-z-Ebene bei y = 0 mm zu sehen, inklusive des Wirbelkerns in der Mitte des Zylinders. Es wird deutlich, dass durch die Drehbewegung um die y-Achse des Zylinders ein ständiger Transport hin und weg zur Zündkerze stattfindet. Der Tumble bleibt während der gesamten Kompression und darüber hinaus erhalten. Somit erfolgt eine kontinuierliche Durchmischung des Fluids. Eventuell aktive Teilchen werden in weniger reaktive Brennraumzonen transportiert.

In der Summe führen die kurze Verweilzeit und der ständige Abtransport reaktiver Teilchen im Nahbereich der Zündkerze, bei der hier untersuchten Konfiguration sowie den verwendeten Bedingungen, zu keiner Detektion einer Vorentflammung. Im nächsten Teilabschnitt wird deshalb der Einfluss der Zündkerzentopologie untersucht.

8.3.2 Variation der Zündkerzentopologie

In diesem Teilabschnitt soll der Einfluss der konstruktiven Gestaltung der Zündkerze näher beleuchtet werden. Hierzu wird, im Gegensatz zum vorherigen Abschnitt 8.3.1, über den gesamten Umfang ein Ringspalt zwischen Dachelektrode und Zündkerzensitz eingeführt. In Abbildung 8.14 sind die unterschiedlichen konstruktiven Ausführungen für die Zündkerze schematisch dargestellt. Die Frage ist, welchen Einfluss dieser Spalt auf die Vorentflammung haben kann. Dabei wird die Hypothese aufgestellt, dass durch den eingeführten Ringspalt ein zusätzliches Windschattengebiet im Brennraum geschaffen wird. Dies kann die Ausbildung einer Vorentflammung im Bereich der Zündkerze maßgeblich beeinflussen.



(a) Zündkerze ohne Ringspalt

(b) Zündkerze mit Ringspalt

Abbildung 8.14: Schematische Darstellung der unterschiedlichen Konstruktionen der verwendeten Zündkerze

Die Temperaturverteilung wird so vorgegeben, das die Messwerte aus der Infrarot-Thermometrie eingehalten werden, vgl. Abschnitt 8.3.1. Zum Startzeitpunkt der Rechnung befindet sich kein Kraftstoff, sondern nur ein Luft-Abgas-Gemisch im Ringspalt der Zündkerze. Erst durch die Strömung und die Aufwärtsbewegung des Kolbens gelangt Kraftstoff in den Spalt.



Abbildung 8.15: Räumliche Entwicklung des OH-Massenbruchs bei Einführung eines umfangseitigen Ringspalts in der Zündkerze

Um das Auftreten einer Vorentflammung bewerten zu können, wird im Folgenden die räumliche und zeitliche Entwicklung von OH auf Isoflächen betrachtet, wobei der Skalen-Wertebereich von 0 bis $5 \cdot 10^{-8}$ skaliert ist, s. Abbildung 8.15. Hierin zeigt sich, dass bei 710°KW n. ZOT keinerlei signifikanter Anstieg an OH im Bereich der Zündkerze zu sehen ist. Nur im Bereich der Auslassventile stellen sich erhöhte Anteile dar, wobei das Niveau dem aus Abschnitt 8.3.1 entspricht und als nicht kritisch bewertet wird. Zum nächst späteren Zeitpunkt erfolgt ein erster Peak des Hydroxyl-Radikals im Spalt der Zündkerze. Hierbei liegt ein lokaler Anstieg über der gesamten Ringspalthöhe vor, der nicht entlang des gesamten Umfangs stattfindet, s. Zoomansicht in Abbildung 8.15 unten. Durch eine gezielte

Auswertung der Strömung innerhalb des Spalts zwischen Zündkerzensitz und Dachelektrode lässt sich ermitteln, dass die Reaktionszone im Bereich niedrigster Strömungsgeschwindigkeiten erscheint.

Bei 730 und 740°KW n. ZOT in Abbildung 8.15 findet die weitere Ausbreitung von OH entlang des Spaltumfangs statt. In allen Teilbildern aus Abbildung 8.15 ist nur eine schwache Ausbreitung der Reaktionsfront im Brennraum aus dem Ringspalt zu sehen. Ursächlich ist dafür der Entspannungseffekt durch die Abwärtsbewegung des Kolbens im Arbeitstakt verantwortlich. Anhand des OH-Kriteriums lässt sich eine Vorentflammung für diese Parameterrechnung bei 725°KW n. ZOT feststellen.



Abbildung 8.16: Räumliche Entwicklung des CO₂-Massenbruchs bei Einführung eines umfangseitigen Ringspalts in der Zündkerze

Auch bei Betrachtung des zweiten Selbstzündkriteriums, dem CO₂-Massenbruch, in Abbildung 8.16 zeichnet sich ein ähnliches Bild wie beim OH-Massenbruch ab. Hierin erfolgt wiederum die Darstellung von CO₂ auf Isoflächen, damit ein Vergleich zu Abbildung 8.15 gezogen werden kann. Mit einem zeitlichen Versatz von 10°KW im Vergleich zu OH tritt ein erster Anstieg von CO₂ bei 730°KW n. ZOT im Ringspalt auf. Danach schreitet die Reaktionsfront umfangsseitig im Ringspalt fort, wobei abermals nur ein leichtes Fortschreiten der Reaktionszone in den Brennraum festgestellt werden kann. Im Gegensatz zur OH-Verteilung ist in keinem der Teilbilder ein Anstieg von CO₂ im Bereich der Auslassventile zu beobachten. Dies bestätigt die zuvor getroffene Aussage, dass an den Auslassventilen unter diesen Bedingungen keine Vorentflammung auftritt. Auch mit dem zweiten Selbstzündkriterium konnte eine Vorentflammung erfolgreich veranschaulicht werden. Deren Entstehungszeitpunkt im Fall von CO₂ bei 730°KW n. ZOT liegt.

Sowohl anhand des OH als auch mit Hilfe des CO₂-Massenbruchs kann eine erhöhte Reaktivität im Ringspalt registriert werden. Hierbei bleibt die Reaktionsfront jedoch vorrangig auf den Spalt beschränkt, da sich die Reaktionszone nur leicht in den Brennraum ausbreiten kann. Als Ursache zeichnen sich dafür die hohen Strömungsverhältnisse im Zündkerzenbereich aus, die zu einem Abtransport von reaktiven Teilchen aus dem Spaltbereich der Zündkerze führen, so dass es zu einer erhöhten Durchmischung mit weniger aktiven Fluid kommt, s. Erläuterung im Abschnitt 8.3.1 auf Seite 83 ff. Unterstützt wird die schwache Ausprägung der Reaktionszone in den Brennraum hinein durch die Abwärtsbewegung des Kolbens im Arbeitstakt.

Im Gegensatz zur geschlossenen Dachelektrode wird durch Einführung eines Spalts zwischen Dachelektrode und Zündkerzensitz eine Vorentflammung detektiert. Dies liegt vor allem an den günstigeren Strömungsbedingungen hinsichtlich einer Selbstzündung im Ringspalt, die sich positiv auf die Ausbildung reaktiver Teilchen auswirken. Dies hat zwei Gründe. Zum einen ist die Verweilzeit innerhalb des Ringspalts größer als außerhalb. Zum anderen findet eine geringere Durchmischung mit kälterem, weniger reaktiven Gas aus dem Brennraum statt.

Eine Frage, die in diesem Rahmen noch offen bleibt, betrifft die weitere Ausbreitung der Reaktionsfront aus dem Spalt hinaus in den Brennraum. Dies ist mit dem in dieser Arbeit verwendeten reduzierten Mechanismus nicht möglich, da die Informationen des Hochtemperaturbereichs nicht mehr Bestandteil des Reaktionsmechanismus sind. Es lässt sich jedoch vermuten, dass die Initiierung einer Vorentflammung aus dem Ringspalt heraus sehr wahrscheinlich erscheint, da das Fluid im Brennraum den thermodynamischen Bedingungen um den ZOT ausgesetzt ist, so dass die chemische Aufbereitung des Gases günstig für die Ausbildung einer Selbstzündung erscheint. Zudem muss darauf hingewiesen werden, dass das Ausbilden der Reaktionsfront deutlich nach 720°KW n. ZOT erfolgt, so dass die Folgen der Vorentflammung weniger dramatisch ausfallen können. Unter Verwendung eines kompletten Mechanismus wäre es möglich, die Frage nach der brennraumseitigen Ausbreitung der Reaktionsfront endgültig zu beantworten.

Die aufgestellte Hypothese, dass durch Einführung eines Spalts im Bereich der Dachelektrode günstigere Bedingungen bzgl. Vorentflammungsbildung geschaffen werden können, hat sich bewahrheitet. Daraus lässt sich die Forderung nach Verwendung anderer Zündkerzen ohne Ringspalt ableiten, um die Bildung einer Reaktionszone genau in diesem Bereich zu verhindern. Hierbei muss allerdings der Wärmewert der Zündkerze mit in Betracht gezogen werden, was außerhalb des Rahmens dieser Arbeit liegt.

8.3.3 Variation der Zündkerzenausrichtung

Bisher erfolgt die Ausrichtung die Zündkerze im Brennraum so, dass die Massenelektrode parallel zur y-Achse des Brennraumkoordinatensystems angeordnet ist, vgl. Abbildung 8.11. Hieraus resultieren die in Abschnitt 8.3.1 diskutierten Strömungsstrukturen und die daraus abgeleiteten Strömungseffekte, die keine Vorentflammung bei geschlossener Zündkerze hervorrufen.

In diesem Abschnitt erfolgt eine Einflussanalyse der Zündkerzenausrichtung auf die Vorentflammungsbildung. Hierfür wird die Zündkerze um 90° entgegen dem Uhrzeigersinn gedreht, was im Weiteren gerichtete Ausrichtung genannt werden soll. In Abbildung 8.17 ist die räumliche Orientierung der Zündkerze im Brennraum für die Ausgangslage sowie für die gerichtete Orientierung dargestellt. Die Hypothese lautet, dass durch diese Stellung der Zündkerze ein Windschattengebiet im Brennraum entsteht, das die Ausbildung einer Vorentflammung begünstigt. Das Windschattengebiet resultiert aus der Anströmung der Massenelektrode durch den Tumble-Wirbel. Die globale Strömungsrichtung im Zylinder ist durch den Pfeil in Abbildung 8.17 (b) schematisch dargestellt.

Zur Bestätigung dieser Hypothese erfolgt nun die räumliche und zeitliche Darstellung des OH-Massenbruchs anhand von Isoflächen im Brennraum, s. Abbildung 8.18. Für den ersten Zeitpunkt, 710° KW n. ZOT, ist keinerlei Anstieg des OH-Massenbruchs im Brennraum zu erkennen. 10°KW später



Abbildung 8.17: Schematische Darstellung der unterschiedlichen Zündkerzenorientierung inklusive der Drehrichtung des Tumble-Wirbels

zeigt sich eine deutliche Reaktionsfront im Ringspalt der Zündkerze, wobei sich der Entstehungsort der Selbstzündung von der nicht gerichteten Zündkerze klar unterscheidet, vgl. Abbildung 8.18 und 8.15. In den nachfolgenden Zeitpunkten ist einerseits ein Ausbreiten im Ringspalt der Zündkerze und zum anderen ein Ausbreiten entlang der Massenelektrode in den Brennraum hinein erkennbar. Dies zeigt den deutlichen Unterschied zwischen gerichteter und nicht gerichteter Orientierung der Zündkerze. Eine Vorentflammung kann nach dem OH-Kriterium bei 718°KW n. ZOT detektiert werden.



Abbildung 8.19: Räumliche Entwicklung des CO₂-Massenbruchs für die gerichtete Zündkerzenausrichtung

Ein ähnliches Bild zeichnet sich bei Betrachtung des CO_2 -Massenbruchs in Abbildung 8.19 ab. Im ersten Zeitpunkt bei 710°KW n. ZOT ist im gesamten Brennraum kein Kohlenstoffdioxid, für den hier verwendeten Wertebereich, zu sehen. Im ZOT erscheint ein erster Anstieg von CO_2 im Übergangsbereich der Massenelektrode zur Einschraubung. Von da aus erfolgt die Ausbreitung der Reaktionsfront vorrangig im Ringspalt. Im Vergleich zum OH-Massenbruch zeigt sich für CO_2 keine



Abbildung 8.18: Räumliche Entwicklung des OH-Massenbruchs für die gerichtete Zündkerzenausrichtung

deutliche Reaktionsfrontausbreitung in den Brennraum hinein. Dies könnte mit dem abnehmenden Druck und Temperatur infolge der Entspannung zusammen hängen. Die Vorentflammung tritt, nach dem CO_2 -Kriterium bewertet, bei 730°KW n. ZOT auf.



Abbildung 8.20: Räumliche Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages und Vektordarstellung des Geschwindigkeitsfeldes bei $705^\circ {\rm KW}$ n. ZOT

Anhand den Abbildungen 8.18 resp. 8.19 kann eine Vorentflammung eindeutig nachgewiesen werden, wobei sich im Vergleich mit den Abbildungen 8.15 bzw. 8.16 aus Abschnitt 8.3.2 klare Unterschiede feststellen lassen. Diese können mittels Abbildung 8.20 plausibel erklärt werden. Hier ist zum einen die räumliche Verteilung des Geschwindigkeitsbetrages und zum anderen das Geschwindigkeitsfeld anhand von Vektorpfeilen bei 705°KW n. ZOT dargestellt. Durch die sich entgegen des Uhrzeigersinns drehende Tumble-Strömung entsteht zwischen dem Bügel der Massenelektrode und der Dachelektrode ein Windschattengebiet mit sehr geringen Geschwindigkeitsbeträgen. Hierdurch kommt es zu einer erhöhten Verweilzeit im Bereich der heißen Massenelektrode.

Zudem bewirkt die Quetschströmung, die durch die Aufwärtsbewegung des Kolbens initiiert wird, den Transport des heißen Fluids von der Auslassventilseite in die Nähe der Zündkerze, welches dann in den Ringspalt der Zündkerze gelangt. Dies ist klar im Vergrößerungsausschnitt von Abbildung 8.20 zu sehen. Im Spalt zwischen Dachelektrode und Ventilsitz hat das Fluid genügend Zeit, weiter zu reagieren, wobei diese von den heißen Temperaturen der Zündkerze begünstigt werden.

Die Stellung der Zündkerze, in Bezug zum Tumble, hat einen großen Einfluss auf die Vorentflammungsbildung, weshalb der Beweis für die aufgestellte Hypothese erbracht ist. Es kann deutlich gezeigt werden, dass durch eine gerichtete Orientierung der Zündkerze die Vorentflammung begünstigt wird. Somit empfiehlt sich eine nicht gerichtete Ausrichtung der Zündkerze, vgl. Abbildung 8.17. Dadurch wird ein Abtransport etwaiger reaktiver Teilchen aus dem Bereich der Zündkerze gewährleistet.

In diesem Abschnitt konnte der Einfluss der Zündkerze auf die Vorentflammungsbildung nachgewiesen werden. Es hat sich gezeigt, dass eine geschlossene Zündkerze, bei der kein Spalt zwischen Isolator und Zündkerzensitz vorhanden ist, nicht als wahrscheinliche Ursache für eine Vorentflammung in Betracht kommt. Im Gegensatz dazu konnte die Vorentflammungsneigung durch Einführung eines Ringspalts in die Zündkerze vergrößert werden. Unter dieser Voraussetzung tritt eine klare Selbstzündung auf. Die wahrscheinliche Ursache für dieses Ergebnis ist die Schaffung eines zusätzlichen Totgebiets im Brennraum, worin das Fluid genügend Zeit hat, reaktive Spezies zu bilden. Durch die Rechnung mit reduziertem Reaktionsmechanismus konnte keine Ausbreitung der Reaktionsfront in den Brennraum hinein beobachtet werden.

Zudem hat sich eine Abhängigkeit der Vorentflammungsbildung von der Ausrichtung der Zündkerze ergeben. Hierbei ist vor allem eine gerichtete Orientierung als kritisch zu bewerten, denn so wird ein weiteres Windschattengebiet im Bereich zwischen Massen- und Dachelektrode geschaffen. Weiterhin kommt es durch diese Ausrichtung zu einem Transport von heißem Fluid von der Auslassventilseite zur Zündkerze.

Eine Möglichkeit die Vorentflammungsbildung im Bereich der Zündkerze zu verhindern, ist die Verwendung geschlossener Zündkerzen. So kann das im Ringspalt vorliegende Totgebiet ganz vermieden werden. Auf die gerichtete Orientierung der Zündkerze sollte nach Möglichkeit verzichtet werden.

8.4 Abgasvariation

Der nachfolgende Abschnitt beschäftigt sich mit der chemischen Einflussanalyse von ottomotorischem Abgas. Für die bisherigen Rechnungen wird von vollständig umgesetzten Abgas aus der vorherigen Verbrennung ausgegangen. Mittels experimentellen Abgasanalysemethoden kann für den in dieser Arbeit diskutierten Betriebspunkt die reale Abgaszusammensetzung im Motor gemessen werden. Tabelle 8.1 zeigt hierfür die im Folgenden verwendete Zusammensetzung, die in einem Pre-Processing-Schritt die vollständig umgesetzte Abgaszusammensetzung ersetzt, wobei die globale Abgasmasse konstant gehalten wird. Bei ES liegt im Brennraum ein Restgasgehalt von ca. 3% vor, so dass sich die restlichen 97% als Kraftstoff-Luft-Gemisch darstellen.

Die Grundlage für die Abgasvariation sind die im Abschnitt 7.3 vorgestellten Simulationsergebnisse der kalten Strömung bis ES. Dabei bleibt anzumerken, dass die Berechnung der Ladungswechselphase inklusive der Einspritzung mit dem realem Abgas nicht erneut durchgeführt wurde. Die Änderungen in den thermodynamischen Eigenschaften zum Zeitpunkt ES werden als gering eingeschätzt, weshalb sie den hohen zeitlichen Aufwand nicht rechtfertigen würden.

Der Molanteil an Stickstoff für das reale Abgas ergibt sich aus der Differenz von eins und der

Summe der Molenbrüche der gemessenen Abgaskomponenten. Die Summe an Kohlenwasserstoffen wird zu gleichen Teilen mit Ethen C_2H_4 und Propen C_3H_6 substituiert. Diese beiden Repräsentanten werden deshalb gewählt, da sie bei der Abgasmessung für einen Lambdawert bei $\lambda = 1,05$ in den höchsten Konzentrationen vorliegen. In der 3D-CFD-Simulation liegt im ZOT ein Luftverhältnis von $\lambda = 1,03$ vor, so dass die Größenordnung mit dem Experiment gut übereinstimmt.

Tabelle 8.1: Reale Abgaszusammensetzung in Molenbrüchen

e riegaezaeann	memberzung m i	nonemor	uenen		
O_2	CO_2	${\rm H}_2{\rm O}$	NO	CO	\sum HC
$0,83 \cdot 10^{-2}$	$14,25\cdot 10^{-2}$	0, 15	$3187 \cdot 10^{-6}$	$0,44\cdot 10^{-2}$	$1072 \cdot 10^{-6}$

Alle sonstigen Randbedingungen entsprechen dem Standard, s. dazu Abschnitt 7.3 und Tabelle 7.4. Für die Darstellung der Ergebnisse werden die üblichen drei Ansichten verwendet, so wie sie in Abbildung 8.3 definiert sind.

8.4.1 Einfluss von realem Abgas

Das Auftreten einer Vorentflammung bei der Verwendung von realem Abgas wird an den Kriterien OH und CO₂ bewertet. Hierzu sei zunächst die räumliche Verteilung des Hydroxyl-Radikals in der Draufsicht und auf zwei x-z-Ebenen bei y = 0,017 m resp. y = -0,017 m zu verschiedenen Zeitpunkten dargestellt, Abbildung 8.21. Im linken oberen Teilbild zeigt sich, dass OH seinen Entstehungsort auch bei Verwendung von realem Abgas im Bereich des Spalts zwischen Zylinderkopf und Auslassventilen hat. Dies ist so auch in den x-z-Ebenen bei 710°KW n. ZOT deutlich erkennbar. Im ZOT kann augenscheinlich eine Ausbreitung von OH über die gesamte untere Ventilseite festgestellt werden, wobei sich die Reaktionszone auch umfangsseitig ausbreitet. Im Schnittbild bei y = 0,017 m zeigt sich zudem ein Fortschreiten der Front in den Zylinder hinein. Hierbei transportiert die Tumble-Strömung die reaktiven Teilchen aus dem Bereich unterhalb der Auslassventile in den Brennraum hinein. Der Fortschritt in der x-z-Ebene bei y = -0,017 m ist weniger weit entwickelt. Die Ausbreitung der Reaktionszone verläuft asymmetrisch, wofür die dreidimensionale Strömung im Brennraum verantwortlich ist.

Nach Überschreiten des ZOT, 730 und 740°KW n. ZOT, schreitet die Front mit maximalem OH weiter Richtung Einlassventilseite. Hierbei tritt die Reaktionsfront nicht als geschlossenes Band über die Auslassventilseite auf, sondern erfährt einen Bruch in dem Bereich, wo die Auslassventile den geringsten Abstand zueinander aufweisen.

In den beiden x-z-Ebenen für die Zeitpunkte 730 und 740°KW n. ZOT zeigt sich, wie weit OH bereits auf die Einlassseite vorgedrungen ist. Dies lässt sich in der Draufsicht nicht erkennen. Die Ursache hierfür liegt darin, dass die Reaktionsfrontausbreitung vornehmlich über die Tumble-Strömung getrieben wird, die zu einem allmählichen Transport des Hydroxyl-Radikals führt. In der Realität lässt sich ein anderes Verhalten vermuten, denn die chemischen Prozesse sollten nach der Selbstzündung sowie dem damit einhergehenden Temperaturanstieg um ein Vielfaches schneller ablaufen und der Strömung überlagert sein.

Das zweite Kriterium, was für die Bewertung einer Vorentflammung herangezogen wird, ist der CO_2 -Massenbruch, dessen räumliche Verteilung Abbildung 8.22 dokumentiert. Zum Zeitpunkt 710°KW n. ZOT sind zwar erhöhte Anteile des Markers vorhanden, jedoch resultieren diese aus dem ursprünglichen Abgas. Bei 720°KW n. ZOT zeigen sich erste erhöhte Konzentrationen im Ventilspalt und zudem



Abbildung 8.21: Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellungen für die Untersuchung des Einflusses von realem Abgas; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

auch in den ausgewählten Schnittebenen. Im weiteren Verlauf der Rechnung schreitet die Reaktionsfront in Richtung Einlass weiter, wobei die Tumble-Strömung die treibende Kraft ist.

Das Ergebnis aus der CO₂-Darstellung bestätigt die mit OH erhaltenen Resultate, so dass bei Verwendung von realem Abgas der Nachweis einer Vorentflammung positiv erfolgte. Hierbei zeigt sich aber auch, dass die Detektion der Vorentflammung zu unterschiedlichen Zeitpunkten stattfindet, in Abhängigkeit von der Wahl des verwendeten Kriteriums. Während im Fall von OH die Selbstzündung bei ca. 715°KW n. ZOT auftritt, erfolgt diese bei CO₂ erst zum Zeitpunkt 720°KW n. ZOT.

Für die weitere Eingrenzung des Entstehungszeitpunkts kann die Temperaturverteilung herangezogen werden, so wie in Abbildung 8.23 gezeigt wird. Hierbei verhält sich die Temperatur sowohl in der zeitlichen als auch räumlichen Entwicklung ähnlich im Vergleich zu CO_2 . Der größte Unterschied besteht zum Zeitpunkt 740°KW n. ZOT, denn während CO_2 auf hohem Niveau verbleibt, fällt die Temperatur ab. Das liegt an der beginnenden Entspannung durch die Abwärtsbewegung des Kolbens. Nach dem Temperaturkriterium würde eine Vorentflammung auch um den ZOT stattfinden, was das Auftreten der Selbstzündung aus der CO_2 Darstellung bestätigen würde, vgl. Abbildung 8.22.

Um die räumliche Entwicklung der Reaktionszone diskutieren zu können, zeigt Abbildung 8.24 die Verteilung von OH auf Isoflächen im Brennraum zu verschiedenen Zeitpunkten. In der Abfolge der Teilbilder ist deutlich der Beginn der Reaktionsfront im Ventilspalt auf der Auslassventilseite zu sehen, die sich dann jedoch verstärkt über den Umfang des Zylinderkopfes in Richtung Einlassseite ausbreitet. Es lässt sich auch erkennen, dass zu Beginn der Ausbreitung nahezu kein Fortschreiten in Richtung Brennraummitte stattfindet, was in Abbildung 8.21 weniger deutlich zu sehen ist.

Gerade im Vergleich zur vorherigen Variation der Auslassventiltemperatur weist dieses Verhalten markante Unterschiede auf, bei der eine verstärkte zum Brennraum gerichtete Ausbreitung erkennbar


Abbildung 8.22: Räumliche Verteilung des CO₂-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellungen für die Untersuchung des Einflusses von realem Abgas; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

ist, vgl. Abbildung 8.7. Der Grund für den Unterschied im Ausbreitungsverhalten der Reaktionszone liegt am unterschiedlichen Einfluss der Tumble-Strömung. Während die Ausbreitung im Fall der heißen Auslassventile eher durch die hohe Auslassventiltemperatur geprägt wird, zeigt sich beim realen Abgas eine deutliche Beeinflussung der Reaktionsfrontausbreitung durch den Tumble. Dies könnte zudem eine mögliche Erklärung für die experimentell beobachtete Selbstzündlage im Bereich der Zylinderkopfdichtung sein /19/.

Im späteren Verlauf der Reaktionsfrontausbreitung 725 bis 740°KW n. ZOT in Abbildung 8.24 erfolgt auch ein zum Brennraum gerichtetes Fortschreiten der reaktiven Teilchen. Dies stimmt wiederum gut mit den Ergebnissen aus Abschnitt 8.2.1 überein.

Zusammenfassend zu den eben gezeigten Ergebnissen lässt sich sagen, dass bei Verwendung von realem Abgas und unter den verwendeten Randbedingungen eine Vorentflammung sowohl für den OH- und CO_2 -Massenbruch als auch für die Zylindertemperatur detektiert werden kann. Hierbei liegt der Ort erster Reaktionen im Bereich des Ventilspalts von dem sich dann die Reaktionsfront vorrangig entlang des Zylinderkopfumfangs ausbreitet. Aus den Ergebnissen kann geschlussfolgert werden, dass der chemische Einfluss von Abgas der entscheidende Einflussfaktor auf die Zündwilligkeit des Kraftstoff-Luftgemisches ist. Die Frage, die sich an die Ergebnisse anschließt, ist, welchen Einfluss die unterschiedlichen Abgaskomponenten auf die Ausbildung einer Vorentflammung haben? Hierfür werden im Rahmen der vorliegenden Arbeit weitere Variationsrechnungen bzgl. der Abgaszusammensetzung durchgeführt.



Abbildung 8.23: Räumliche Verteilung der Temperatur im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellungen für die Untersuchung des Einflusses von realem Abgas; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

8.4.2 Einfluss von Stickstoffmonoxid auf die Vorentflammungsausbildung

Der fördernde Einfluss von Stickstoffmonoxid wird bereits bei Michels et al. /47/, Stenlåås et al. /67/ und bei Pilling /57/ beschrieben. Um die Einflussanalyse auf Vorentflammungen auszuweiten, werden die nachfolgenden Ergebnisse präsentiert. In einem ersten Schritt sollen die Molenbrüche aller teiloxidierten Kohlenwasserstoffe (also Ethen und Propen) sowie Kohlenstoffmonoxid zu null gesetzt werden. Zur Wahrung der Elementerhaltung wird die Annahme getroffen, dass die teiloxidierten Bestandteile vollständig umgesetzt werden. Somit ergeben sich höhere Konzentrationen der inerten Abgaskomponenten (CO₂ und H₂O), welche mit den anderen Komponenten in Tabelle 8.2 zusammengefasst sind. In einem zweiten Schritt erfolgt die Neuberechnung der Zusammensetzung für die 3D-CFD-Simulation.

ICI												
	O ₂	O_2 CO_2		NO	СО	\sum HC						
	$0,2345 \cdot 10^{-2}$	$14,958\cdot 10^{-2}$	$15, 21 \cdot 10^{-2}$	$3187\cdot 10^{-6}$	0	0						

 Tabelle 8.2: Abgaszusammensetzung ohne Kohlenstoffmonoxid bzw. teiloxidierte Kohlenwasserstoffkomponenten in Molenbrüchen

Das erste präsentierte Ergebnis ist die räumliche und zeitliche Verteilung von OH, welche in Abbildung 8.25 bis zum oberen Zündtotpunkt dargestellt ist. Bei 705°KW n. ZOT zeigen sich erste erhöhte OH Anteile im Ventilspalt, wie in der Draufsicht und den beiden x-z-Ebenen zu sehen sind. Mit zunehmender Aufwärtsbewegung des Kolbens breitet sich die Reaktionsfront entlang der Auslassventilteller sowie in Richtung Kolben aus. Zum Kompressionsende bei 720°KW n. ZOT sind bereits große Teile der Auslassventilteller von der Reaktionszone erfasst. Hierbei zeigt sich zudem ein Fortschreiten über den Zylinderkopfumfang in Richtung Einlassseite. In der x-z-Ebene bei y = 0,017 m sind zum ersten



Abbildung 8.24: Zeitliche und räumliche Entwicklung der Reaktionsfront unter Berücksichtigung von realem Abgas

Mal deutlich erhöhte Anteile von OH auf der Einlassseite zu erkennen. Es konnte eine Vorentflammung nach dem OH-Kriterium festgestellt werden.

Neben dem OH- wird der CO₂-Massenbruch zur Bewertung einer Vorentflammung herangezogen. Hierfür zeigt Abbildung 8.26 dessen räumliche Verteilung in der Draufsicht und zwei x-z-Ebenen durch die Einlassventilachsen bei verschiedenen Kolbenstellungen. Für die Zeitpunkte 705 und 710° KW n. ZOT kann in keiner der Ansichten ein Anstieg an CO₂ festgestellt werden. Erst bei 715°KW n. ZOT sind Bereiche mit ansteigendem Anteil im Ventilspalt erkennbar. Diese lassen sich auch in beiden Schnitten durch die Ventilachsen ausmachen. Im Fortlauf der Rechnung erwächst aus dem Ventilspalt die Reaktionsfront, welche sich entlang der Ventilteller weiter ausbreitet. Hierbei ähnelt die räumliche Verteilung von CO₂ im ZOT derjenigen von OH bei 715°KW n. ZOT sehr stark, vgl. die Abbildungen 8.25 und 8.22.

Im Gegensatz zum kompletten Abgas (Abbildung 8.21 und 8.22) weist die Rechnung mit dem variiertem Abgas, in dem nur Stickstoffmonoxid als teiloxidierte Komponente vorkommt, ein verfrühtes Eintreten der Vorentflammung auf. So kann für das variierte Abgas bzgl. OH der Beginn der Vorentflammung auf 711°KW n. ZOT resp. für CO₂ auf 717°KW n. ZOT festgestellt werden. Es scheint, dass durch Vernachlässigung der anderen teiloxidierten Komponenten die chemischen Prozesse beschleunigt ablaufen.

Weiterhin lässt sich aus den Ergebnissen schlussfolgern, dass NO als Bestandteil im Abgas als mögliche Ursache für Vorentflammungen in Frage kommt. Hierbei scheint vor allem der chemische Einfluss von besonderer Bedeutung zu sein. Dies bestätigt auch die Untersuchung von Michels et al. /47/, bei der durch Zufuhr von NO im Abgas ein deutlicher Abfall der Zündverzugszeit in 0D-Reaktoruntersuchungen festgestellt wurde. Pilling et al. /57/ berichtet ebenfalls über den fördernden Einfluss von Stickstoffmonoxid hinsichtlich Selbstzündung, wobei dieser sowohl von der Temperatur als auch der Konzentration abhängt.



Abbildung 8.25: Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellungen bei Nichtberücksichtigung teiloxidierter Komponenten außer NO; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

8.4.3 Einfluss unverbrannter Kohlenwasserstoffe im Abgas auf die Vorentflammungsbildung

Nachdem im letzten Abschnitt 8.4.2 der Einfluss von Stickstoffmonoxid auf die Vorentflammungsbildung untersucht wird, soll nun die Einflussanalyse auf eine Vorentflammung von teiloxidierten Kohlenwasserstoffen erfolgen. Hierfür soll die reale Abgaszusammensetzung so verändert werden, dass der Anteil von NO im Abgas vernachlässigt und in die Edukte N_2 und O_2 zurückgeführt wird. Dadurch ergibt sich die in Tabelle 8.3 dargestellte Abgaszusammensetzung. Die Summe an unverbrannten Kohlenwasserstoffen setzt sich aus Propen und Ethen zusammen. Über ein geeignetes Pre-Processing mit dem Programm Matlab konnte diese Abgaszusammensetzung in die Berechnung der Initialwerte für die CFD überführt werden.

bgas	zusammensetz	ung ohne NO i	n Molenbruche	n		
	O_2	$\rm CO_2$	H_2O	NO	CO	\sum HC
	$0,989 \cdot 10^{-2}$	$14,25 \cdot 10^{-2}$	$15,00 \cdot 10^{-2}$	0	$0,44\cdot 10^{-2}$	$1072 \cdot 10^{-6}$

Tabelle 8.3: Abgaszusammensetzung ohne NO in Molenbrüche

Die räumliche Verteilung von OH in der Draufsicht lässt für 710°KW n. ZOT nur ganz leicht eine erhöhte Konzentration im Bereich des Ventilspalts erkennen, worin sie sich von den beiden Schnittebenen unterscheidet, denn hier ist zu diesem Zeitpunkt keinerlei Anstieg zu sehen, Abbildung 8.27. Mit zunehmender Rechendauer steigt der OH-Massenbruch im Bereich des Spalts weiter an. Hierbei lässt sich bei 730 °KW n. ZOT erstmals ein signifikanter OH-Peak in der x-z-Ebene bei y = 0,017 m erkennen. In der x-z-Ebene bei y = -0,017 m zeigt sich ein geringerer Fortschritt der Reaktionsfront. 20°KW nach dem Überschreiten des ZOT ist auf der linken Auslassventilseite eine Ausbreitung der



Abbildung 8.26: Räumliche Verteilung des CO₂-Massenbruchs im Brennraum bei verschiedenen Kolbenstellungen bei Nichtberücksichtigung teiloxidierter Komponenten außer NO; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

Reaktionsfront entlang des Ventiltellers ersichtlich, welche auf der rechten Seite so nicht erscheint. Nach Betrachtung der Ergebnisse kann eine Vorentflammung anhand von OH bei 730°KW n. ZOT festgestellt werden.

Wie sieht es bei dieser Abgasvariation mit dem zweiten Vorentflammungskriterium, dem CO_2 -Massenbruch, aus? Hierfür zeigt Abbildung 8.28 die Darstellung von CO_2 in den Standardansichten. Vor 730°KW n. ZOT ist in keiner der Ansichten eine erhöhte Konzentration an CO_2 zu sehen, die auf Vorentflammungen zurückzuführen wäre. Erst bei 730 und dann später bei 740°KW n. ZOT erfolgt ein Ansteigen in der Nähe der Auslassventile. Diese erscheinen jedoch so spät, dass zwar eine Selbstzündung auftritt, aber eigentlich keine Vorentflammung vorliegen kann. Nach CO_2 bewertet, würde eine Selbstzündung bei 740°KW n. ZOT oder später auftreten und damit deutlich nach der Zündungseinleitung mittels Zündkerze.

In die Betrachtung muss auch der eigentliche Zündwinkel für den untersuchten Lastpunkt einbezogen werden, der bei ca. 735°KW n. ZOT liegt. Aus den Ergebnissen in Abbildung 8.27 und 8.28 lässt sich ein Selbstzündwinkel von 730 bzw. 740°KW n. ZOT feststellen, wobei die eigentliche Zündungseinleitung mittels Zündkerze mindestens in einem Fall bereits passiert wäre. Somit bleibt festzuhalten, dass bei Vernachlässigung von NO, ansonsten aber unverändertem Abgas, keine Vorentflammung detektiert werden konnte. Dies bestätigt die im Abschnitt 8.4.2 aufgestellte Hypothese, wonach der chemische Einfluss des Abgases auf eine Vorentflammung hauptsächlich auf NO beruht.

Die Kohlenwasserstoffkomponenten im ottomotorischen Abgas setzen sich aus einer Vielzahl von einzelnen Spezies zusammen. Für die bisherigen Rechnungen in diesem Abschnitt 8.4 wurde die Summe der Kohlenwasserstoffe durch Ethen und Propen substituiert. Hieraus ergibt sich die Fragestellung, welchen Einfluss die einzelnen Kohlenwasserstoffkomponenten im Abgas auf die Vorentflammungsnei-



Abbildung 8.27: Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei Variation der unverbrannten Kohlenwasserstoffkomponenten im Fall von Propen und Ethen; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

gung haben können. Um eine Antwort zu finden, wird für die nachfolgende Rechnung Ethen durch Ethin C_2H_2 ersetzt. Anhand von 0D-Reaktorsimulationen kann gezeigt werden, dass Ethin, entgegen dem Trend, wonach die Zündwilligkeit eines Stoffes mit höherer Bindungsanzahl abnimmt, die Zündverzugszeit herabsetzt. Dies konnte innerhalb des Projekts für ein Modellabgas mit einem Molanteil an C_2H_2 ab 1 ppm erreicht werden. Heywood /31/ kommt zu einer ähnlichen Feststellung, obwohl er hauptsächlich den Einfluss von Ethin als Kraftstoffkomponente auf die Klopfanfälligkeit diskutiert. Es gibt also Indizien dafür, dass Ethin die Vorentflammungsneigung eines Gemisches herauf setzen kann. Dies zu untersuchen, ist die Motivation für die nachfolgende Variationsrechnung.

Auf Grund der unterschiedlichen molaren Massen von Ethen und Ethin ändert sich die Zusammensetzung der Initialwerte für die 3D-CFD-Simulation, da diese auf Massenbrüche beruhen. Alle übrigen Vorgaben entsprechen der Tabelle 7.4 auf Seite 67 zusammen mit den Erläuterungen aus Abschnitt 7.3.

Da Ethin in dem vormals reduzierten Mechanismus nicht Bestandteil des Zustandsraums ist, muss ein neuer reduzierter Mechanismus erzeugt werden, der als Komponente Ethin enthält. Dieser Mechanismus besteht aus 201 Spezies und 336 Elementarreaktionen und zeigt damit eine wesentliche Vergrößerung zum vormals reduzierten Reaktionsmechanismus. Während der Rechnung hat sich zudem herausgestellt, dass das Gleichungssystem, welches auf dem Ethin-Mechanismus basiert, eine große Steifigkeit aufweist und deshalb deutlich längere Rechenzeiten im Vergleich zu Ethen auftreten.

Anhand der räumlichen Verteilung von OH in Abbildung 8.29 zeigt sich, dass erst bei 720°KW n. ZOT deutlich erhöhte Anteile im Ventilspalt vorliegen. In den Schnittebenen zu diesem Zeitpunkt sind keine erhöhten Anteile von OH im Brennraum feststellbar. 10°KW nach dem aktuellen ZOT breitet sich die Reaktionsfront am unteren Auslassventilteller aus. Jetzt zeigen sich auch erhöhte An-



Abbildung 8.28: Räumliche Verteilung des CO₂-Massenbruchs im Brennraum bei Variation der unverbrannten Kohlenwasserstoffkomponenten im Fall von Propen und Ethen; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

teile im Brennraum zwischen Auslassventil und Kolben. Mit zunehmender Simulationszeit verstärkt sich der Einfluss der Entspannung, so dass die Reaktionsfront beginnt abzuschwächen, s. Abbildung 8.29 bei 740°KW n. ZOT. Gerade im Vergleich zur vorherigen Variationsrechnung, in der Ethen als zweite HC-Komponente verwendet wird, lassen sich wenig Unterschiede in der räumlichen und zeitlichen Entwicklung von OH entdecken, vgl. Abbildung 8.29 mit Abbildung 8.27. Das Ergebnis im Fall von Ethin zeigt eine etwas beschleunigte Entwicklung der Reaktionsfront, so dass der Beginn der Vorentflammung bei 729°KW n. ZOT festgelegt werden kann.

Die Ähnlichkeiten zwischen den Ergebnissen der Rechnung mit Ethin bzw. Ethen sind auch im Vergleich der Abbildungen 8.28 und 8.30 anhand des CO_2 -Kriteriums zu sehen. Im Fall von Ethin zeigt sich der größte Unterschied zu Ethen bei 740°KW n. ZOT, denn hier sind deutlich erhöhte Anteile von CO_2 in der Draufsicht und den Schnittebenen erkennbar. Deshalb kann in diesem Fall der Beginn der Vorentflammung auf 734°KW n. ZOT festgelegt werden, was kurz vor der eigentlichen Zündungseinleitung durch die Zündkerze liegt. Somit könnte ein mögliches Selbstzündungsereignis von der Fremdzündung überlagert sein.

Aus den vorgestellten Ergebnissen zur Abgasvariation bzgl. der HC-Zusammensetzung kann deutlich herausgestellt werden, dass die Kohlenwasserstoffe nur einen geringen fördernden Einfluss hinsichtlich einer Vorentflammung aufweisen. So tritt zwar im Fall von Ethin als zweite Komponente der unverbrannten Kohlenwasserstoffe im Abgas eine Vorentflammung auf, jedoch erscheint diese relativ spät und könnte demnach von der eigentlichen Zündung überlagert sein. Vielmehr scheinen die unverbrannten Kohlenwasserstoffe den chemischen Einfluss von NO auf die Vorentflammungsbildung herabzusetzen, was aus dem Vergleich von Abgas mit und ohne HC-Komponenten hervorgeht, s. Abschnitt 8.4.2 und 8.4.1.



Abbildung 8.29: Räumliche Verteilung des OH-Massenbruchs im Brennraum bei Variation der unverbrannten Kohlenwasserstoffkomponenten im Fall von Propen und Ethin; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

Welche Maßnahmen könnten ergriffen werden, um dem fördernden Einfluss von realem Abgas, vorrangig NO, entgegen zu wirken? Auf Grund der hohen Verbrennungstemperaturen im Ottomotor mit über 2000 K /31/ ist die Bildung von thermischen Stickstoffoxiden nicht zu vermeiden. Trotzdem existieren Maßnahmen, die zumindest die Konzentration an Stickstoffmonoxid im Brennraum senken können. Dies wäre zum einen ein positives Spülgefälle zwischen Ein -und Auslasskanal, womit der Restgasgehalt gesenkt werden kann. Michels et al. /47/ beweisen, dass durch Erniedrigung der NO Konzentration die Zündverzugszeit deutlich heraufgesetzt wird. Ziel ist es also die interne Abgasrückführung (AGR) zu minimieren.

Bei externer AGR sollte vermieden werden, zusätzliches NO in den Brennraum zurückzuführen. Hierfür bieten sich zwei Techniken an. Zum einen kann die Entnahme des Abgases für die AGR hinter dem 3-Wege-Katalysator stattfinden und zum anderen kann in die AGR-Strecke hinter der ATL-Entnahme ein katalytischer Reformer eingebaut werden. Dies wurde bereits durch Hoffmeyer et al. /32/ untersucht. Ziel der Forschung ist die Vermeidung von Klopfen in Teil- und Hochlastpunkten durch Integration eines katalytisch aktiven Reformers in die Abgasrückführungsstrecke zwischen Abgasturbine und Abgasrückführungsventil. Hierdurch können die teiloxidierten Abgasbestandteile CO, NO und HC in die stabilen Verbrennungsprodukte CO_2 , H_2O sowie N_2 umgewandelt werden. Dies führt zu einer deutlichen Verzögerung der Selbstzündung und damit zu einer Reduktion von Klopfereignissen. Für die Vorentflammung könnte dies eine drastische Verringerung des chemischen Einflusses der kritischen Abgaskomponente NO bedeuten. Bei der Anwendung externer AGR sollte auf die Kühlung des Abgases nicht verzichtet werden, um die Gastemperatur im Brennraum durch das Abgas nicht zu erhöhen. Deshalb sollte ein AGR-Kühler in die Rückführungsstrecke integriert sein.

Weiterhin können die Stickstoffoxide, die bei der Verbrennung entstehen, durch Verlagerung des



Abbildung 8.30: Räumliche Verteilung des CO₂-Massenbruchs im Brennraum bei Variation der unverbrannten Kohlenwasserstoffkomponenten im Fall von Ethin; oben: Draufsicht, Mitte: x-z-Ebene bei y = 0,017 m, unten: x-z-Ebene bei y = -0,017 m

Luftverhältnisses in Richtung fett gesenkt werden. NO weist bei $\lambda_l = 1,05$ ein Konzentrationsmaximum auf, dass nach beiden Seiten relativ schnell absinkt [/23/, /31/]. Hierbei ist zu beachten, dass auf Grund des 3-Wege-Katalysators das Abgas möglichst stöchiometrisch vorliegen muss.

Die Ergebnisse aus diesem Abschnitt zeigen den deutlichen Einfluss von realem Abgas auf die Vorentflammungsbildung. Es kann klar herausgestellt werden, dass der chemische Einfluss von NO der größte abgasseitige Einflussfaktor auf die Selbstzündung des Kraftstoff-Luft-Gemisches ist.

Ebenso deutlich kann gezeigt werden, dass die unverbrannten Kohlenwasserstoffe alleine nicht für eine Vorentflammung verantwortlich sind. Die Ergebnisse lassen vermuten, dass die HC Bestandteile im Restgas einen hemmenden Einfluss auf NO ausüben. Auch eine Variation der HC-Zusammensetzung bewies keine große Wirkung auf die Ergebnisse der Rechnung.

Vom Autor werden zur Vermeidung von NO bei interner und externer AGR folgende Maßnahmen vorgeschlagen:

- günstige Auslegung der Ventilsteuerzeiten hin zum positivem Spülgefälle,
- Verlagerung des Luftverhältnisses in Richtung unterstöchiometrische Verbrennung ($\lambda_l < 1$),
- bei externer AGR Entnahme des Abgases stromabwärts vom 3-Wege-Katalysator oder
- Einbau eines katalytisch wirksamen Reformers in die AGR-Strecke, wobei das Abgas nach dem ATL entnommen wird (vgl. /32/).

8.5 Akkumulation von Kraftstoff

Der nachfolgende Abschnitt untersucht die Hypothese, dass es an bestimmten Stellen im Brennraum zu einer Ansammlung von Kohlenwasserstoffen kommt, was wiederum zu einem lokal fetten Gemisch führt. Fette Gemische weisen gegenüber mageren Gemischen eine geringe Zündverzugszeit auf. Lokale Kraftstoffanreicherung könnte somit potentiell Vorentflammungen verursachen. Dies soll mit Hilfe numerischer Simulation überprüft und bewertet werden.

8.5.1 Vorgehensweise

Die erste Frage, die hinsichtlich einer Kraftstoffanreicherung aufkommt, beinhaltet die Lage solcher lokalen Akkumulationen. Hierfür kann auf eine 3D-CFD-Simulation des Projektpartners zurückgegriffen werden, in der sich zwei markante Anreicherungen im Bereich des Kolbens auf der Einlassseite und im Bereich der Zylinderkopfdichtung ebenfalls einlassseitig identifizieren lassen.

Um eine Anreicherung von Kraftstoff nachbilden zu können, wird die Verteilung des Kraftstoffes in den betreffenden Rechenzellen so angepasst, das sie den Berechnungsergebnissen von VECTIS entsprechen. Hierbei bleibt die globale Kraftstoffmasse konstant, was durch Subtraktion an Kraftstoff im übrigen Brennraum erreicht werden kann.

Als Startzeitpunkt für die numerische Simulation wird 630°KW n. ZOT festgelegt, denn hier treten die höchsten Konzentrationen an Kraftstoff im Wandbereich auf. Ab diesem Zeitpunkt erfolgt die direkte Kopplung zwischen detaillierter Chemie und 3D-CFD-Simulation.



8.5.2 Kraftstoffanreicherung in Kolbennähe

Abbildung 8.31: Kraftstoffanreicherung in Kolbennähe (links) und Darstellung der Auswerte
ebene (rechts) bei $y=0,0125~{\rm m}$

Die erste erhöhte Konzentration von Kraftstoff aus der VECTIS-Rechnung zeigt Abbildung 8.31 im Bereich des Kolbens auf der Einlassventilseite. Durch das Verändern der Felder für die Massenbrüche von iso-Oktan und n-Heptan kann deren Anreicherung in Feuerstegnähe den VECTIS-Rechnungen nachempfunden werden. Ansonsten entsprechen die Randbedingungen den Standardwerten aus Tabelle 7.4. Die Anfangswerte für die übrigen Zustandsgrößen ergeben sich aus der numerischen Simulation, die im Abschnitt 7.3 Gegenstand der Untersuchung ist.



Abbildung 8.32: Räumliche Verteilung des Kraftstoffmassenbruchs nach der Kraftstoffanreicherung

Abbildung 8.32 zeigt die räumliche Verteilung des Kraftstoffmassenbruchs, der sich als Summe aus den Massenbrüchen von iso-Oktan und n-Heptan ergibt, nach Beginn der Rechnung. Hierin ist zu sehen, dass die Kraftstoffanreicherung aus dem Feuerstegbereich entlang der Laufbuchse in Richtung Zylinderkopf transportiert wird, wodurch es zur Durchmischung mit weniger kraftstoffreichem Gas kommt. Bei der Darstellung von 640°KW n. ZOT zeigt sich noch eine hohe Anreicherung direkt in Feuerstegnähe, wobei diese bereits bei 650°KW n. ZOT verschwindet. Um 660°KW n. ZOT lässt sich so gut wie kein Unterschied mehr in der räumlichen Verteilung des Kraftstoffmassenbruchs erkennen. Ursache hierfür ist die ausgebildete Tumble-Strömung und die Aufwärtsbewegung des Kolbens. Beide Ursachen führen zu einer starken Vermischung des kraftstoffreichen Gemisches mit dem Gas aus der Umgebung, so dass sich die starken Gradienten schnell verwischen.

Aufgrund der Verdünnung des fetten Bereiches ist im späteren Verlauf der Rechnung kein signifikanter Anstieg von OH oder CO_2 zu sehen. Deshalb wird an dieser Stelle auf eine weitere Auswertung verzichtet.

8.5.3 Kraftstoffanreicherung im Bereich der Zylinderkopfdichtung

Als zweiter Fall der Kraftstoffanreicherung sollen im Weiteren die Ergebnisse zur Akkumulation im Bereich der Zylinderkopfdichtung vorgestellt werden. Die Lage der Kraftstoffanreicherung ist in Abbildung 8.33 abgebildet. Es kommen erneut die Simulationsergebnisse von VW als Vorlage sowohl für die Lage als auch die Höhe der Akkumulation zur Anwendung. In Abbildung 8.33 sind weiterhin die



im Folgenden verwendeten Auswerteebenen dargestellt.

Abbildung 8.33: Kraftstoffanreicherung in Zylinderkopfnähe (links) und Darstellung der Auswerteebenen (Mitte und rechts) bei y = -0,0186 m respektive z = -0,0003 m

In der oberen Bilderreihe von Abbildung 8.34 ist die räumliche Verteilung des Kraftstoffmassenbruchs in der x-z-Ebene bei y = -0,0186 m und in der unteren Bilderserie in der x-y-Ebene bei z = -0,0003 m zu verschiedenen Kolbenstellungen wiedergegeben. Für das Teilbild in der linken oberen Ecke ist die Kraftstoffanreicherung im Bereich der Zylinderkopfdichtung zu Beginn der Variationsrechnung zu sehen. Weiterhin sind zu Beginn der Rechnung weitere Bereiche in der linken Feuerstegnähe und entlang der rechten Laufbuchse mit erhöhtem Kraftstoffanteil zu erkennen. Aus den Bildern zu späteren Zeitpunkten wird in der oberen Bildserie ersichtlich, dass auf Grund der Tumble-Strömung die räumlichen Gradienten der Kraftstoffverteilung kleiner werden und bei 670°KW n. ZOT nur noch schwach erkennbar sind.

In der unteren Bilderserie aus Abbildung 8.34 ist die Verteilung des Kraftstoffmassenbruchs bei z = -0,0003 m zu sehen. Hier sind zwei markante Ansammlungen im Bereich der Zylinderkopfdichtung deutlich zu erkennen, wovon die linke Akkumulation (markiert durch einen Kreis in Abbildung 8.34) erzwungen wurde. Die zentrale Akkumulation ist das Ergebnis der bis dahin durchgeführten numerischen Simulation, die als Startbedingung für die Variationsrechnung zur Anwendung kommt. Die Betrachtung der Bilder zu den verschiedenen Kolbenstellungen lässt erkennen, dass die erzwungene Kraftstoffansammlung relativ schnell verschwindet und zunächst nur die zentrale Akkumulation verbleibt. Zum späteren Zeitpunkt ist auch diese nicht mehr zu sehen. Es kommt zu einer Homogenisierung der Kraftstoffverteilung. Die Ursache hierfür ist die komplexe Strömung im Bereich der Zylinderkopfdichtung, wobei die aufsteigende Tumble-Strömung an der Kante bei z = unit0,00065m abgelenkt wird und so das Fluid entlang des Zylinderkopfumfangs strömt.

Als Folge der fortschreitenden Homogenisierung des Kraftstoff-Luft-Gemisches hat sich bei fortlaufender Berechnung keine erhöhte Reaktivität durch die Kraftstoffanreicherung ergeben. Auf eine weitere Ergebnisdarstellung wird deshalb an dieser Stelle verzichtet.

Die in diesem Abschnitt vorgestellten Variationsrechnungen führen zu keiner Vorentflammung, weder bei einer Kraftstoffanreicherung in Kolbennähe noch im Bereich der Zylinderkopfdichtung. Somit wird der Einfluss des Kraftstoff-Luft-Verhältnisses auf die Ausbildung einer Vorentflammung als sehr gering eingeschätzt.



Abbildung 8.34: Räumliche Verteilung des Kraftstoffmassenbruchs zu unterschiedlichen Kolbenstellungen bei lokaler Anfettung im Bereich der Zylinderkopfdichtung; oben: x-z-Ebene bei y = -0,0186 m, unten: x-y-Ebene bei z = -0,0003 m

8.6 Öltropfenzufuhr

Schmiermöle sind ein wichtiger Bestandteil des gesamten Triebwerks und erfüllen eine Reihe von Aufgaben:

- Verringerung des Reibungswiderstandes,
- Abdichtung (z.B. in den Ringspalten),
- Schutz vor Alterung und Abnutzung,
- Kühlung und
- Abfuhr von Verunreinigungen /31/.

Um diesen vielfältigen Aufgaben gerecht zu werden, setzen sich Schmieröle aus einem Basisöl und zugeführten Additiven zusammen, wodurch es zu einer Verbesserung gewünschter Eigenschaften kommt. Die Grundlage für die Bereitstellung von Basisölen ist die Destillation von Rohöl, wobei das Basisöl aus langkettigen Kohlenwasserstoffen von C_{20} bis C_{35} besteht /13/. Um den Einfluss langkettiger Kohlenwasserstoffe auf die Zündverzugszeit zu untersuchen, bieten sich 0D-Reaktorsimulationen an. Abbildung 8.35 zeigt das Ergebnis für eine Variation der Kettenlänge sowie unterschiedliche Massenanteile zugeführter Kohlenwasserstoffe, wobei folgende Randbedingungen gelten sollen:

- iso-Oktan/n-Heptan-Luft-Gemisch,
- $\lambda = 1, p = 50$ bar und T = 700 K,

- isochore Zustandsänderungen,
- Zuführung von n-Alkanen und
- Verwendung des in /62/ gefundenen chemischen Reaktionsmechanismus.

Es zeigt sich darin deutlich, dass durch Zugabe längerkettiger Kohlenwasserstoffe die Zündverzugszeit eines Kohlenwasserstoff-Luft-Gemisches drastisch herabgesenkt werden kann, wobei sich der Effekt mit zunehmender Kettenlänge und Massenanteil verstärkt. Bei N-Tetradekan ist entgegen dem Trend ein Anstieg in der Induktionszeit festzustellen. Es scheint, dass sich beim Vorhandensein von $C_{14}H_{30}$ zusätzliche Reaktionspfade ergeben, die zu einer Erhöhung der Induktionszeit führen. Bei N-Hexadekan zeigt sich ein neuerlicher Abfall der Zündverzugszeit, so dass festzustellen bleibt, dass langkettige Alkane grundsätzlich die Zündverzugszeit erniedrigen.



Abbildung 8.35: Verlauf der Zündverzugszeit für die Variation zugeführter n-Alkane bei verschiedenen Massenanteilen

In Abbildung 8.35 wird gezeigt, welch großen Einfluss langkettige Kohlenwasserstoffe, also auch Schmieröl, auf die Zündverzugszeit haben. Die Frage ist nun, wie Schmieröl in den Brennraum gelangt und so als mögliche Ursache für Vorentflammungen angesehen werden kann. Eine mögliche Quelle von kleinen Schmieröltröpfchen ist der Schmierölwandfilm auf der Laufbuchse, der sich bei der Herabbewegung des Kolbens während der Ladungswechselphase bildet /19/. Bei Benzindirekteinspritzung mit ungünstigen Einspritzzeiten kann es vorkommen, dass vermehrt Kraftstoff auf den Schmierölfilm trifft. Das Resultat des Eindringvorgangs mit anschließender Durchmischung von Kraftstoff und Schmieröl sind veränderte Stoffeigenschaften. Zum Ende der positiven Beschleunigungsphase des Kolbens während der Kompression ist es möglich, dass durch die veränderten Stoffeigenschaften, vorrangig Viskosität und Oberflächenspannung, kleine Schmieröltröpfchen von dem Wandfilm gelöst werden und anschließend in den Brennraum gelangen. Auf Grund des thermodynamischen Zustandes im Brennraum erfolgt die Verdampfung des Öltröpfchens. Somit kann lokal ein sehr reaktives Gemisch vorliegen, welches als potentielle Ursache für Vorentflammungen in Frage kommt.

Abbildung 8.36 zeigt die räumliche Verteilung von Spraypaketen im Brennraum während der Einspritzung bei 486°KW n. ZOT. Es ist deutlich zu erkennen, dass einige Kraftstoffpakete in den Bereich des Wandfilms auf der Laufbuchse sowohl einlass- als auch auslassseitig gelangen und hierdurch in Kontakt mit dem Schmieröl treten. Je nach Einspritztiming kann der Wandkontakt zu- oder abnehmen, wobei die Kontakthäufigkeit bei einer Verlagerung der Einspritzung in Richtung ZOT zunimmt.

Als weitere mögliche Quelle für Schmieröltröpfchen kommt der Eintrag über die Ventilschaftdichtung und Schmieröl, welches über den Einlasskanal aus dem Abgasturbolader in den Brennraum gelangt,



Abbildung 8.36: Verteilung der Spraypakete im Brennraum während des Einspritzvorgangs bei 486° KW n. ZOT

in Frage. Diese potentiellen Ursprünge sind kein Gegenstand weiterer Betrachtungen, könnten aber durchaus potenzielle Vorentflammungsursachen sein.

8.6.1 Methodik

Für die Untersuchung des Einflusses von Schmieröl auf die Vorentflammungsneigung wird eine andere Vorgehensweise gewählt, als die in Abschnitt 8.1 beschriebene. Der Grund hierfür ist dem Umstand geschuldet, dass chemische Reaktionsmechanismen zur Beschreibung der Verbrennung von langkettigen Kohlenwasserstoffen in Luft mehrere hundert Spezies und tausende Elementarreaktionen besitzen. Die direkte Kopplung der 3D-CFD mit diesen Mechanismen ist sehr aufwendig und wird deshalb an dieser Stelle indirekt durchgeführt. Hierfür werden 0D-Reaktorsimulationen verwendet, in denen die thermodynamischen Randbedingungen aus einer 3D-CFD entnommen werden können.

Die 0D-Simulationen werden gänzlich mit dem Werkzeug Cantera durchgeführt. Die Beschreibung der chemischen Reaktionskinetik erfolgt auf Basis eines Mechanismus, der die Verbrennung langkettiger Kohlenwasserstoffe in Luft beschreibt /62/. Dieser Mechanismus setzt sich aus 359 Spezies und 10951 Reaktionen zusammen, wobei n-Cetan die längste Kettenlänge aufweist.

Durch Abbildung 8.36 kann gezeigt werden, dass flüssiger Kraftstoff an die Wand und damit an den Schmierölwandfilm gelangt. Dabei kommt es sowohl auf der Einlass- wie auf der Auslassseite zum Kontakt mit dem Wandfilm. Auf Grund des hohen Impulses der Tropfenpakete auf der Auslassseite erscheint das Eindringen von Kraftstoff auf dieser Seite in den Schmierölfilm am wahrscheinlichsten. Zudem kann vermutet werden, dass durch eine Spätverstellung der Einspritzung der Wandkontakt auf der Auslassseite zunimmt, denn wie aus Abbildung 7.12 auf Seite 66 zu sehen ist, nimmt der Massenstrom am Einlassquerschnitt nach dem Maximum bei 440°KW n. ZOT ab. Somit werden die Tropfenpakete bei später Einspritzung durch die Fluidströmung weniger stark mitgerissen und penetrieren weiter. Als wahrscheinlichster Zeitpunkt für die Freisetzung kleiner Schmieröltröpfchen aus dem Feuerstegraum wird die Verzögerungsphase des Kolbens im Kompressionshub vermutet. Hier können auf Grund der negativen Beschleunigung des Kolbens Schmieröltröpfchen mit genügend großem Impuls in den Brennraum gelangen.

Zur Vorbereitung der 0D-Reaktorrechnungen erfolgt eine numerische Simulation des Kompressionstaktes, in dem für ausgewählte Zellen auf der Auslassventilseite die thermodynamischen Bedingungen Druck und Temperatur bestimmt und aufgezeichnet werden, s. Abbildung 8.37. Hierin ist der erwartete Anstieg von Druck und Temperatur während der Kompression zu sehen. Der Temperaturverlauf erreicht das Maximum bei 707°KW n. ZOT und fällt danach wieder ab. Dies lässt sich zum einen durch den zunehmenden Einfluss der Wandwärmeverluste und zum anderen durch die Strömungsstruktur in diesem Brennraumbereich erklären, denn durch die Hinaufbewegung des Kolbens wird in der Nähe des OT eine Quetschströmung induziert. Dadurch kommt es zu einem Abtransport von Fluidmasse aus diesem Bereich und damit zu einer Abkühlung. Der Kompressionsdruck erreicht das Maximum von 49,3 bar kurz vor ZOT und nimmt nach dessen Überschreitung ab.



Abbildung 8.37: Druck und Temperatur während des Kompressionstaktes ohne Zündung für ausgewählte Zellen auf der Auslassventilseite

Die Berechnung der Anfangszusammensetzung für die 0D-Simulationen ergibt sich aus der Gasmasse, die das Resultat der numerischen Simulation für die ausgewählten Zellen ist, sowie einer zugeführten Ölmasse aus dem Schmierölwandfilm. Hierbei wird angenommen, dass ein Öltropfen in den Brennraum mit einer vom Durchmesser abhängigen Schmierölmasse freigesetzt wird. Die Abschätzung der Ölmasse erfolgt nach Annahme sphärischer Form und bei Vorgabe des Durchmessers nach

$$m_{\ddot{O}l} = \rho_{\ddot{O}l} \frac{1}{6} \pi d_{\ddot{O}l}^3.$$
(8.1)

Für die Dichte des Schmieröls wird ein Wert von $\rho_{\ddot{O}l} = 850 \text{ kg/m}^3$ in der Flüssigkeitsphase angenommen /13/. Da der Mechanismus als längste Kette n-Hexadekan $C_{16}H_{34}$ beinhaltet, wird diese Substanz zur Repräsentation des Schmieröls verwendet.

In dem vorgestellten Ansatz erfolgt keine Berücksichtigung der Verdampfung des flüssigen Schmieröls im Bereich der Zylinderwand. Vielmehr wird für die 0D-Rechnungen davon ausgegangen, dass das Öl bereits im gasförmigen Zustand vorliegt und sich homogen mit dem Gas in den ausgewählten Zellen vermischt hat.

8.6.2 Ergebnisse

Bei Verwendung der obigen Randbedingung und unter Annahme des Durchmessers für das Öltröpfchen von $d_{\ddot{O}l} = 10 \ \mu$ m ergibt sich für unterschiedliche Freisetzungswinkel der in Abbildung 8.38 dargestellte Verlauf des Induktionswinkels $\varphi_{Induktion}$ in Grad Kurbelwellenwinkel. Mit steigendem Freisetzungswinkel fällt der Induktionswinkel. Das liegt vor allem an den steigenden thermodynamischen Bedingungen Druck und Temperatur während der Kompression. Das Minimum des Induktionswinkels tritt bei einer Ölfreisetzung um 700°KW n. ZOT ein. Hier erfolgt die Selbstzündung ca. 15°KW nach Freisetzung des Öltröpfchens in das umgebende Gas. Danach steigt der Induktionswinkel an, was hauptsächlich daran liegt, dass die Temperatur trotz weiterer Kompression abnimmt, s. Abbildung 8.37. Bei einem Auslösen von Schmieröl nach 720°KW n. ZOT ereignet sich die Selbstzündung des Kraftstoff-Luft-Gemisches so spät, das sie außerhalb des hier betrachteten Kurbelwellenwinkelbereichs liegt und somit keine Berücksichtigung bei der Auswertung findet.



Abbildung 8.38: Verlauf des Induktionswinkels bei ansteigendem Freisetzungswinkel für ein Modelltröpfchen von $d_{\ddot{O}l} = 10 \ \mu m$

Wird der Induktionswinkel in Relation zum ZOT gesetzt, resultiert daraus Abbildung 8.39, wobei wiederum der Freisetzungswinkel variiert wird. Die ockerfarbene, waagerechte Linie markiert den für Vorentflammungen kritischen Kurbelwellenwinkelbereich, der im Wertebereich von [680, 735]°KW n. ZOT liegt. Es soll darauf hingewiesen werden, dass sehr frühe Selbstzündungen des Kraftstoff-Luft-Gemisches im Intervall [680, 700]°KW n. ZOT ebenfalls als Vorentflammung gewertet werden. Michels et al. weisen jedoch nach, dass bei sehr frühem Selbstzündungsbeginn die resultierenden Klopfintensitäten nachlassen /47/. Das liegt an der ungenügenden Aufbereitung des Gemisches zu diesem Zeitpunkt der Kompression sowie dem relativ großen Brennraumvolumen zum Zeitpunkt der Selbstzündung. Zudem sei noch darauf hingewiesen, dass der Kurbelwellenwinkelbereich, in dem Vorentflammungen auftreten, nicht starr ist, sondern sich je nach Lastpunkt verschieben wird. So lässt sich für höhere Saugrohrdrücke bzw. Mitteldrücke erwarten, dass die obere Grenze in Richtung "spät" wandert, um eine klopfende Verbrennung zu vermeiden. Ebenso werden sehr früh auftretende Selbstzündungen auf Grund der höheren Ladungsdichte stärkere Klopfintensitäten aufweisen.

Findet die Ölfreisetzung im Zeitraum 630 bis 680°KW n. ZOT statt, liegt die daraus resultierende Selbstzündung im Bereich [680, 700]°KW n. ZOT, s. Abbildung 8.39. Bei einem Freisetzungswinkel von 680°KW n. ZOT erfolgt die Zündung des Gemisches ungefähr 25°KW vor dem ZOT. Das liegt daran, dass der Induktionswinkel nur 15°KW beträgt (s. Abbildung 8.38) und damit die Selbstzündung relativ früh auftritt. Bei späteren Freisetzungswinkeln von 690 und 700°KW n. ZOT erscheint die Vorentflammung wieder im kritischen Bereich. Zudem ist eine Annäherung an den ZOT festzustellen, was wiederum zu sehr starken Klopfintensitäten führt.



Abbildung 8.39: Induktionswinkel in Relation zum oberen Totpunkt über den Freisetzungswinkel für ein Modelltröpfchen von $d_{\ddot{O}l} = 10 \ \mu \text{m}$

Bei einem noch späteren Freisetzungswinkel von 710°KW n. ZOT kommt es zu einer klaren Verlagerung des Induktionswinkels in den Bereich der oberen Grenze. Eine mögliche Erklärung ist im Absinken der Temperatur bereits vor dem ZOT zu finden, was auf erhöhte Wandwärmeverluste und die durch die Kolbenbewegung induzierte Quetschströmung im Bereich der Auslassventile zurückzuführen ist. Dieser Trend verstärkt sich noch bei einer Ölfreisetzung um den ZOT, denn hier nimmt zudem der Druck auf Grund der beginnenden Abwärtsbewegung des Kolbens wieder ab. Bei $\varphi_{Freisetzung} = 720^{\circ}$ KW n. ZOT erfolgt die Selbstzündung außerhalb des kritischen Bereiches und kann demnach nicht mehr als Vorentflammung bewertet werden.

Die in den Abbildungen 8.38 bzw. 8.39 gezeigten Ergebnisse sind mit einem Öltropfendurchmesser von 10 μ m errechnet worden. Wie verhält sich der Induktionswinkel, wenn der Öltropfendurchmesser und damit auch die zugeführte Ölmasse erhöht wird? Die Antwort auf die Frage ist in Abbildung 8.40 dargestellt, wobei der Induktionswinkel wieder über dem Freisetzungswinkel für die drei Modelltropfendurchmesser $d_{\ddot{O}l} = 0,01$ mm, $d_{\ddot{O}l} = 0,1$ mm und $d_{\ddot{O}l} = 1$ mm aufgetragen ist. Hieraus lässt sich der deutliche Trend ableiten, dass mit zunehmenden Durchmesser der Induktionswinkel zu höheren Freisetzungswinkeln abnimmt. Besonders markant fällt der Unterschied beim Vergleich $d_{\ddot{O}l} = 1$ mm und $d_{\ddot{O}l} = 0,01$ mm aus. Die wahrscheinlichste Ursache liegt im deutlich fetteren Gemisch bei Zugabe eines Öltröpfchen mit dem größten Durchmesser von 1 mm. Im Gegensatz dazu weist ein Tropfen mit einem Durchmesser von 0, 1 mm im Vergleich zu $d_{\ddot{O}l} = 0,01$ mm keinen großen Unterschied auf. Teilweise zeigt der kleinere Tropfen sogar eine kürzere Zündverzugszeit.

Abbildung 8.41 zeigt den Verlauf des Induktionswinkels über den Freisetzungswinkel in Bezug auf den ZOT für die untersuchten Tropfendurchmesser. Der für die Vorentflammung kritische Kurbelwellenwinkelbereich wird durch die ockerfarbene Horizontale markiert. Es ist zu erkennen, dass der qualitative Verlauf für alle drei Durchmesser ähnlich ist. Während die Ergebnisse für die Durchmesser 0,01 mm und 0,1 mm sehr ähnlich sind und teilweise übereinander liegen, zeigt sich zum größten Tropfendurchmesser von $d_{Ol} = 0,1$ mm der größte Unterschied. Während die Selbstzündung des



Abbildung 8.40: Induktionswinkel über Freisetzungswinkel für unterschiedliche Öltropfendurchmesser

Gemisches bei einer Freisetzung von 690°KW n. ZOT für die beiden kleinsten Durchmesser nach 700°KW n. ZOT auftritt, erfolgt die Vorentflammung beim größten Öltröpfchen bereits einige Grad Kurbelwellenwinkel vorher. Die hieraus resultierende Klopfintensität könnten unter dem hier untersuchten Lastpunkt deutlich niedriger ausfallen.

Weiterhin lässt sich in Abbildung 8.41 zeigen, dass selbst bei einer Freisetzung um den ZOT die Vorentflammung innerhalb des kritischen Bereiches für $d_{\ddot{O}l} = 0, 1$ mm liegt. Dies konnte so mit den kleineren Tröpfchen nicht nachgewiesen werden. Während große Öltröpfchen gerade bei frühen Freisetzungswinkeln bis 680°KW n. ZOT dazu führen, dass die Selbstzündung klar vor 700°KW n. ZOT stattfindet, führen sie für spätere Freisetzungswinkel zu einer kritischen Zündverzugszeit im Bereich [700, 735]°KW n. ZOT.



Abbildung 8.41: Induktionswinkel in Relation zum oberen Totpunkt über den Freisetzungswinkel für unterschiedliche Öltropfendurchmesser

In diesem Abschnitt werden die Folgen einer spontanen Öltröpfchenfreisetzung im Bereich des Feuerstegs auf der Auslassseite mittels indirektem Ansatz durch 3D-CFD-Simulation und 0D Reaktorsimulationen untersucht. Hierzu sind die thermodynamischen Größen wie Druck und Temperatur im Bereich der Zylinderwand in der 3D Simulation aufgezeichnet worden, um sie anschließend als Randbedingungen für 0D-Berechnung zu verwenden. Für die Beschreibung der chemischen Vorgänge kam ein Mechanismus zur Anwendung, der als längste Spezies n-Cetan enthält. Das freigesetzte Öl wird dann auch als 100% n-Cetan angesehen.

Aus den dargestellten Ergebnissen konnte klar gezeigt werden, dass eine spontane Freisetzung von Schmieröl aus dem Wandfilm in jedem Fall zu einer Selbstzündung führen kann. Erfolgt die Evakuierung des Öls aus dem Feuersteg in den Brennraum um 690°KW n. ZOT, so resultiert daraus eine Vorentflammung im kritischen Bereich von 700 bis 735°KW n. ZOT. Ereignet sich die Freisetzung zu einem früheren Zeitpunkt, folgt daraus zwar ebenfalls eine Vorentflammung, jedoch wären die zu erwartenden Klopfintensitäten geringer.

Es wird ebenfalls eine Variation des Tropfendurchmessers durchgeführt, wobei der Trend zu einer früheren Zündverzugszeit mit anwachsendem Durchmesser geht. Besonders kritisch sind große Tropfendurchmesser und damit viel zugeführte Schmierölmasse bei einer Freisetzung um 700 bis 720° KW n. ZOT, denn dies führt immer zu einer Vorentflammung. Für kleinere Durchmesser verschiebt sich der bedenkliche Bereich zu 690 bis 710°KW n. ZOT.

Neben der Laufbuchse existieren noch weitere mögliche Quellen für Schmieröl im Triebwerk, vgl. Abbildung 1.12. Hierzu zählt z.B. der Turbolader oder die Ventilschaftdichtung. Prinzipiell ist die Untersuchung dieser Quellen mit dem vorgestellten Modell ebenfalls möglich, wobei die Berücksichtigung der eigentlich vorliegenden flüssigen Phase implementiert werden müsste. Die Modellierung der eigentlichen Chemie-Turbulenz-Interaktion mit dem PaSR-Modell und dem vollständigen n-Cetan Mechanismus stellt hohe Anforderungen an die Rechentechnik und kann nur mit massiver Parallelisierung erreicht werden.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die spontane Freisetzung von Schmieröl aus dem Feuersteg in den Brennraum hinein als eine wahrscheinliche Ursache für eine Vorentflammung in Frage kommt.

Abschließend zu diesem Abschnitt sollen mögliche Gegenmaßnahmen diskutiert werden, die das Auftreten von Vorentflammungen, resultierend aus einer Ölfreisetzung aus dem Wandfilm, beseitigen. Als wirksamste Maßnahme wird das Vermeiden von direktem Kontakt zwischen Schmieröl und Kraftstoff angesehen. Dies lässt sich durch Anwendung von Mehrfacheinspritzung bewerkstelligen, die die eingebrachte Kraftstoffmenge auf mehrere nacheinander folgende Einspritzungen aufteilt. Die Aufteilung des Einspritzvorgangs in mehrere Intervalle wird heutzutage vorrangig zum Katalysatorheizen und zur Reduktion der Klopfneigung verwendet /4/. Die Erprobung der Mehrfacheinspritzung zur Vermeidung von Vorentflammung sollte demnach möglich sein, wobei der Einsatz numerischer Methoden empfehlenswert ist, da die Einspritzung hierin relativ flexibel über den Einspritzverlauf regelbar ist. Die Optimierung der Einspritzzeiten und -mengen stellt die Automobilhersteller vor eine herausfordernde Aufgabe, die einen Mehraufwand an Applikationsaufwand bedeutet.

Eine weitere Möglichkeit, den Wandkontakt zwischen Kraftstoff und Schmieröl zu minimieren, besteht in der Vorverlagerung des Einspritzzeitpunktes. Hierfür spricht, dass gerade um den LWOT sehr hohe Strömungsgeschwindigkeiten auftreten, die direkten Einfluss auf die Flugbahn der Einspritzstrahlen haben. Somit wird der Spray eher vom Tumble überlagert und mitgerissen, als das sein Impuls genügt, um an die Wand zu gelangen. Nachteilig wirkt sich die Vorverlegung der Einspritzung auf die Benetzung des Kolbens durch Kraftstoff aus. Bei einer frühen Einspritzung befindet sich der Kolben noch relativ nah am oberen Totpunkt, wodurch in der späteren Verbrennung hohe Konzentrationen an unverbrannten Kohlenwasserstoffen und Rußpartikel resultieren können. Es muss also ein Kompromiss zwischen Minimierung des Wandkontakts und Ruß- sowie HC-Bildung gefunden werden.

Daneben bietet sich die Beeinflussung der Einspritzdüse als weitere Gegenmaßnahme an. Als Bei-

spiel könnte die Lochanzahl erhöht werden, dass sich die effektive Querschnittsfläche, die zur Einspritzung zur Verfügung steht, vergrößert. Dies erniedrigt den Impuls des eingebrachten Kraftstoffstrahls. Durch Abänderung der Injektorgeometrie (z.B. der Lochgeometrie) kann direkt Einfluss auf den Zerstäubungsprozess des Kraftstoffstrahls genommen werden und damit auf die Penetration. Die Untersuchung hinsichtlich Injektorgeometrie sollte dabei immer in Abstimmung mit der Ladungsbewegung im Brennraum erfolgen, um eine erfolgreiche Maßnahme zur Vermeidung des Wandkontakts zwischen Kraftstoff und Schmieröl zu entwickeln. Aussagen über die mögliche Realisierung könnten durch 3D-CFD-Simulationen und experimentelle Motorversuche erzielt werden.

Mittels indirekter Kopplung von CFD und 0D-Reaktorsimulation ist es möglich, den Einfluss von Schmieröl auf die Ausbildung von Vorentflammungen im Brennraum zu analysieren. Hierbei zeigte sich bei jeder Freisetzung von Schmieröl eine daraus folgende Selbstzündung, wobei vor allem ein Freisetzungswinkel von 700 bis 720°KW n. ZOT, je nach Durchmesser des Öltröpfchens, als kritisch hinsichtlich Vorentflammungen bewertet wird.

Als Gegenmaßnahmen werden vom Autor hauptsächlich Strategien zur Wandkontaktvermeidung von Kraftstoff und Schmieröl an der Laufbuchse vorgeschlagen. Diese lassen sich wie folgt zusammenfassen:

- Multiinjektion von Kraftstoff,
- frühe Einspritzzeiten und
- Abänderung der Injektorgeometrie (z.B. Lochanzahl oder Lochgeometrie).

Bei Ausarbeitung der Vorschläge wurde das Gesamtsystem Motor nicht analysiert. Dies liegt außerhalb des Betrachtungsrahmens dieser Arbeit.

9 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit sollten mögliche chemisch-physikalische Wirkungsmechanismen, die eine Bildung von Vorentflammungen positiv begünstigen können, untersucht werden. In einem ersten Schritt erfolgte eine Recherche zum aktuellen Stand der Wissenschaft bzgl. der Eigenschaften von Vorentflammungen und deren Auslösemechanismen.

Da es sich bei der Vorentflammung um ein Selbstzündphänomen handelt, erfolgt eine Sensibilitätsstudie der Zündverzugszeit anhand von 0D-Reaktorsimulationen. Hierdurch können wichtige Abhängigkeiten detektiert werden, die das Verständnis über die chemischen Vorgänge bei einer Vorentflammung vertiefen. Aus der Literaturrecherche und den 0D-Reaktorsimulationen ergeben sich die für eine Variation prädestinierten ottomotorischen Parameter. Diese konnten mit Hilfe der 3D-CFD-Simulation gezielt und ergebnisorientiert untersucht werden. Dadurch ergeben sich neue wissenschaftlichen Erkenntnisse, die neue Wirkmechanismen aufzeigen.

Die Anwendung numerischer Methoden bietet dem Anwender den Vorteil, einen tiefen Einblick in die physikalisch-chemischen Vorgänge innerhalb des Motors zu erlangen. Weiterhin können umfangreiche Parametervariationen mit vergleichbar geringem Aufwand durchgeführt werden. Für die Abbildung der innermotorischen Prozesse wird ein ganzheitliches Modell präsentiert, das die bilanzierten Größe anhand von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen beschreibt. Komplettiert wird das Gesamtmodell durch das Spray- und Chemie-Turbulenz-Interaktions-Modell.

Ein besonderes Augenmerk bei der Modellerstellung liegt in der direkten Kopplung von detaillierter chemischer Reaktionskinetik und dreidimensionaler Strömungssimulation. Detaillierte Reaktionsmechanismen bieten den Vorteil die chemischen Prozesse sehr genau abzubilden, weshalbb dieser Ansatz gewählt wurde. Grundlage zur Beschreibung der thermodynamisch-chemischen Vorgänge ist ein Mechanismus, der die Verbrennung von iso-Oktan/n-Heptan-Luft-Gemischen abbildet. Um die Rechenzeiten effizient zu gestalten, kann der Mechanismus durch Sensibilitätsstudien in 0D-Reaktorsimulationen auf die Prozesse im Niedertemperaturbereich, d.h. auf die Selbstzündung, optimiert werden. Hierbei wird darauf geachtet, dass der Selbstzündbeginn zwischen detailliertem und reduziertem Mechanismus übereinstimmt.

Nach der Modellerstellung erfolgt die Überprüfung des Modells anhand von Mess- und Simulationsdaten. Hierbei zeigt sich beim Vergleich des Strömungsmodells mit experimentellen PIV-Daten eine gute bis sehr gute Übereinstimmung in der globalen Strömungsstruktur sowie der zweidimensionalen Geschwindigkeitsverteilung. Das Spraymodell kann erfolgreich an Druckkammer-Messdaten validiert werden, wobei als Vergleichsgröße die Penetration und der Spraykegelwinkels des Kraftstoffstrahls verwendet wird. Beim Vergleich des Gesamtmodells in OpenFOAM mit dem kommerziellen CFD-Code VECTIS der Fa. Ricardo zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung. Mit dem präsentierten ganzheitlichen Modell können nun gezielte Parameteruntersuchungen durchgeführt werden, um erstens das Auftreten von Vorentflammungen zu vermeiden und zweitens neue Verbrauchseinsparpotentiale mit dem Downsizing Prinzip zu erschließen.

Als ein kritischer Einflussfaktor hinsichtlich Vorentflammungsbildung wird die Auslassventiltemperatur detektiert. Durch eine gezielte Variation dieses Parameters ist eine Grenztemperatur von 873 K für den untersuchten Lastpunkt identifiziert worden. Bleibt die Temperatur darunter, tritt wahrscheinlich keine Vorentflammung auf. Mittels effektiver Spülung zum Zeitpunkt der Ventilüberschneidung, Verschiebung des Luftverhältnisses und neuer Kühlkonzepte kann die Oberflächentemperatur der Auslassventile gesenkt werden. Zusätzlich kann die geometrische Form der Auslassventile durch Anbringen einer Fase im Bereich des Ventiltellers optimal an die Form des Zylinderkopfes angepasst werden. Somit wird der Bildung eines Windschattengebietes in der Nähe des Ventilsitzes entgegen gewirkt.

Fördernde Einflussfaktoren auf die Vorentflammung sind der umfangseitige Ringspalt in der Zündkerze sowie die gerichtete Orientierung der Fremdzündungsquelle. Beide führen zur Ausbildung von zusätzlichen Windschattengebieten im Brennraum und damit zu einer erhöhten Reaktivität. Im Gegensatz dazu zeigte die geschlossene Zündkerze keine erhöhte Reaktivität. Dadurch lässt sich die Forderung nach dieser Konfiguration aufstellen, um damit Vorentflammungen effektiv entgegenwirken zu können.

Als sehr wahrscheinlich wird der Einfluss von realem Abgas auf das Vorentflammungsphänomen, im Besonderen von Stickstoffmonoxid, angesehen. So ist es im Rahmen dieser Arbeit gelungen, die deutliche Wirkung von Stickstoffmonoxid auf die Selbstzündung des Kraftstoff-Luft-Gemisches nachzuweisen. Es zeigt sich zudem, dass der Einfluss von *NO* durch das Vorhandensein von unverbrannten Kohlenwasserstoffen im Abgas etwas gedämpft wird. Mittels Einbau eines katalytisch wirksamen Reformers in die Abgasrückführungsstrecke lässt sich ein deutliches Abschwächen des Einflusses von *NO* erwarten. Um die *NO* Konzentration des im Brennraum verbleibenden Abgases zu senken, bietet sich eine intensivierte Spülung und eine Verlagerung des Luftverhältnisses in Richtung "fett" an.

Bei lokaler Anfettung des Gemisches durch künstliche Kraftstoffanreicherung im Bereich des Feuerstegs oder der Zylinderkopfdichtung kann keine erhöhte, aus der Akkumulation von Kraftstoff resultierende, Reaktivität detektiert werden. Der Einfluss von lokaler Kraftstoff-Akkumulation auf eine Vorentflammung erscheint sehr gering.

Als wahrscheinlichste Ursache einer Vorentflammung ergibt sich in dieser Arbeit die Freisetzung von Schmieröl im Bereich der Laufbuchse. Hierbei folgt eine Selbstzündung in jedem Fall einer Ölfreisetzung. Besonders bei einer Freisetzung um 700 bis 720°KW n. ZOT lassen sich je nach Öltropfendurchmesser Vorentflammungen mit besonders hohen Druckamplituden und -frequenzen erwarten. Multiple Einspritzereignisse und eine Frühverstellung der Einspritzung könnten der Freisetzung von Schmieröl entgegen wirken, da diese direkt auf die Wahrscheinlichkeit eines Wandkontakts zwischen Kraftstoff und Schmieröl entgegenwirken. Ebenfalls positiv auf die Vermeidung des Wandkontakts könnten sich andere Injektorgeometrien auswirken.

Durch die vorgeschlagenen Gegenmaßnahmen können neue Verbrauchspotentiale mit dem Downsizing-Prinzip erschlossen werden. Inwiefern die daraus resultierenden höheren Aufladegrade die Grenzen der Parameter für die Vorentflammung, wie Auslassventiltemperatur, weiter nach unten verschieben, kann an dieser Stelle nicht hinreichend geklärt werden.

Zusätzlich birgt die Grobstruktursimulation ein großes Potential hinsichtlich der Vorentflammungsuntersuchung. Hierdurch könnte der chaotische Charakter dieser Verbrennungsanomalie weiter untersucht werden. Goryntsev /27/ zeigt auf anschauliche Weise, welchen Schwankungen die Zustandsgrößen innerhalb des Brennraums unterworfen sind. Dies bietet eine mögliche Erklärung hinsichtlich des sporadischen Charakters einer Vorentflammung.

Literaturverzeichnis

- /1/ AHMED, S. S. ; MORÉAC, G. ; ZEUCH, T. ; MAUSS, F.: Reduced Mechanism for the Oxidation of the Mixtures of n-Heptane and iso-Octane. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting* (2005)
- /2/ ALLORCA, L. ; BELLA, G. ; DE VITA, A. ; DI ANGELO, L.: Experimental Validation of a GDI Spray Model. In: Society of Automotive Engineers (2002), Nr. 2002-01-1137
- /3/ ANDERSON, J. D. jr.: Computational Fluid Dynamics The Basics with Applications. New York
 : McGraw Hill, 1995
- /4/ BASSHUYSEN, R. van (Hrsg.); SCHÄFER, F. (Hrsg.): Handbuch Verbrennungsmotor Grundlagen, Komponenten, System, Perspektive. 4. Auflage. Vieweg & Sohn, 2007
- /5/ BAUMGARTEN, C.: Mixture Formation in Internal Combustion Engines. Berlin : Springer, 2006
- /6/ BIRD, R. B.; STEWARD, W. E.; LIGHTFOOT, E. N.: Transport Phenomena. 2. Auflage. New York : John Wiley & Sons, 2002
- /7/ BRADLEY, D. ; KALGHATGI, G. T. ; GOLOMBOK, M. ; J. Y.: Heat Release Rate Due To Autoignition, And Their Relationship To Knock Intensity in Spark Ignition Engines. In: Symposium International on Combustion 26 (1996), S. 2653–2660
- /8/ BRADLEY, D.; LAU, A. K. C.; SHEPPARD, C. G. W.: Role of Exothermic Centres on Knock Initiation and Knock Damage. In: Society of Automotive Engineers (1990), Nr. 902136
- /9/ BRANDT, M.: Beschreibung der Selbstzündung in turbulenter Strömung unter Einbeziehung ternärer Mischvorgänge, TU München, Diss., 2005
- /10/ BUDDE, M. ; MORCINKOWSKI, B. ; EWALD, J. ; SCHERNUS, C. ; ADOMEIT, P.: Simulation von reaktionskinetisch verursachten Verbrennungsanomalien als Teil der Kanal- und Brennraumauslegung. In: Tagungsband Ottomotorisches Klopfen - irreguläre Verbrennung (2010)
- /11/ BÄUERLE, B.: Untersuchung der zeitlichen Entwicklung von Klopfzentren im Endgas eines zweitakt Ottomotors mittels zweidimensionaler laserinduzierter Fluoreszens von Formaldehyd, Universität Stuttgart, Diss., 2001
- /12/ CARUGGI, M. ; NILBERTO, A. ; PITTALUGA, F.: Detailed Chemistry Prediction of Time-Dependent Turbulent-Combustion within a Gasoil-Fueled Rapid-Mix Burner-Combustor System. http://130.251.121.2/SCL/Comb_Ins1.pdf, Abruf: 16.05.2011. 28th Meeting of the Italian Section of The Combustion Institute

- /13/ CASTROL AG: ABC der Schmierung Aufbau, Verwendung und Eigenschaften von Schmierstoffen. Version: 2009. http://www.castrol.com/liveassets/bp_internet/castrol/castrol_ switzerland/STAGING/local_assets/downloads/a/ABC_D_Mai_2009.pdf, Abruf: 24.06.2011
- /14/ CHEVALIER, C. ; LOUSSARD, P. ; MÜLLER, U. C. ; WARNATZ, J.: A Detailed Low-Temperature Reaction Mechanism of n-Heptane Auto-Ignition. In: *International Symposium COMODIA 90* (1990), S. 93–97
- /15/ CHEVALIER, C. ; MELENK, H. ; WARNATZ, J.: Automatic Generation of Reaction Mechanisms for Description of Oxidation of Higher Hydrocarbons. Version: 1990. http://vs24.kobv.de/ documents-zib/36/SC-90-08.pdf, Abruf: 17.03.2011
- /16/ CLERIDES, D.: Numerical Simulation of Spray Processes in Diesel Engines, Imperial College, Diss., 1997
- /17/ CORREA, C.: Combustion Simulation in Diesel Engines using Reduced Reaction Mechanisms, Universität Heidelberg, Diss., 2000
- /18/ CRUSIUS, J. P.: Interne Kommunikation. 2010
- /19/ DAHNZ, C. ; KYUNG-MAN, H. ; MAGER, M. ; SPICHER, U. ; MAAS, U.: Vorentflammung bei Ottomotoren. Universität Karlsruhe : FVV Forschungsvorhaben Nr. 931, 2009
- /20/ DAHNZ, Ch.; KYUNG-MAN, H.; SPICHER, U.; MAGER, M.; SCHIESSL, R.; MAAS, U.: Investigations on Pre-Ignition in Highly Supercharged SI Engines. In: Society of Automotive Engineers (2010), Nr. 2010-01-355
- /21/ DIMOTAKIS, P. E.: Turbulent Mixing. In: Annual Reviews of Fluid Mechanics 37 (2005), S. 329–356
- /22/ DUKOWICZ, J. K.: A Particle-Fluid Numerical Model for Liquid Sprays. In: Journal of Computational Physics 35 (1978), S. 229–253
- /23/ FERGUSON, C. R ; KIRKPATRIK, A. T.: Internal Combustion Engines. Hoboken : John Wiley and Sons, 2001
- /24/ FERZIGER, J. H.; PERIC, M.: Numerische Strömungsmechanik. Berlin : Springer, 2008
- /25/ GERLINGER, P.: Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung. Berlin : Springer, 2005
- /26/ GOLLOCH, R.: Downsizing bei Verbrennungsmotoren. Berlin, Heidelberg : Springer, 2005
- /27/ GORYNTSEV, D.: Large Eddy Simulation of the Flow and Mixing Field in an Internal Combustion Engine, Technische Universität Darmstadt, Diss., 2007
- /28/ GRIFFITHS, J. F.; BARNARD, J. A.: Flame and Combustion. 3. Auflage. London : Chapman & Hall, 1995

- /29/ HAN, Z.; PARRISH, S.; FARRELL, P. V.; REITZ, R. D.: Modelling Atomization Processes of Pressure Swirl Hollow-Cone Fuel Sprays. In: Atomization and Spray 7 (1997), S. 663–684
- /30/ HERWIG, H.: Strömungsmechanik Eine Einführung in die Physik und die mathematische Modellierung von Strömungen. Berlin : Springer, 2002
- /31/ HEYWOOD, J. B.: Internal Combustion Engine Fundamentals. New York : McGraw Hill, 1988
- /32/ HOFFMEYER, H. ; MONTEFRANCESCO, E. ; BECK, L. ; WILLAND, J. ; ZIEBART, F. ; MAUSS,
 F.: CARE Catalytic Reformated Exhaust gases in turbocharged DISI-Engines. In: Society of Automotive Engineers (2009), Nr. 2009-01-0503
- /33/ HOFMANN, P. ; KLIEBERGER, M. ; GERINGER, B. ; WILLAND, J. ; JELITTA, C.: Auslösemechanismen und Einflussfaktoren auf Vorentflammungsphänomene an hoch aufgeladenen Ottomotoren. In: 17. Aachener Kollogium Fahrzeug- und Motorentechnik (2008), S. 1019–1038
- /34/ INTERNATIONAL ENERGY AGENCY: Transport, Energy and CO₂: Moving towards Sustainability. 2009
- /35/ KARLSSON, J. A. J.: Modeling Auto-Ignition, Flame Propagation and Combustion in Nonstationary Turbulent Sprays. Göteborg, Chalmers University of Technology, Diss., 1995
- /36/ KECH, J. M.: Numerische Simulation der Zylinderinnenströmung und Kraftstoffumsetzung in einem direkteinspritzenden Ottomotor, Universität Karlsruhe, Diss., 1999
- /37/ KRALJ, C.: Numerical Simulation of Diesel Spray Processes, Imperial College, Diss., 1995
- /38/ KREBS, R. ; SZENGEL, R. ; MIDDENDORF, H. ; SPERLING, H. ; SIEBERT, W. ; THEOBALD, J. ;
 MICHELS, K.: Neuer Ottomotor mit Direkteinspritzung und Doppelaufladung von Volkswagen.
 In: Motortechnische Zeitschrift (2005), Nr. 12
- /39/ KÄRRHOLM, F. P.: Numerical Modelling of Diesel Spray Injection, Turbulence Interaction and Combustion. Göteborg, Chalmers University of Technology, Diss., 2008
- /40/ LEOCOCQ, G.; RICHARD, S.; MICHEL, J.-B.; VERVISCH, L.: A new LES model coupling flame surface density and tabulated kinetics approaches to investigate knock and pre-ignition in piston engines. In: *Proceedings of the Combustion Institute* (2011), Nr. 33
- /41/ MAGNUSSEN, B. F.: On the Structure of Turbulence and a Generalized Eddy Dissipation Concept for Chemical Reaction in Turbulent Flow. In: 19th American Institute of Aeronautics and Astronautics Aerospace Science Meeting (1981)
- /42/ MAGNUSSEN, B. F.: Modeling of NOx and Soot Formation by the Eddy Dissipation Concept. In: International Flame Research Foundation (1989)
- MAGNUSSEN, B. F.: The Eddy Dissipation Concept A Bridge Between Science and Technology. In: ECCOMAS Thematic Conference on Computational Combustion (2005)

- /44/ MAGNUSSEN, B. F. ; HJERTAGER, B. H.: On Mathematical Modeling of the Turbulent Combustion With Special Emphasis on Soot Formation an Combustion. In: 16th Symposium in Combustion (1977), S. 719–729
- MENTER, F. R.: Two-Equation Eddy-Viscosity Turbulence Models for Engineering Applications. In: American Institute of Aeronautics and Astronautics 32 (1994), S. 1598–1605
- /46/ MERKER, G.; SCHWARZ, Ch.; STIESCH, G.; OTTO, F.: Verbrennungsmotoren Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung. 3. Auflage. Teubner, 2006
- /47/ MICHELS, K. ; BIRKIGT, A. ; THEOBALD, J. ; MAUSS, F. ; BENZ, Ch. ; CRUSIUS, J. ; NOCKE, J. ; HASSEL, E.: Analyse von Verbrennungsanomalien bei hoch aufgeladenen Ottomotoren mit Direkteinspritzung. In: Konferenz Motorische Verbrennung (2009)
- /48/ MÜNZIGER, S. ; HANULA, B. ; SCHNITZLER, T. ; GEISER, F.: Das Phänomen Glühzündung -Ursachen, Entstehung und Vermeidung. In: *Motortechnische Zeitschrift* (2002), Nr. 11
- /49/ NORDIN, N.: Complex Chemistry Modeling of Diesel Spray Combustion. Göteborg, Chalmers University of Technology, Diss., 2001
- /50/ OPENCFD LIMITED: OpenFOAM The Open Source CFD Toolbox Programmer's Guide. Version 1.4.1. London, 2007
- /51/ OPENCFD LIMITED: OpenFOAM The Open Source CFD Toolbox User Guide. Version 1.4.1. London, 2007
- /52/ OPPENHEIM, A. K.: The Knock Syndrome Its Curs and its Victims. In: Society of Automotive Engineers (1984), Nr. 841339
- /53/ O'ROURKE, P. J.; AMSDEN, A. A.: The Tab Mehtod for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup. In: Society of Automotive Engineers (1987), Nr. 872089
- /54/ PAN, J.; SHEPPARD, C. G. W.; TINDALL, A.; BERZINS, M.; PENNINGSTON, S. V.; WARE, J.M.: End Gas Inhomogeneity, Autoignition and Knock. In: Society of Automotive Engineers (1998), Nr. 982616
- /55/ PEARLMAN, H.; CHAPEK, R. M.: Cool Flames and Autoignition: Thermal-Ignition Theory of Combustion Experimentally Validated in Microgravity. Version: 2000. http://www.grc.nasa. gov/WWW/RT/RT1999/6000/6711wu.html, Abruf: 25.06.2011
- /56/ PETERS, N.: Turbulent Combustion. Cambridge : Cambridge University Press, 2000
- /57/ PILLING, M. J. (Hrsg.): Low Temperatur Combustion and Autoignition. Amsterdam : Elsevier, 1997
- /58/ PISCHINGER, F. (Hrsg.): Sonderforschungsbereich 224 Motorische Verbrennung. Aachen, 2001
- /59/ PISCHINGER, R.; KLELL, M.; SAMS, T.: Thermodynamik der Verbrennungskraftmaschine Der Fahrzeugantrieb. Wien : Springer, 2002

- /60/ POINSOT, T. ; VEYNANTE, D.: Theoretical and Numerical Combustion. Philadelphia : Edwards, 2001
- /61/ POLLARD, R. T.: Hydrocarbons. In: Comprehensice Chemical Kinetics 17 (1977), S. 249-367
- /62/ RANZI, E. ; FRASSOLDATI, A. ; FARAVELLI, T. ; GUOCI, A.: Lumed kinetic modeling of the oxidation of isocetane (2,2,4,4,6,8,8 Heptamethylnonane) in a jet-stirred reactor (JSR). In: *Energy and Fuels* 23 (2009), S. 5287–5289
- /63/ REPP, S.: Numerische Simulation turbulenter, vorgemischter Verbrennung mittels der level-set-Methode. 2001
- /64/ REYNOLDS, O.: On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion. In: *Philosophical Transaction of the Royal Society of London* 186 (1894), S. 123–164
- /65/ SCHLICHTING, H.; GERSTEN, K.: Grenzschicht-Theorie. 9. Auflage. Berlin : Springer, 1997
- /66/ SMITH, G. P.; GOLDEN, D. M.; FRENKLACH, M.; MORIATY, N. W.; EITENEER, B.; GOLDEN-BERG, M.; BOWMAN, C. T.; HANSON, R. K.; SONG, S.; GARDINER, JR., W. C.; LASSIANSKI, V. V.; QIN, Z.: Grimech 3.0. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/version30/text30.html, Abruf: 06.05.2011
- /67/ STENLÅÅS, O. ; GOGAN, A. ; EGNELL, R. ; SUNDÉN, B. ; MAUSS, F.: The Influence of Nitric Oxide on the Occurrence of Autoignition in the End Gas of Spark Ignition Engines. In: Society of Automotive Engineers (2002), Nr. 2002-01-2699
- /68/ STIESCH, G.: Modelling Engine Spray and Combustion Processes. Berlin : Springer, 2003
- /69/ TAO, F.: Numerical Modeling of Soot an NO_x Formation in Non-stationary Diesel Flames with Complex Chemistry. Göteborg, Chalmers University of Technology, Diss., 2003
- /70/ TURNS, S. R.: An Introduction to Combustion. 2. Auflage. Boston : McGraw-Hill, 2000
- /71/ VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE: VDI-Wärmeatlas: Berechnungsblätter für den Wärmeübergang. 10. Auflage. Berlin : Springer, 2006
- /72/ VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W.: An Introduction to Computational Fluid Dynamics -The Finite Volume Method. 2. Auflage. Essex : Pearson Education Limited, 2007
- /73/ WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. W.: Verrbennung: Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung. 2. Auflage. Berlin : Springer, 1997
- /74/ WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. W.: Combustion: physical and chemical fundamentals, modelling and simulation, experiments, pollutand formation. 4. Auflage. Berlin : Springer, 2006
- /75/ WESTBROOK, C. K.: Chemical Kinetics of Hydrocarbon Ignition in Practical Combustion Systems. In: Proceedings of the Combustion Institute (2000), S. 1563–1577

- /76/ WILCOX, D. C.: Turbulence Modelling for CFD. 3. Auflage. La Canada : DCW Industries, 2006
- /77/ WILLAND, J. ; DANIEL, M. ; MONTEFRANCESCO, E. ; GERINGER, B. ; HOFMANN, P. ; KIEBER-GER, M.: Grenzen des Downsizing bei Ottomotoren durch Vorentflammungen. In: *Motortechni*sche Zeitschrift (2009), Nr. 05
- /78/ YEOH, E. Y. L. ; DAVY, M. H.: Numerical Study of the Effects of Droplet Size Distribution on Fuel Transport and Air-Fuel Mixing in a Gasoline Direct-Injection Engine. In: Society of Automotive Engineers (2003), Nr. 2003-01-3100
- /79/ ZACCARDI, J.-M.; PAGOT, A.: Statistical Oberservation on Pre-Ignition in SI Engines. In: Ottomotorisches Klopfen - irreguläre Verbrennung (2010), S. 79–94
- /80/ ZAHDEH, A.; ROTHENBERGER, P.; SCHÄFER, J.: Diagnosing Engine Combustion Using High Speed Photography in Conjunction with CFD. In: 8. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik (2008), S. 121–127