

Modell zur Vorhersage der Brennrate bei homogener und teilhomogener Dieselverbrennung

**Von der Fakultät Konstruktions-, Produktions- und Fahrzeugtechnik
der Universität Stuttgart
zur Erlangung der Würde eines Doktor- Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung**

Vorgelegt von

Dominik Rether
aus Hannover

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. M. Bargende
Mitberichter: Prof. Dr. sc. techn. K. Boulouchos
Tag der mündlichen Prüfung: 18.10.2012

Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen der
Universität Stuttgart

2012

Vorwort

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeiten am Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen (IVK) der Universität Stuttgart sowie am Forschungsinstitut für Kraftfahrwesen und Fahrzeugmotoren Stuttgart (FKFS).

Ich danke an dieser Stelle dem Institutsleiter Professor Bargende für die wissenschaftliche Betreuung der Arbeit, sowie die zugestandenen Freiheiten bei ihrer Ausgestaltung. Professor Boulouchos von der ETH Zürich danke ich für die Übernahme des Korreferates.

Die Modellentwicklung fand im Rahmen des FVV-Projektes „Homogene Brennrate“ statt. Ich danke der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e. V. (FVV) dafür, dass Sie – trotz wirtschaftlich angespannten Zeiten – meine Anstellung am IVK finanziell ermöglicht hat.

Besonders möchte ich auch Dr.-Ing. Michael Grill danken, der mich dazu ermutigt hat eine wissenschaftliche Tätigkeit am Institut aufzunehmen. Seine jederzeit vorhandene Bereitschaft zu einem fachlichen Austausch hat maßgeblich zum Erfolg der Arbeit beigetragen.

Dr. sc. techn. Christian Lämmle von der ETH Zürich danke ich für die gute Zusammenarbeit während des FVV-Vorhabens. Sowohl die von ihm durchgeführte Untersuchung verschiedener Reaktionsmechanismen, als auch seine 3D-CFD Simulationen zur Validierung des Gemischbildungsmodells, haben die Arbeit bereichert.

Dr. rer. nat. Dietmar Schmidt danke ich für seine fachliche Unterstützung bei inhaltlichen Fragen zu den Themengebieten Verbrennungsphysik und -chemie.

Abschließend möchte ich allen Kollegen am Institut für die angenehme Arbeitsatmosphäre danken.

Stuttgart, im Herbst 2012

Dominik Rether

Summary

In the last decade many experimental researches have proven that during homogeneous- or partly-homogenous Diesel combustion less soot and nitrous gases are formed compared to conventional CI combustion mode. Furthermore it has been shown that the specific fuel consumption of partly-homogenous Diesel combustion is comparable to conventional CI combustion. Consequently at part load in-cylinder pollutant reduction is possible without disadvantages regarding to fuel consumption. But partly- and even more full-homogenous Diesel combustion is not easy to implement due to the strong decoupling of injection timing and start of combustion depending on the combustion mode especially in transient operation. For that reason further efforts are necessary until an application suitable for series production exists, with full- or partly-homogenous Diesel combustion at part load. Until now the capability of working cycle simulation couldn't be used to improve the situation because no suitable predictive burn rate model exists. In this dissertation such a model shall be presented which has the predictive capability to reproduce the burn rate of all relevant full- or partly-homogenous combustion modes (HCCI, HCLI and HPLI) inside the working cycle simulation.

At first all known approaches for simulation of CI-combustion are described. Also previous works which had the same goal as this work are introduced. Toyota developed a model to predict partly-homogenous Diesel combustion [111]. This model has a good predictive capability but the time required for computing is much too high for a reasonable usage in working cycle calculations. Other investigated models don't have satisfactory predictive capabilities.

The approach presented in this work has been integrated in the FVV-Zylindermodul [60]. For this reason one can use known approaches for calorics and wall heat-transfer together with the burn rate model. Depending on the type of mixture formation it consists of one or two thermodynamical zones. At external mixture formation a one zone approach is sufficient.

At direct injection operation modes a two zone approach with a fresh-charge-zone and a mixture-zone seemed to be expedient. A well known $k-\epsilon$ model [83] combined with a density-difference approach is used to describe the mixture formation process. This newly formed mixture formation model has been validated on the basis of 3D-CFD simulations done at the LAV in Zurich [128].

The low temperature combustion which occurs at fully- and to some extent at partly-homogenous combustion is modeled by a global reaction mechanism presented by Zheng et al. [170] which consists of seven chemical equations whereof five are dedicated to represent the low temperature combustion.

It became evident that one cannot represent the high temperature combustion with a one zone approach even when using very detailed reaction mechanism. An increase of number of zones is not expedient too. The remaining two chemical equations which Zheng et al. designated to represent the high temperature combustion are therefore used to calculate an ignition integral for the high temperature combustion whose progress is modeled by a phenomenological approach. As the probability of local areas within the mixture with raised temperature decreases with increasing homogenization the model uses a variable ignition-limit for ignition delay calculation. This limit rises with increasing homogenization. At external mixture formation maximal homogenization exists. At direct injection operating points it is estimated by the

use of specific in-cylinder turbulence and the mass distribution between the two zones.

Fuel which is vaporized at start of high temperature combustion or does this shortly after start of combustion is summarized in a homogenous pool for mass balance calculation. To describe the burn rate of this pool the influencing factors which speed up or slow down the combustion are merged in two separate terms. The burn rate is gained at each time step by the lesser one. Elapsed time since start of combustion and temperature are reinforcing factors. The time impact describes the increasing number of local ignition points which have passed the ignition temperature. The restraining effect of residual gas on self-ignition is considered thereby. Alleviative factors on the combustion are the convertible fuel mass inside the homogenous pool the specific in-cylinder turbulence again the residual gas fraction – here with regard to his influence on flame propagation – and the local excess air ratio in case of a rich mixture zone. As measurements have repeatedly shown that combustion efficiency is partially low especially at fully homogenous combustion the unconvertible fuel fraction is estimated by some global values.

Fuel which was liquid at start of high temperature combustion und evaporates within a given space of time is allocated to the partly-homogenous pool. Based on the fuel mass in this pool a local fuel density is calculated. By the use of this density together with a time function the partly-homogenous combustion is simulated.

Fuel which is injected after start of high temperature combustion can only be converted in a diffusive combustion. Corresponding interfaces to link such a burn rate model have been implemented.

For validation it has been drawn on extensive measurement data of a one-cylinder passenger car engine which had been gained mainly during the FVV-project „Homogene Dieselmotoren“ [64], [63]. At that time external and internal mixture formation had been realized which is why data with uniform geometry of Atomizer-HCCI, HCLI and HPLI operating mode exist.

After calibration on the engine the burn rate model can depict all these operation modes with one set of parameters. Egr variations by various loads exist from the Atomizer-HCCI mode. The appearing low temperature combustion can be predicted by the model likewise the load depending combustion efficiency. At HCLI operating mode two variations of start of injection with simultaneous adaptation of egr-rates have been measured. The discontinuation of the low temperature combustion at later start of injections can be reproduced by the model. The model can also predict the different shaped burn rates and the higher combustion efficiency in comparison to Atomizer-HCCI mode. At HPLI mode several egr variations with slightly different start of injection had been measured. The stronger dependency of burn rate shape and egr-rate compared to previous operating modes is reproduced qualitatively correctly by the model.

In total IMEP and combustion efficiency can be predicted with an accuracy of $\pm 10\%$ over all operating modes. At modes with start of injection near FTDC which currently are a subject of interest the accuracy is $\pm 5\%$. The computation time for one working cycle is less than two seconds on an up-to-date office-PC. Therefore the model is suited for daily use in the context of 1-D flow simulations.

Zusammenfassung

In der letzten Dekade haben mehrere experimentelle Untersuchungen gezeigt, dass während der voll- oder teilhomogenen Dieselerbrennung, im Vergleich zur konventionellen Dieselerbrennung, weniger Ruß- und Stickoxidemissionen im Brennraum entstehen. Da der spezifische Kraftstoffverbrauch bei teilhomogener Dieselerbrennung nicht höher ist, als bei konventionellen Dieselerbrennverfahren, ist somit im Teillastbereich eine verbrauchsneutrale, innermotorische Schadstoffreduktion möglich. Aufgrund der je nach Verfahren unterschiedlich starken Entkopplung von Einspritzzeitpunkt und Brennbeginn sind teil- und vor allem vollhomogene Brennverfahren jedoch nicht einfach zu realisieren, insbesondere im Transientbetrieb. Es sind daher weitere Entwicklungsarbeiten notwendig bis eine serientaugliche Applikation vorliegt, bei der im Teillastbereich voll- und teilhomogene Brennverfahren zum Einsatz kommen. Mangels eines geeigneten vorhersagefähigen Brennratenmodells können die Potentiale der Arbeitsprozessrechnung dazu bisher nur unzureichend genutzt werden. In dieser Arbeit wird ein solches Modell vorgestellt, welches alle relevanten voll- und teilhomogenen Betriebsarten (HCCI, HCLI und HPLI) vorhersagefähig abbilden kann.

Zunächst werden die bekanntesten Modellansätze zur Simulation der konventionellen Dieselerbrennung beschrieben. Auch bisherige Arbeiten, deren Ziel die Entwicklung eines Brennratenmodells für die voll- oder teilhomogene Dieselerbrennung war, werden vorgestellt. Ein von Toyota entwickeltes Modell [111] erreicht für den teilhomogenen Betrieb eine gute Vorhersagefähigkeit, jedoch bei einem erheblich zu hohen Rechenaufwand für eine sinnvolle Nutzung im Rahmen der Arbeitsprozessrechnung. Die anderen recherchierten Modelle besitzen keine zufriedenstellende Vorhersagefähigkeit.

Der hier vorgestellte Modellansatz wurde in das FVV-Zylindermodul [60] integriert. Dadurch kann auf bereits bekannte Ansätze für Kalorik und Wandwärmeverluste zurückgegriffen werden. Das Brennratenmodell besteht je nach Art der Gemischbildung aus einer oder zwei thermodynamischen Zonen. Bei äußerer Gemischbildung ist eine einzonige Modellierung ausreichend.

Bei Betriebsarten mit Direkteinspritzung hat sich eine zweizonige Modellierung, mit einer Frischladungszone und einer Mischungszone, in der die Verbrennung stattfindet, als zielführend erwiesen. Zur Darstellung der Vermischung der beiden Zonen wird ein bewährtes $k-\epsilon$ Modell [83] mit einem Dichtedifferenzansatz kombiniert. Das so entstandene Vermischungsmodell wurde anhand von 3D-CFD Simulationen der entsprechenden Betriebspunkte validiert, die am LAV in Zürich durchgeführt wurden [128].

Die bei voll- und vereinzelt auch bei teilhomogenen Betriebspunkten auftretende Niedertemperaturverbrennung wird über einen einfachen Reaktionsmechanismus nach Zheng et al. [170] abgebildet, der aus sieben Reaktionsgleichungen besteht, wovon fünf zur Darstellung der Niedertemperaturverbrennung verwendet werden.

Es hat sich gezeigt, dass man die Hochtemperaturverbrennung in einer einzonigen Umgebung, selbst mit sehr detaillierten Reaktionsmechanismen, nicht abbilden kann. Auch eine Erhöhung der Zonenanzahl ist nicht zielführend. Die restlichen zwei Reaktionsgleichungen, von Zheng et al. zur Abbildung der Hochtemperaturverbrennung vorgesehenen, dienen daher lediglich der Berechnung eines Zündintegrals für die Hochtemperaturverbrennung, deren Verlauf dann über einen phänomenologischen Ansatz abgebildet wird. Da mit zunehmender Homogenisierung die Wahrscheinlich-

keit abnimmt, dass innerhalb des Gemischs lokale Bereiche mit erhöhter Temperatur vorliegen, verwendet das Modell bei der Zündverzugsberechnung eine variable Zündgrenze, die mit zunehmender Homogenisierung größer wird. Bei äußerer Gemischbildung liegt die maximal mögliche Homogenisierung vor, bei Direkteinspritzung wird sie über die spezifische Turbulenz im Brennraum und die Massenverteilung zwischen den beiden Zonen abgeschätzt.

Kraftstoff der zu Beginn der Hochtemperaturverbrennung bereits verdampft ist, oder dies kurz nach Brennbeginn tut, wird zur Massenbilanzierung in einem homogenen Pool zusammengefasst. Um dessen Umsatzrate zu berechnen werden jeweils die Einflussgrößen, welche die Verbrennung beschleunigen oder abschwächen, über zwei separate Terme abgebildet. Der Brennverlauf ergibt sich dabei aus dem – im aktuellen Rechenschritt – kleineren Term. Zu den verstärkenden Faktoren gehören die verstrichene Zeit seit Brennbeginn und die Temperatur. Der Zeiteinfluss bildet dabei die zunehmende Anzahl an lokalen Zündorten ab, welche die Zündtemperatur überschritten haben. Die Verzögerung der Selbstzündung durch vorhandenes Restgas wird dabei berücksichtigt. Zu den abschwächenden Faktoren gehören die umsetzbare Kraftstoffmasse im homogenen Pool, die spezifische Turbulenz im Brennraum, erneut der Restgasgehalt – hier im Hinblick auf seinen Einfluss auf die Flammenausbreitung – und bei lokal fetten Umgebungsbedingungen das Luftverhältnis. Da sich bei Messungen wiederholt gezeigt hat, dass die Umsetzungsgrade besonders bei vollhomogener Verbrennung teilweise recht niedrig sind, wird anhand einiger globaler Größen der Anteil des Kraftstoffs abgeschätzt, der nicht umgesetzt werden kann.

Kraftstoff der zu Beginn der Hochtemperaturverbrennung flüssig im Brennraum vorliegt und innerhalb eines vorgegebenen Zeitraums verdampft, wird dem teilhomogenen Pool zugeordnet. Basierend auf der Kraftstoffmasse in diesem Pool wird eine lokale Kraftstoffdichte berechnet. Über diese lokale Dichte und eine Zeitfunktion wird die teilhomogene Verbrennung abgebildet.

Kraftstoff der erst nach Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung einspritzt wird, kann nur über eine Diffusionsverbrennung umgesetzt werden. Eine entsprechende Schnittstelle, zur Anbindung eines solchen Brennratenmodells, wurde implementiert.

Zur Modellvalidierung wurde auf umfangreiche Messdaten zurückgegriffen, die größtenteils im Rahmen des FVV-Projekts „Homogene Dieselvebrennung“ erstellt wurden und von einem Einzylinder-Pkw-Motor stammen [64], [63]. Da im Rahmen der damaligen Messkampagne sowohl äußere als auch innere Gemischbildung realisiert wurde, lagen somit Messdaten mit einheitlicher Geometrie von Atomizer-HCCI-, HCLI- und HPLI-Betrieb vor.

Nach der Abstimmung an den Motor kann das Brennratenmodell all diese Betriebsarten mit einem einheitlichen Parametersatz abbilden. Vom Atomizer-HCCI-Betrieb lagen AGR-Variationen bei unterschiedlicher Last vor. Die dabei auftretende Niedertemperaturverbrennung kann von dem Modell wiedergegeben werden, ebenso wie die lastabhängigen Umsatzwirkungsgrade. Im HCLI-Betrieb wurde Einspritzbeginnvariationen mit gleichzeitiger Anpassung der AGR-Rate bei zwei verschiedenen Lasten vermessen. Das Wegfallen der Niedertemperaturverbrennung bei späteren Einspritzbeginnen wird von dem Modell wiedergegeben. Die im Vergleich zum Atomizer-Betrieb anders geformten Brennverläufe und die höheren Umsatzwirkungsgrade werden durch das Modell vorhergesagt. Bei HPLI-Betrieb wurden mehrere AGR-Variationen bei leicht unterschiedlichen Einspritzbeginnen vermessen. Die

im Vergleich zu den vorherigen Betriebsarten stärkere Abhängigkeit der Brennverlaufsform von der AGR-Rate wird von dem Modell qualitativ korrekt wiedergegeben.

In Summe kann über alle Betriebsarten der Umsatzwirkungsgrad und auch der indizierte Mitteldruck mit einer Genauigkeit von $\pm 10\%$ vorhergesagt werden. In dem Betriebsbereich mit Einspritzbeginn um den oberen Totpunkt, der aktuell besonders im Entwicklungsinteresse steht, beträgt die Genauigkeit $\pm 5\%$. Die Rechenzeit für ein Arbeitsspiel beträgt auf einem aktuellen Büro-PC weniger als zwei Sekunden. Damit ist das Modell für den täglichen Einsatz auch im Rahmen einer 1D-Strömungssimulation geeignet.

Inhaltsverzeichnis

Vorwort.....	III
Summary.....	V
Zusammenfassung.....	VII
Nomenklatur.....	XIII
1 Einleitung.....	1
2 Grundlagen und Stand der Technik.....	3
2.1 Konventionelle Dieselerbrennung.....	3
2.2 Zündverhalten von Dieselerkraftstoff.....	6
2.3 Schadstoffentstehung und Abgasnachbehandlung.....	14
2.4 Homogene und teilhomogene Dieselerbrennung.....	22
2.4.1 Überblick.....	22
2.4.2 HCCI-Verfahren.....	23
2.4.3 HCLI-Verfahren.....	24
2.4.4 HPLI-Verfahren.....	26
2.4.5 DCCS-Verfahren.....	26
2.5 Numerische Simulation des Hochdruckprozesses.....	27
3 Modellscreening.....	35
3.1 Berechnung des Brennverlaufs über ein empirisches Verbrennungsmodell.....	35
3.2 Phänomenologische Modellierung der konventionellen Dieselerbrennung.....	44
3.2.1 Gasstrahlmodelle.....	44
3.2.2 Zeitskalenmodelle (Frequenzansatz).....	48
3.2.3 Paket-Modelle.....	59
3.2.4 Scheiben-Modelle.....	68
3.3 Phänomenologische Modellierung der homogenen Dieselerbrennung.....	76
3.3.1 Diesel-RK Modell.....	76
3.3.2 IFP-Modell.....	81
3.3.3 Toyota-Modell.....	85
4 Beschreibung des neuen Modellansatzes.....	90
4.1 Gesamtaufbau.....	90
4.2 Berechnung der Gemischbildung bei Direkteinspritzung.....	93
4.3 Berechnungen anhand eines vereinfachten Reaktionsmechanismus.....	102
4.3.1 Niedertemperaturverbrennung.....	104
4.3.2 Zündverzug der Hochtemperaturverbrennung.....	114
4.4 Berechnung der Hochtemperaturverbrennung.....	117

4.4.1	Abschätzung der unvollkommenen Verbrennung.....	117
4.4.2	Der homogene Anteil	120
4.4.3	Der teilhomogene Anteil	125
5	Validierung des neuen Berechnungsansatzes	128
5.1	Motordaten	128
5.2	Messdatenaufbereitung	129
5.3	Abstimmprozess	131
5.4	Simulationsergebnisse.....	140
5.4.1	Atomizer-HCCI-Betrieb.....	140
5.4.2	HCLI-Betrieb	143
5.4.3	HPLI-Betrieb.....	149
5.4.4	Gesamtheitliche Betrachtung der Simulationsergebnisse	154
6	Zusammenfassung und Ausblick.....	157
7	Anhang.....	159
7.1	Literaturverzeichnis.....	159
7.2	Überschlagsrechnung bezüglich der Amortisationszeit von Diesel-Pkw....	176
7.3	Überschlagsrechnung bezüglich Direkte Numerische Simulation.....	178

Nomenklatur

Lateinische Symbole

A	[1/s]	Kapitel 4.3, Präexponentieller Faktor der Reaktion
$A_{\text{Flam.}}$	[m ³]	Kapitel 3.2.2, Flammenoberfläche
A_j	[(m ³ /mol) ^(n_{R,ges.}-1) /s]	Kapitel 4.3.1, Präexponentieller Faktor der Reaktion j
a	[-]	Kapitel 3.1, Abstimmkoeffizient (Vibe-Ersatzbrennverlauf)
a	[°KW]	Kapitel 3.2.4, Kurbelwinkelstellung des Umschlagpunkts
B	[-]	Kapitel 3.3.2, Dimensionslose Größe zur Beschreibung des Verdampfungszustands
BaSO ₄		Bariumsulfat
Ba(NO ₂) ₃		Bariumnitrat
b	[°KW]	Kapitel 3.2.4, Parameter zur Beeinflussung der Steigung im Umschlagpunkt
b	[-]	Kapitel 3.3.2, Abstimmparameter
CH		Methingruppe
CH ₂		Methylengruppe
CH ₂ O		Formaldehyd
CH ₃ •		Methylradikal
C _n H _{2n+2}		Alkane (Paraffine)
C _n H _{2n+1}		Alkylradikal
C _n H _{2n} , C _i H _{2i}		Alken
CO		Kohlenstoffmonoxid
CO ₂		Kohlenstoffdioxid
C ₂ H ₂		Ethin (Acetylen)
C ₂ H ₅ •		Ethylradikal
C ₆ H ₆		Benzol-Ring
c		Abstimmparameter
C_{AGR}	[-]	Kapitel 3.3.1, Faktor zur Abbildung des Restgas-einflusses
C_{Arr}	[m ³ /(kg·s)]	Kapitel 3.2.4, Abstimmparameter
$C_{\text{A},j}$	[-]	Kapitel 4.3.1, Parameter zur Abstimmung des präexponentiellen Faktors von Reaktion j
C_a	[m/s]	Kapitel 4.2, Axiale Anströmgeschwindigkeit
$C_{\text{Beimisch},1}$	[-]	Kapitel 4.2, Parameter zur Abstimmung der turbulenzbasierten Beimischung

$C_{\text{Beimisch},2}$	[-]	Kapitel 4.2, Parameter zur Abstimmung der Beimischung aufgrund der Dichtedifferenz
C_{Diff}	[-]	Kapitel 3.2.2, Abstimmparameter der Diffusionsverbrennung
$C_{\text{Diff},\text{Bereich}}$	[-]	Kapitel 3.2.4, Abstimmparameter der Diffusionsverbrennung im betrachteten Bereich
C_{Druck}	[Pa/s]	Kapitel 4.4.2, Parameter zur Abstimmung des Druckeinflusses
$C_{\text{Eff},\text{ä.Gb.}}$	[m ³ ·kg]	Kapitel 4.4.1, Abstimmparameter bei äußerer Gemischbildung
$C_{\text{Eff},\text{DI}}$	[m ³ /kg]	Kapitel 4.4.1, Abstimmparameter bei DI-Betrieb
$C_{\text{E},j}$	[-]	Kapitel 4.3.1, Parameter zur Abstimmung der Aktivierungsenergie von Reaktion j
$C_{\text{Geschw.}}$	[-]	Kapitel 3.2.4, Parameter zur Abstimmung der Scheibenausbreitungsgeschwindigkeit
$C_{\text{HTC},\text{hom},a}$	[1/s ³]	Kapitel 4.4.2, Parameter zur Abstimmung des Zeiteinflusses
$C_{\text{HTC},\text{hom},b}$	[1/s]	Kapitel 4.4.2, Parameter zur Abstimmung des Temperatureinflusses
$C_{\text{HTC},\text{hom},c}$	[s/m ²]	Kapitel 4.4.2, Parameter zur Abstimmung der fallenden Flanke
$C_{\text{HTC},\text{teillhom.}}$	[m ³ /s]	Kapitel 4.4.3, Abstimmparameter der teilhomogenen Verbrennung
C_{Inert}	[-]	Kapitel 4.4.2, Parameter zur Abstimmung des Inerteinflusses
C_{Mag}	[-]	Kapitel 3.2.4, Abstimmparameter
C_m	[m/s]	mittlere Kolbengeschwindigkeit
C_{Pre}	[-]	Kapitel 3.2.2, Abstimmparameter der Premixedverbrennung
$C_{\text{Pre},1}$	[m ³ /(mol·s)]	Kapitel 3.2.4, Gl. (3-47), Abstimmparameter der Premixedverbrennung
$C_{\text{Pre},1}$	[m ³ /(kg·s ³)]	Kapitel 3.2.4, Gl. (3-52), Abstimmparameter der Premixedverbrennung
$C_{\text{Pre},2}$	[-]	Kapitel 3.2.4, Abstimmparameter
$C_{\text{Pre-Diff}}$	[-]	Kapitel 3.2.2, Exponent zur Abstimmung des Einflusses der Premixed-Verbrennung auf die Diffusionsverbrennung
C_T	[-]	Faktor zur Berücksichtigung von negativen Temperaturgradienten
C_{turb}	[-]	Kapitel 3.2.4, Abstimmparameter
C_{turb}	[-]	Kapitel 3.3.3, Abstimmparameter für den turbulenten Verbrennungsanteil

$C_{\text{turb},1}$	[-]	Kapitel 3.2.2, Abstimmparameter der Grundturbulenz
$C_{\text{turb},2}$	[-]	Kapitel 3.2.2, Abstimmparameter der durch die Einspritzung verursachten Turbulenz
C_U	[m/s]	Kapitel 4.2, Umfangsgeschwindigkeit
$C_{\text{Verb.}}$	[m ³ /(kg·s)]	Kapitel 3.2.3, Abstimmkoeffizient der Verbrennung
$C_{\text{Verd.}}$	[m·K ^{3,3} /s]	Kapitel 3.2.4, Abstimmparameter der Verdampfung
$C_{\text{Verd.}}$	[-]	Kapitel 3.3.2, Abstimmparameter der Verdampfung
$C_{V,1}, C_{V,2}, C_{V,3}, C_{V,5}$	[-, -, -, -]	Kapitel 3.2.3, Parameter zur Abstimmung der Paketausbreitungsgeschwindigkeit
$C_{V,4}$	[s]	Kapitel 3.2.3, Parameter zur Abstimmung der Paketausbreitungsgeschwindigkeit
$C_{Zg.}$	[J/kg]	Kapitel 4.3.2, Zündgrenze bei äußerer Gemischbildung
C_{ZV}	[Pa ² ·s]	Kapitel 3.2.3, Parameter zur Abstimmung des Zündverzugs
$C_{ZV,\text{chem.}}$	[s]	Kapitel 3.2.2, Parameter zur Abstimmung des chemischen Zündverzugs
$C_{ZV,\text{phy.}}$	[m ^{0,8} /s ^{2,68}]	Kapitel 3.2.2, Parameter zur Abstimmung des physikalischen Zündverzugs
d_D	[m]	Düsenlochdurchmesser
$d_{D,\text{eff}}$	[m]	Kapitel 3.2.2, Effektiver Düsenlochdurchmesser
d_{EV}	[m]	Durchmesser des Einlassventils
dH_j/dt	[J/s]	Kapitel 4.3.1, Enthalpieänderungsrate der Reaktion j
$dk_{\text{Einspr.}}/dt$	[m ² /s ³]	Kapitel 4.2, Änderungsrate der spezifischen Einspritzturbulenz
dk/dt	[m ² /s ³]	Kapitel 4.2, Änderungsrate der spezifischen Turbulenz
$dm_{\text{Beimisch},M\text{-Zone}}/dt$	[kg/s]	Kapitel 4.2, Massenänderungsrate der Mischungszone aufgrund Ladungsbeimischung
$dm_{\text{Beimisch},\text{turb}}/dt$	[kg/s]	Kapitel 4.2, Massenänderungsrate aufgrund turbulenzbasierter Beimischung
$dm_{\text{Beimisch},\Delta p}/dt$	[kg/s]	Kapitel 4.2, Massenänderungsrate aufgrund der Dichtedifferenz zwischen den Zonen
$dm_{B,\text{Diff}}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.2, Im aktuellen Zeitschritt über die Diffusionsverbrennung umgesetzte Brennstoffmasse
$dm_{B,\text{Paket},\text{chem.U.}}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.3, möglicher Brennstoffmassenumsatz innerhalb eines Pakets aufgrund der maximal möglichen chemischen Umsatzrate

$dm_{B,Paket,\lambda \geq 1}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.3, möglicher Brennstoffmassenumsatz innerhalb eines Pakets aufgrund des vorhandenen gasförmigen Kraftstoffs
$dm_{B,Paket,\lambda < 1}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.3, möglicher Brennstoffmassenumsatz innerhalb eines Pakets aufgrund der vorhandenen Luft
$dm_{B,Pre}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.2, Im aktuellen Zeitschritt über die Premixed-Verbrennung umgesetzte Brennstoffmasse
$dm_{B,Pre,1}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.2, Über die von einem Zündpunkt ausgehende Premixed-Verbrennung theoretisch umgesetzte Brennstoffmasse im aktuellen Zeitschritt
$dm_{B,Pre,2}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.2, Über die von mehreren Zündorten ausgehende Premixed-Verbrennung theoretisch umgesetzte Brennstoffmasse im aktuellen Zeitschritt
$dm_{B,Zheng}/dt$	[kg/s]	Kapitel 4.3.1, Massenänderungsrate des Brennstoffs auf Basis des Brennverlaufs, der über den Zheng-Mechanismus berechnet wird
$dm_{Einspr.}/dt$	[kg/s]	Einspritzrate
dm_{Entr}/dt	[kg/s]	Kapitel 3.3.2, Aktueller Massenstrom in den Strahlkegel
$dm_{Entr,Paket}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.3, Ladungsbeimischrate eines Pakets im aktuellen Rechenschritt
$dm_{Krst.,Diff,Verd.}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.4, Verdampfungsrate des Kraftstoffs im Diffusionspool
$dm_{Krst.,stö.,aufb.}/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.1, Änderungsrate der stöchiometrisch aufbereiteten Kraftstoffmasse
$dm_{Krst.}(\lambda)/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.1, Änderungsrate der Kraftstoffmasse welche die jeweilige Lambda-Grenze überschreitet
$dm_{Krst.}(\lambda_u)/dt$	[kg/s]	Kapitel 3.2.1, Änderungsrate der Kraftstoffmasse welche die untere Lambda-Grenze überschreitet
dn_{CO}/dt	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenänderungsrate von Kohlenstoffmonoxid
dn_{CO_2}/dt	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenänderungsrate von Kohlenstoffdioxid
dn_F/dt	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenänderungsrate des Kraftstoffs
dn_{H_2O}/dt	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenänderungsrate von Wasser
dn_{I_1}/dt	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenänderungsrate der Spezies I_1
dn_{I_2}/dt	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenänderungsrate der Spezies I_2

dn_{O_2}/dt	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenänderungsrate des Sauerstoffs
dn_Y/dt	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenänderungsrate der Spezies Y
dp/dt	[Pa/s]	Aktuelle Druckänderungsrate im Brennraum
$(dp/dt)_{gem.}$	[Pa/s]	Kapitel 4.4.2, Mittlere Druckänderungsrate bis zum Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung
$(dp/dt)_{gem.,\ddot{a}.G.}$	[Pa/s]	Kapitel 4.4.2, Mittlere Druckänderungsrate bei äußerer Gemischbildung
$(dp/dt)_{gem.,DI}$	[Pa/s]	Kapitel 4.4.2, Mittlere Druckänderungsrate bei DI-Betrieb
dQ_B/dt	[J/s]	Brennverlauf zu einem bestimmten Zeitpunkt
$dQ_{B,Diff}/dt$	[J/s]	Kapitel 3.2.4, Brennverlauf der Diffusionsverbrennung
$dQ_{B,Diff,Bereich}/dt$	[J/s]	Kapitel 3.2.4, Brennverlauf der Diffusionsverbrennung des jeweiligen Diffusionsbereichs
$dQ_{B,Pre}/dt$	[J/s]	Kapitel 3.2.4, Brennverlauf der Premixedverbrennung
$dQ_{B,Zheng}/dt$	[J]	Kapitel 4.3.1, Der über den Reaktionsmechanismus berechnete Brennverlauf
$dQ_{B,II}/d\varphi$	[J/°KW]	Kapitel 3.1, Der über die Hyperbel-Funktion dargestellte Brennverlaufsteil
d_{Tr}	[m]	Tropfendurchmesser (im aktuellen Zeitschritt)
$d_{Tr,Einspr.}$	[m]	Kapitel 3.2.2, Tropfendurchmesser bei der Einspritzung
$dV_{Einspr.}/dt$	[m ³ /s]	Kapitel 4.2, Einspritzvolumenstrom
dV_{Strahl}/dt	[m ³ /s]	Kapitel 3.3.2, Aktuelle Volumenänderungsrate des Strahlkegels
d_{Zyl}	[m]	Bohrung
$d\xi_{Krst.,UV}$	[-]	Kapitel 3.3.3, Änderungsrate des Massenanteils des unverbrannten Kraftstoffs
$E_{Akt.}$	[J]	Kapitel 4.3, Aktivierungsenergie der Reaktion
$E_{Akt.,HTC}$	[J/mol]	Kapitel 4.4.2, Aktivierungsenergie der Hochtemperaturverbrennung
$E_{Akt.,j}$	[J]	Kapitel 4.3.1, Aktivierungsenergie der Reaktion j
$E_{kin,turb,Bereich}$	[J]	Kapitel 3.2.4, Turbulenzenenergie innerhalb des jeweiligen Diffusionsbereichs
Eps_Drall	[-]	Kapitel 5.3, Abstimmparameter
$E_{turb,Zyl}$	[J]	Kapitel 3.2.4, Turbulenzenenergie im Brennraum
f	[-]	Kapitel 3.3.3, Eine in Quelle [111] nicht näher beschriebene Funktion

f_{AGR}	[-]	Kapitel 4.3.2, Funktion zur Abbildung der AGR-Rate
$f_{Aufbereitung}$	[-]	Kapitel 3.2.2, Aufbereitungsfunktion
$f_{A,turb}$	[-]	Kapitel 3.2.2, Flächenkorrekturfaktor
f_{Diff}	[1/s]	Kapitel 3.2.2, Mischungsfrequenz zur Beschreibung der Diffusionsverbrennung
f_{Druck}	[-]	Kapitel 4.4.2, Funktion zur Abbildung des Druckgradienteneinflusses
$f_{teillhom.}$	[-]	Kapitel 4.4.3, Zeitfunktion zur Beschreibung der teilhomogenen Verbrennung
f_X	[-]	Kapitel 4.3.2, Funktion zur Veränderung der Zündgrenze
$f_{X,HB}$	[-]	Kapitel 4.3.2, Vorfaktor der Zündgrenze bei innerer Gemischbildung (Abstimmparameter)
$f_{Zuord,Pre}$	[-]	Kapitel 3.2.4, Zuordnungsfunktion für den Premixed-Pool
$f_{\Delta H_R^0}$	[-]	Kapitel 4.3.1, Ausgleichsfaktor zur Normierung der Reaktionsenthalpien auf den unteren Heizwert
H_u	[J/kg]	unterer Heizwert
H_2O		Wasser
H_2O_2		Wasserstoffperoxid
$HO_2\bullet$		Hydroperoxyradikal
h_{EV}	[m]	Maximaler Ventilhub des Einlassventils
$h_{Komp.}$	[m]	Kompressionshöhe
h_1	[J/°KW ²]	Kapitel 3.1, Hyperbelparameter
h_2	[-]	Kapitel 3.1, Hyperbelparameter
h_3	[J/°KW]	Kapitel 3.1, Hyperbelparameter
l_{Paket}	[kg·m/s]	Kapitel 3.2.3, Impuls des Pakets
j	[-]	Kapitel 3.2.3, Zählvariable für die axiale Position eines Pakets
j_{max}	[-]	Kapitel 3.2.3, axialer Position der bei Einspritzende erzeugten Pakete
k	[m ² /s ²]	spezifische Turbulenz im Brennraum
k	[-]	Kapitel 3.2.3, Zählvariable für die radiale Position eines Pakets
k	[1/s]	Kapitel 4.3, Geschwindigkeitskoeffizient der Reaktion
k_{BB}	[m ² /s ²]	Kapitel 4.4.1, spezifische Turbulenz bei Brennbeginn
$k_{Bereich}$	[m ² /s ²]	Kapitel 3.2.4, spezifische Turbulenz des betrachteten Diffusionsbereichs

k_{Drall}	$[\text{m}^2/\text{s}^2]$	Kapitel 4.2, Spezifische Turbulenz der noch nicht zerfallenen Drallbewegung
k_{ES}	$[\text{m}^2/\text{s}^2]$	Kapitel 4.2, Spezifische Turbulenz bei Einlassventil-Schließt
k_j	$[(\text{m}^3/\text{mol})^{(n_{\text{R, ges.}}-1)}/\text{s}]$	Kapitel 4.3.1, Geschwindigkeitskoeffizient der Reaktion j
k_{Zyl}	$[\text{m}^2/\text{s}^2]$	Kapitel 3.2.4, globale spezifische Turbulenz im Brennraum
\tilde{L}	$[-]$	Kapitel 3.3.2, Dimensionslose Eindringtiefe des flüssigen Kraftstoffstrahls
L_{min}	$[-]$	stöchiometrischer Luftbedarf
l_{char}	$[\text{m}]$	Kapitel 4.2, Charakteristische Länge
$l_{\text{char, Diff}}$	$[\text{m}]$	Kapitel 3.2.2, Charakteristisches Längenmaß der Diffusionsverbrennung
$l_{\text{char, Einspr.}}$	$[\text{m}]$	Kapitel 3.2.2, Charakteristische Länge zur Beschreibung des Einspritzimpulses
$l_{\text{char, Gw.}}$	$[\text{m}]$	Kapitel 3.2.2, Charakteristische Länge der Gemischwolke
$l_{\text{char, L.bew}}$	$[\text{m}]$	Kapitel 3.2.2, Charakteristische Länge zur Beschreibung der Ladungsbewegung
$l_{\text{char, Zyl}}$	$[\text{m}]$	Kapitel 4.2, Charakteristische Länge des Zylinders
M		Inerter Stoßpartner
$M_{\text{AGR, stö.}}$	$[\text{kg}/\text{mol}]$	Kapitel 4.3.1, Molare Masse von stöchiometrischem Abgas
M_{CO_2}	$[\text{kg}/\text{mol}]$	Kapitel 4.3.1, Molare Masse von Kohlenstoffdioxid
$M_{\text{H}_2\text{O}}$	$[\text{kg}/\text{mol}]$	Kapitel 4.3.1, Molare Masse von Wasser
M_i	$[\text{kg}/\text{mol}]$	Kapitel 4.3.1, Molare Masse der Spezies i
M_{Luft}	$[\text{kg}/\text{mol}]$	Molare Masse der Luft
M_{N_2}	$[\text{kg}/\text{mol}]$	Kapitel 4.3.1, Molare Masse von Stickstoff
M_{O_2}	$[\text{kg}/\text{mol}]$	Kapitel 4.3.1, Molare Masse von Sauerstoff
m	$[-]$	Kapitel 3.1, Vibe-Formparameter
m	$[-]$	Kapitel 3.2.3, massen- und einspritzdauerabhängiger Exponent
m	$[-]$	Kapitel 3.3.1, Exponent zur genaueren Abbildung des Druckeinflusses
m_{Bereich}	$[\text{kg}]$	Kapitel 3.2.4, Masse innerhalb des jeweiligen Diffusionsbereichs
$m_{\text{FI-Zone}}$	$[\text{kg}]$	Kapitel 4.2, Masse der Frischladungszone
$m_{\text{hom. Pool 1, BB}}$	$[\text{kg}]$	Kapitel 4.4.1, Kraftstoff im homogenen Pool 1 bei Brennbeginn

$m_{\text{hom.Pool 1,n. ums.}}$	[kg]	Kapitel 4.4.1, Nicht umsetzbare Masse des homogenen Pools 1
$m_{\text{hom.Pool 1,ums.,BB}}$	[kg]	Kapitel 4.4.1, Umsetzbare Masse des homogenen Pools 1 im Brennbeginn
$m_{\text{Inert,R-Zone,BB}}$	[kg]	Kapitel 4.4.1, Inertgasmasse der Reaktionszone bei Brennbeginn
m_i	[kg]	Kapitel 4.3.1, Masse der Spezies i
$m_{\text{Krst.,Diff,fl}}$	[kg]	Kapitel 3.2.4, Masse des flüssigen Kraftstoffs im Diffusionspool
$m_{\text{Krst.,Diff,UV}}$	[kg]	Kapitel 3.2.4, Masse des unverbrannten, gasförmigen Kraftstoffs im Diffusionspool
$m_{\text{Krst.,Diff,verfügbar}}$	[kg]	Kapitel 3.2.2, Für die Diffusionsverbrennung verfügbare Kraftstoffmasse
$m_{\text{Krst.,Einspr.}}$	[kg]	In den Brennraum eingespritzte Kraftstoffmasse
$m_{\text{Krst.,Einspr.,VL}}$	[kg]	Kapitel 3.2.3, Eingespritzte Kraftstoffmasse bei Vollast
$m_{\text{Krst.,gasf.,Paket}}$	[kg]	Kapitel 3.2.3, gasförmige Kraftstoffmasse des Pakets
$m_{\text{Krst.,Pre,UV}}$	[kg]	Kapitel 3.2.4, unverbrannte Kraftstoffmasse des Premixedpools
$m_{\text{Krst.,Pre,verfügbar}}$	[kg]	Kapitel 3.2.2, Für die Premixed-Verbrennung verfügbare Kraftstoffmasse
$m_{\text{Krst.,Rg.}}$	[kg]	Kapitel 3.2.2, Kraftstoffmasse im Restgas
$m_{\text{Krst.,R-Zone,BB}}$	[kg]	Kapitel 4.4.1, Kraftstoffmasse (gasförmig) in der Reaktionszone bei Brennbeginn
$m_{\text{Krst.,teillhom.}}$	[kg]	Kapitel 4.4.3, Masse des teilhomogenen Kraftstoffpools
$m_{\text{Krst.,UV}}$	[kg]	Unverbrannte Kraftstoffmasse
$m_{\text{Krst.,UV,Gw.}}$	[kg]	Kapitel 3.2.2, Unverbrannter Kraftstoff in der Gemischwolke
$m_{\text{Krst.,UV,1}}$	[kg]	Kapitel 4.3.1, Äquivalente Masse zu $n_{\text{Krst.,UV,1}}$
m_{LTC}	[-]	Kapitel 3.3.1, Vibe-Formparameter der Nieder-temperaturverbrennung
m_{Luft}	[kg]	Kapitel 4.3.1, Luftmasse
$m_{\text{Luft,frisch}}$	[kg]	Im aktuellen Arbeitsspiel frisch angesaugte Luftmasse
$m_{\text{Luft,Gw.}}$	[kg]	Kapitel 3.2.2, Luftmasse der Gemischwolke
$m_{\text{Luft,Paket}}$	[kg]	Masse der unverbrannten Luft innerhalb des Pakets
$m_{\text{Luft,Rg.}}$	[kg]	Kapitel 3.2.2, Luftmasse im Restgas (verbrannte & unverbrannte Luft)

$m_{\text{Luft,R-Zone,BB}}$	[kg]	Kapitel 4.4.1, Luftmasse in der Reaktionszone bei Brennbeginn
$m_{\text{Luft,Überschuss,R-Zone}}$	[kg]	Kapitel 4.4.1, Überschüssige Luftmasse in der Reaktionszone
$m_{\text{M-Zone}}$	[kg]	Masse der Mischungszone
$m_{\text{Rg.,R-Zone,BB}}$	[kg]	Kapitel 4.4.1, Restgasmasse in der Reaktionszone bei Brennbeginn
$m_{\text{stö.Rg.,Gw.}}$	[kg]	Kapitel 3.2.2, Stöchiometrische Restgasmasse der Gemischwolke
m_{Zyl}	[kg]	Gesamtmasse im Brennraum
m_0	[-]	Kapitel 3.1, Vibe-Formparameter im Referenzbetriebspunkt
$m_{95\%-Gw.}$	[kg]	Kapitel 4.2, Gesamtmasse der 95%-Gemischwolke
N		Elementarer Stickstoff
$(\text{NH}_2)_2\text{CO}$		Harnstoff
NH_3		Ammoniak
N_i		Kapitel 2.5, Speziesanzahl
NO		Stickstoffmonoxid
NO_x		Stickoxide
NO_2		Stickstoffdioxid
N_2		Stickstoff
N_2O		Lachgas
n	[U/min]	Drehzahl
n_D	[-]	Düsenlochanzahl
n_i	[mol]	Kapitel 4.3.1, Stoffmenge der Spezies i
$n_{\text{Krst.,UV,1}}$	[mol]	Kapitel 4.3.1, Stoffmenge an unverbranntem Kraftstoff
n_{Luft}	[mol]	Kapitel 4.3.1, Luftstoffmenge
n_{N_2}	[mol]	Kapitel 4.3.1, Stickstoffstoffmenge
n_{O_2}	[mol]	Kapitel 4.3.1, Sauerstoffstoffmenge
$n_{\text{R,ges.}}$	[-]	Kapitel 4.3.1, Gesamtreaktionsordnung
n_0	[U/min]	Kapitel 3.1, Drehzahl im Referenzbetriebspunkt
O		Elementarer Sauerstoff
OH•		Hydroxylradikal
OROOH		Ketohydroperoxid
OR•O		Carbonyl-Radikal
O_2		Sauerstoff
$p_{\text{Einspr.}}$	[Pa]	Kapitel 3.2.3, Einspritzdruck

p_{RB}	[Pa]	Druck bei Rechenbeginn
$p_{RB,0}$	[Pa]	Kapitel 3.1, Druck bei Rechenbeginn im Referenzbetriebspunkt
p_{Zyl}	[Pa]	Kapitel 3.2.2, Druck im Zylinder im aktuellen Rechenschritt
p_{Zyl}	[MPa]	Kapitel 3.3.1, Druck im Zylinder im aktuellen Rechenschritt
p_0	[Pa]	Kapitel 3.2.2, Referenzdruck
Q_B	[J]	Summenbrennverlauf
$Q_{B,BE}$	[J]	Summenbrennverlauf bei Brennende
$Q_{B,ges.}$	[J]	Energiegehalt des insgesamt zugeführten Kraftstoffs
$Q_{B,LTC,ges.}$	[J]	Kapitel 3.3.1, Insgesamt während der Nieder-temperaturverbrennung freigesetzte Wärmeenergie
R		Alkylgruppe (Alkylrest eines Alkanes) $C_nH_{(2n+2)-1}$
R	[J/(mol·K)]	Kapitel 4.3, Universelle Gaskonstante
$R\bullet$		Brennstoffradikal
RH		Brennstoffmolekül (Alkan)
ROOH		Hydroperoxid
$R\bullet OOH$		Hydroperoxidradikal
$RO_2\bullet$		Alkylperoxyl-Radikal
$R_{o. Zg.}$	[J/kg]	Kapitel 4.3.2, Obere Zündgrenze
$R_{Scheibe}$	[m]	Kapitel 3.2.4, Außenradius der Scheibe
$R_{u. Zg.}$	[J/kg]	Kapitel 4.3.2, Untere Zündgrenze
R_{ZV}	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.4, Zündintegral
R_{ZV}	[J/kg]	Kapitel 4.3.2, Zündintegral
$R_{Zg.}$	[J/kg]	Kapitel 4.3.2, Zündgrenze (Energiedichte im ZZP)
r	[m]	Kapitel 3.2.4, radiale Position innerhalb der Scheibe
r_{Arr}	[kg/(m ³ ·s)]	Kapitel 3.2.4, Reaktionsrate des Arrhenius-Terms zur Zündverzugsberechnung
$r_{Gw.}$	[m]	Kapitel 3.2.2, Radius der (kugelförmigen) Gemischwolke
$r_{HTC,hom.}$	[kg/s]	Kapitel 4.4.2 , Massenumsatzrate der homogenen Hochtemperaturverbrennung
$r_{HTC,hom,fal.}$	[kg/s]	Kapitel 4.4.2 , Fallende Flanke der Massenumsatzrate zur Beschreibung der homogenen Hochtemperaturverbrennung
$r_{HTC,hom.Pool 1}$	[kg/s]	Kapitel 4.4.2 , Massenumsatzrate des homogenen Pools 1

$\Gamma_{\text{HTC,hom.Pool 2}}$	[kg/s]	Kapitel 4.4.2 , Massenumsatzrate des homogenen Pools 2
$\Gamma_{\text{HTC,hom,st.}}$	[kg/s]	Kapitel 4.4.2 , Steigende Flanke der Massenumsatzrate der homogenen Hochtemperaturverbrennung
$\Gamma_{\text{HTC,teillhom.}}$	[kg/s]	Kapitel 4.4.3, Massenumsatzrate des teilhomogenen Pools
r_j	[mol/s]	Kapitel 4.3.1, Reaktionsrate der Reaktion j
r_{Mag}	[kg/(m ³ ·s)]	Kapitel 3.2.4, Reaktionsrate des Magnussen-Terms zur Zündverzugsberechnung
SO_3		Schwefeltrioxid
s	[m]	Kapitel 3.3.1, Eindringtiefe des Einspritzstrahls
s_{lam}	[m/s]	Kapitel 3.2.2, laminare Flammengeschwindigkeit
$s_{\text{lam,0}}$	[m/s]	Kapitel 3.2.2, laminare Flammengeschwindigkeit bei Referenzbedingungen
s_{turb}	[m/s]	Kapitel 3.2.2, turbulente Flammengeschwindigkeit
T	[K]	Kapitel 4.3, Zur Berechnung der Reaktion verwendete Temperatur
$T_{\text{Akt.}}$	[K]	Aktivierungstemperatur
T_j	[K]	Kapitel 4.3.1, Zur Berechnung der Reaktion j verwendete Temperatur
T_{Paket}	[K]	Kapitel 3.2.3, Temperatur der jeweiligen Paketzone
T_{RB}	[K]	Temperatur bei Rechenbeginn
$T_{\text{RB,0}}$	[K]	Kapitel 3.1, Temperatur bei Rechenbeginn im Referenzbetriebspunkt
T_{Zyl}	[K]	Massenmitteltemperatur im Zylinder im aktuellen Rechenschritt
$T_{\text{Zyl,BB}}$	[K]	Kapitel 4.4.2, Temperatur im Brennraum zum Brennbeginn
t	[s]	aktueller Zeitpunkt
t_{BB}	[s]	Zeitpunkt des Brennbeginns
$t_{\text{BB,HTC}}$	[s]	Zeitpunkt des Brennbeginns der Hochtemperaturverbrennung
t_{BE}	[s]	Zeitpunkt des Brennendes
t_{EB}	[s]	Zeitpunkt des Einspritzbeginns
$t_{\text{Einspr.,Paket,j}}$	[s]	Kapitel 3.2.3, Einspritzzeitpunkt der Pakete auf der axialen Position j
$t_{\text{Einspr.,Tr}}$	[s]	Kapitel 3.2.2, Zeitpunkt der Einspritzung des Tropfens (Segments)
t_{RB}	[s]	Zeitpunkt des Rechenbeginns

t_0	[s]	Kapitel 4.3.2, Rechenbeginn (externe Gemischbildung) bzw. Einspritzbeginn (DI)
$u_{\text{Einspr.,0}}$	[m/s]	Kapitel 4.2, Aktuelle Düsenaustrittsgeschwindigkeit
$u_{x,r}$	[m/s]	Kapitel 3.2.4, Geschwindigkeit an der radialen Position r einer Scheibe mit dem Abstand x von der Einspritzdüse
V_{Bereich}	[m ³]	Kapitel 3.2.4, Volumen des betrachteten Diffusionsbereichs
$V_{\text{Gw.}}$	[m ³]	Kapitel 4.2, Volumen der Gemischwolke
$V_{\text{M-Zone}}$	[m ³]	Volumen der Mischungszone
V_{Paket}	[m ³]	Kapitel 3.2.3, Paketvolumen
V_{Pre}	[m ³]	Kapitel 3.2.4, Volumen in dem die Premixed-Verbrennung stattfindet
$V_{\text{R-Zone}}$	[m ³]	Volumen der Zone in der die Reaktion stattfindet
$V_{\text{Zyl.}}$	[m ³]	Aktuelles Zylindervolumen
$V_{\text{Zyl,BB}}$	[m ³]	Kapitel 4.4.1, Brennraumvolumen bei Brennbeginn
$v_{\text{Einspr.}}$	[m/s]	Einspritzgeschwindigkeit
$v_{\text{Einspr.,m}}$	[m/s]	Kapitel 3.2.2, mittlere Einspritzgeschwindigkeit
$v_{j,k}$	[m/s]	Kapitel 3.2.3, Geschwindigkeit des Pakets auf axialer Position j und radialer Position k
$v_{j,1}$	[m/s]	Kapitel 3.2.3, Geschwindigkeit des Strahlachsenpakets auf der axialen Position j
$v_{L,\text{bew}}$	[m/s]	Kapitel 3.2.2, Geschwindigkeit zur Beschreibung der Ladungsbewegung
$v_{\text{Paket},i}$	[m/s]	Kapitel 3.2.3, Paketgeschwindigkeit im aktuellen Rechenschritt
$v_{\text{Paket},i-1}$	[m/s]	Kapitel 3.2.3, Paketgeschwindigkeit im vorherigen Rechenschritt
$v_{R,j}$	[mol/(m ³ ·s)]	Kapitel 4.3.1, Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion j
v_{Tr}	[m/s]	Kapitel 3.2.3, Geschwindigkeit des Tropfens beim Aufprall
$v_{\text{Verm.}}$	[m/s]	Kapitel 3.2.2, Geschwindigkeit zur Beschreibung des Vermischungsprozesses
$v_{1,k}$	[m/s]	Kapitel 3.2.3, Geschwindigkeit des Pakets an der Strahlspitze und der radialen Position k
We_{Tr}	[-]	Kapitel 3.2.3, Weberzahl des auftreffenden Kraftstofftropfens
X^\bullet		beliebiges Radikal
X_B	[-]	Kapitel 3.2.2, Normierter Summenbrennverlauf

$X_{B,Pre}$	[-]	Kapitel 3.2.2, Normierter Summenbrennverlauf der Premixed-Verbrennung
XH		Radikal mit angelagertem Wasserstoffatom
x	[m]	Kapitel 3.2.4, Abstand der Scheibe von der Einspritzdüse
X_{AGR}	[-]	AGR-Rate
X_{Bezug}	[m]	Kapitel 3.3.2, Bezugslänge zur Berechnung der Strahlgeometrie
$X_{stö.AGR,BB}$	[-]	Kapitel 4.4.2, Stöchiometrische AGR-Rate bei Brennbeginn
X_T	[kK/s]	Kapitel 3.3.1, Mittlere Temperaturänderungsrate zwischen dem vorherigen und dem aktuellen Rechenschritt
Z_{Drall}	[-]	Kapitel 4.2, Drallzahl
$[i]$	[mol/m ³]	Kapitel 4.3.1, Stoffmengenkonzentration der Spezies i
$[Krst.,UV]$	[mol/m ³]	Kapitel 3.3.3, Stoffmengenkonzentration des unverbrannten Kraftstoffs
$[O_2]$	[mol/m ³]	Stoffmengenkonzentration des Sauerstoffs

Griechische Symbole

β	[m ² /s]	Kapitel 3.2.2, Abstimmparameter
$\beta_{Krst.}$	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.4, Kraftstoffmassenkonzentration
β_{O_2}	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.4, Sauerstoffmassenkonzentration
γ	[-]	Kapitel 3.2.2, Exponent zur Darstellung des Temperatureinflusses
$\Delta H_{f,Edukte}^0$	[J/mol]	Kapitel 4.3.1, Standardbildungsenthalpie eines Eduktes der Reaktion j
$\Delta H_{f,Produkte}^0$	[J/mol]	Kapitel 4.3.1, Standardbildungsenthalpie eines Produktes der Reaktion j
$\Delta H_{R,j}^0$	[J/mol]	Kapitel 4.3.1, Standardreaktionsenthalpie der Reaktion j
$\Delta H_{R,vV}^0$	[J/mol]	Kapitel 4.3.1, Standardreaktionsenthalpie der vollständigen Verbrennung
Δt_{BD}	[s]	Brenndauer
Δt_{ED}	[s]	Kapitel 3.2.3, Einspritzdauer
$\Delta t_{ED,VL}$	[s]	Kapitel 3.2.3, Einspritzdauer bei Volllast
$\Delta t_{Rsw.}$	[s]	Kapitel 3.2.3, Rechenschrittweite
$\Delta \rho$	[kg/m ³]	Kapitel 4.2, Dichtedifferenz zwischen Frischladungs- und Mischungszone

$\Delta\varphi_{BD}$	[°KW]	Brenndauer
$\Delta\varphi_{BD,0}$	[°KW]	Kapitel 3.1, Brenndauer des Referenzbetriebspunkts
$\Delta\varphi_{LTC}$	[°KW]	Kapitel 4.3.1, Kurbelwinkelbereich zur Berechnung der umgesetzten Wärmemenge in der Niedertemperaturverbrennung
$\Delta\varphi_{ZV}$	[°KW]	Dauer des Zündverzugs
$\Delta\varphi_{ZV,HTC}$	[°KW]	Kapitel 3.3.1, Zündverzugsdauer der Hochtemperaturverbrennung bei Berechnung über den arithmetischen Mittelwert der beiden anderen Berechnungsansätze
$\Delta\varphi_{ZV,LTC}$	[°KW]	Kapitel 3.3.1, Zündverzugsdauer der Niedertemperaturverbrennung
$\Delta\varphi_{ZV,0}$	[°KW]	Kapitel 3.1, Dauer des Zündverzugs im Referenzbetriebspunkt
$\Delta\varphi_{ZV,I}$	[°KW]	Kapitel 3.3.1, Zündverzugsdauer bei direkter Abschätzung über Gleichung (3-57)
$\Delta\varphi_{ZV,II}$	[°KW]	Kapitel 3.3.1, Zündverzugsdauer bei Berechnung über das Zündintegral
δ	[-]	Kapitel 3.2.2, Exponent zur Darstellung des Druckeinflusses
ε_{Diss}	[-]	Kapitel 4.2, Parameter zur Gewichtung der Dissipation
ε_{Drall}	[-]	Kapitel 4.2, Parameter zur Gewichtung der Drallturbulenz
$\varepsilon_{Drall,Koz.}$	[-]	Kapitel 5.3, Parameter, der bei der Abstimmung des Ruß-NOx Modells nach Kožuch bestimmt wurde, vgl. [83] S. 100
$\varepsilon_{Einspr.}$	[-]	Kapitel 4.2, Parameter zur Gewichtung des Einspritzturbulenz
$\eta_{hom.Pool,ä.Gb.}$	[-]	Kapitel 4.4.1, Umsetzungswirkungsgrad des homogenen Pools bei äußerer Gemischbildung
$\eta_{hom.Pool,DI}$	[-]	Kapitel 4.4.1, Umsetzungswirkungsgrad des homogenen Pools bei innerer Gemischbildung
η_u	[-]	Umsetzungswirkungsgrad
ϑ	[°]	Kapitel 3.3.2, Kegelwinkel des Einspritzstrahls
$\Lambda_{Gw.}$	[-]	Kapitel 3.2.2, Zerklüftungsmaß der Gemischwolke
λ	[-]	(globales) Luftverhältnis
$\lambda_{Gw.}$	[-]	Kapitel 3.2.2, Luftverhältnis der Gemischwolken
λ_{Paket}	[-]	Kapitel 3.2.3, Luftverhältnis in der jeweiligen Paketzone

λ_{Pre}	[-]	Kapitel 3.2.4, Luftverhältnis in dem die Premixed-Verbrennung stattfindet
$\lambda_{\text{UV,R-Zone}}$	[-]	Kapitel 4.4.2, Luftverhältnis in der Reaktionszone
λ_{u}	[-]	Kapitel 3.2.1, Untere Lambda-Grenze
λ_0	[-]	Kapitel 3.1, Luftverhältnis im Referenzbetriebspunkt
ν_{Diff}	[m ² /s]	Kapitel 3.2.2, Turbulente (kinematische) Viskosität zur Beschreibung der Diffusionsverbrennung
ξ_{CO}	[-]	Kapitel 3.3.2, Kohlenstoffmonoxidmassenanteil
ξ_{CO_2}	[-]	Kapitel 3.3.2, Kohlenstoffdioxidmassenanteil
ξ_{c}	[-]	Kapitel 3.3.2, Massenanteil der prozeßvarianten Spezies
$\xi_{\text{c,Ggw.}}$	[-]	Kapitel 3.3.2, Massenanteil der prozeßvarianten Spezies im Gleichgewichtszustand
$\xi_{\text{c},0}$	[-]	Kapitel 3.3.2, Massenanteil der prozeßvarianten Spezies bei Rechenbeginn
$\xi_{\text{Krst.,gasf.,Paket}}$	[-]	Kapitel 3.2.3, Massenanteil des gasförmigen Kraftstoffs innerhalb des Pakets
$\xi_{\text{Krst.,UV}}$	[-]	Kapitel 3.3.3, Massenanteil des unverbrannten Kraftstoffs
$\xi_{\text{M-Zone}}$	[-]	Kapitel 4.2, Massenanteil der Mischungszone
$\xi_{\text{M-Zone,HB}}$	[-]	Kapitel 4.3.2, Massenanteil der Mischungszone zum Homogenisierungsbeginn
ξ_{O_2}	[-]	Kapitel 3.3.2, Sauerstoffmassenanteil
$\xi_{\text{O}_2,\text{Paket}}$	[-]	Kapitel 3.2.3, Massenanteil des Sauerstoffs innerhalb des Pakets
$\xi_{\text{R-Zone}}$	[-]	Kapitel 4.3.2, Massenanteil der Reaktionszone im aktuellen Rechenschritt
$\xi_{95\%-\text{Gw.}}$	[-]	Kapitel 4.2, Massenanteil der 95%-Gemischwolke
$\rho_{\text{Fl-Zone}}$	[kg/m ³]	Kapitel 4.2, Dichte der Frischladungszone
$\rho_{\text{Gem.}}$	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.3, Dichte des zündfähigen Gemischs
$\rho_{\text{Gem.,lok}}$	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.4, Dichte des lokal vorliegenden Kraftstoff-Luft Gemisches
$\rho_{\text{Krst.,fl}}$	[kg/m ³]	Kapitel 4.2, Dichte des flüssigen Kraftstoffs
$\rho_{\text{Krst.,gasf.}}$	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.4, Dichte des gasförmigen Kraftstoffs
$\rho_{\text{Luft,Zyl}}$	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.3, Luftdichte im Brennraum
$\rho_{\text{M-Zone}}$	[kg/m ³]	Kapitel 4.2, Dichte der Mischungszone
ρ_{Tr}	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.3, Dichte des Kraftstofftropfens
ρ_{UV}	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.2, Dichte im Unverbrannten

$\rho_{Zyl.,gasf.}$	[kg/m ³]	Kapitel 3.2.4, Dichte der gasförmigen Ladung im Brennraum
σ_{Tr}	[N/m]	Kapitel 3.2.3, Oberflächenspannung des Tropfens
T_{ZV}	[-]	Kapitel 3.2.2, Zündverzugsgrenze
τ_{Arr}	[s]	Kapitel 3.2.4, Zündverzugszeit entsprechend dem Arrhenius-Term
$\tau_{char,Diff}$	[s]	Kapitel 3.2.2, Charakteristische Zeit der Diffusionsverbrennung
$\tau_{char,lam}$	[s]	Kapitel 3.3.3, Charakteristische Zeit des laminaren Verbrennungsanteils
$\tau_{char,turb}$	[s]	Kapitel 3.3.3, Charakteristische Zeit des turbulenten Verbrennungsanteils
τ_{Mag}	[s]	Kapitel 3.2.4, Zündverzugszeit entsprechend dem Magnussen-Term
τ_{Pre}	[s]	Kapitel 3.2.2, charakteristische Zeit zur Darstellung der Premixed-Verbrennung
$\tau_{Verd.}$	[s]	Kapitel 3.2.4, Verdampfungszeit bei aktuellen Randbedingungen
$\tau_{Verd.}$	[s]	Kapitel 3.3.2, charakteristische Verdampfungszeit
τ_{ZV}	[s]	Zündverzugszeit bei aktuellen Randbedingungen
$\tau_{ZV,phy.}$	[s]	Kapitel 3.2.2, physikalische Zündverzugszeit
$\tau_{ZV,I}$	[s]	Kapitel 3.3.1, Zündverzugsdauer bei den Randbedingungen des aktuellen Rechenschritts
$\Phi_{BB,HV}$	[°KW]	Kurbelwellenposition bei Brennbeginn der Hauptverbrennung
χ	[-]	Kapitel 3.3.2, Fortschrittsvariable

Indizies

AGR	Abgasrückführung
Akt.	Aktivierungstemperatur, Aktivierungsenergie
Arr	Arrhenius
Aufbereitung	Aufbereitung
a	axial
aufb.	aufbereitet
ä. Gb.	äußere Gemischbildung
B	Brennstoff
BB	Brennbeginn
BD	Brenndauer

BE	Brennende
Beimisch	Beimischung
Bereich	Diffusionsbereich
Bezug	Bezug, Bezugsgröße
CO	Kohlenstoffmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
char	charakteristisch
chem.	chemisch(er)
chem. U.	chemischer Umsatz
D	Düse
DI	Direkteinspritzung, innere Gemischbildung
Diff	Diffusionsverbrennung
Diss	Dissipation
Drall	Drall
Druck	Druck(gradient)
EB	Einspritzbeginn
ED	Einspritzdauer
Edukte	Edukte
Eff	Effizienz
Einspr.	Einspritzung
Entr	Entrainment, Beimischung
ES	Einlassventil-Schließt
EV	Einlassventil
eff	effektiv
Flam.	Flamme
Fl-Zone	Frischladungszone
fal.	fallend
fl	flüssig
frisch	frisch, Frischluft
Gem.	Gemisch
Geschw.	Geschwindigkeit
Ggw.	(chemisches) Gleichgewicht
Gw.	Gemischwolke(n)
gasf.	gasförmig
gem.	gemittelt
ges.	gesamt

HB	Homogenisierungsbeginn
HTC	Hochtemperaturverbrennung
HV	Hauptverbrennung
hom. Pool	homogener Pool
Ind.	indiziert
Inert	Inert
i	aktueller Rechenschritt
i-1	vorherige Rechenschritt
Kegelwinkel	Kegelwinkel
Komp.	Kompression
Koz.	Kożuch
Krst.	Kraftstoff
kin	kinetische
LTC	Niedertemperaturverbrennung
Luft	Luft
L.bew	Ladungsbewegung
lam	laminar
lok	lokal
Mag	Magnussen
M-Zone	Mischungszone
m	mittlere
N2	Stickstoff
n. ums.	nicht umsetzbar
O2	Sauerstoff
Paket	Paket
Pre	Premixed
Produkte	Produkte
phy.	physikalisch(er)
R	Reaktion
RB	Rechenbeginn
Rg.	Restgas
Rsw.	Rechenschrittweite
R-Zone	Reaktionszone
Scheibe	Scheibe
Strahl	Kraftstoffstrahl(kegel)
st.	steigend

stö.	stöchiometrisch
Tr	Tropfen
teilh.	teihomogen
turb	turbulent, Turbulenz
Überschuss	Überschuss
UV	unverbrannt, im Unverbrannten
u	Umfang
ums.	umsetzbar
Verb.	Verbrennung
Verd.	Verdampfung
Verm.	Vermischung
VL	Volllast
v	Geschwindigkeit
verfügbar	verfügbar
vV	vollständige Verbrennung
Zg.	Zündgrenze
Zuord	Zuordnung
ZV	Zündverzug
Zyl	Zylinder
$\Delta\rho$	Dichtedifferenz
0	Referenz(betriebs)punkt, Rechenbeginn
1, 2, 3, ...	Zählindizes

Abkürzungen

1D	eindimensional
3D	dreidimensional
AGR	Abgasrückführung (→ EGR)
AMD	Advanced Micro Devices
APR	Arbeitsprozessrechnung
ASP	Arbeitsspiel
ATDC	after top dead center (nach OT)
BMEP	brake mean effective pressure (effektiver Mitteldruck)
BMW	Bayerische Motoren Werke
BRD	Bundesrepublik Deutschland
Bv.	Brennverlauf
bspw.	beispielsweise

CAI	Controlled Auto Ignition (→ RZV)
CFD	Computational Fluid Dynamics
CombEff	combustion efficiency (Umsatzwirkungsgrad)
CPI	Centre of Premixed Interval (Schwerpunktlage der Vormischzeit)
CRT	Continuously Regenerating Trap
ca.	circa
DCCS	Dilution Controlled Combustion System
DI	Direct Injection (Direkteinspritzung)
DNS	Direkte numerische Simulation
DOC	Diesel Oxidation Catalyst (Dieseloxidationskatalysator)
DPF	Dieselpartikelfilter
DrzUT	Drallzahl im unteren Totpunkt
DVA	Druckverlaufsanalyse
d. h.	das heißt
EFM	Elementary Fuel Mass
EKAS	Einlasskanalabschaltung
EN	Europäische Normen
ES	Einlassventil-Schließt
ETH	Eidgenössische Technische Hochschule
EU	Europäische Union
egr	exhaust gas recirculation (→ AGR)
et al.	hier: et alii (und andere)
FISITA	Fédération Internationale des Sociétés d'Ingénieurs des Techniques de l'Automobile (Weltdachverband der nationalen Automobilingenieur-Verbände)
FLOPS	Floating Point Operations Per Second
FTDC	firing top dead center (Zünd-OT)
FVV	Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e.V.
f	folgende Seite
ff	folgende Seiten
GmbH	Gesellschaft mit beschränkter Haftung
GPA	Gesamtprozessanalyse
GT	Gamma Technologies
ggf.	gegebenenfalls
HC	Kohlenwasserstoff
HCCI	Homogenous Charge Compression Ignition

HCLI	Homogenous Charge Late Injection
HD	Hochdruck
HE	Haupteinspritzung
HPLI	Highly Premixed Late Injection
HTC	high temperature combustion (Hochtemperaturverbrennung)
IFP	Institut Français du Pétrole
IMEP	indicated mean effective pressure (indizierter Mitteldruck)
ISO	International Organization for Standardization
IT	information technology, Informationstechnik, Informations-technologie
IVK	Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen
JTD	Jet Turbo Diesel (Markenbezeichnung des Common-Rail Einspritzsystems bei Fiat)
LAV	Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme
Lkw	Lastkraftwagen
LTC	low temperature combustion (Niedertemperaturverbrennung)
MCC	Mixing Controlled Combustion
MIPS	Million Instructions Per Second
MK	Modulated Kinetics (Ein von Nissan entwickeltes teilhomogenes Brennverfahren)
MTU	Motoren- und Turbinen-Union
ND	Niederdruck
NEFZ	Neuer Europäischer Fahrzyklus
Nfz	Nutzfahrzeug
NO _x	Stickoxide
NSC	NO _x -Storage Catalyst (→ NSK)
NSK	NO _x -Speicher Katalysator (→ NSC)
NTC	Negative Temperature Coefficient
OM	Ölmotor (Bezeichnung für Dieselmotoren bei Daimler)
OT	Oberer Totpunkt
PAK	Polyzyklische, aromatische Kohlenwasserstoffverbindungen
PC	Personal Computer
PCCI	Premixed Charge Compression Ignition
Pkw	Personenkraftwagen
PRF	Primary Reference Fuel
pdf	probability density function (Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion)
ROHR	rate of heat release

RZV	Raumzündverfahren (→ CAI)
R-Zone	Reaktionszone
SAE	Society of Automotive Engineers (Verband der Automobilingenieure in den USA)
SCR	selective catalytic reduction (selektive katalytische Reduktion)
SI	Système international d'unités
SOF	soluble organic fraction (lösliche, organische Anteile)
TPM	total particle mass
US	United States (→ USA)
USA	United States of America (Vereinigte Staaten von Amerika)
UT	Unterer Totpunkt
UV	Ultraviolett
VE	Voreinspritzung
VW	Volkswagen
vgl.	vergleiche
WSF	water soluble fraction (wasserlöslicher Anteil)
z. B.	zum Beispiel

1 Einleitung

Aufgrund seines geringen spezifischen Verbrauchs wird der Dieselmotor seit jeher als Antriebsquelle für Nutzfahrzeuge, Baumaschinen und Schiffe eingesetzt. Seit Beginn der 90er Jahre des vorherigen Jahrhunderts wurden Dieselmotoren mit Direkteinspritzung in Kombination mit Turboaufladung von nahezu allen Herstellern als Pkw-Antrieb eingeführt und führten zu einer Etablierung des Dieselmotors im Pkw-Bereich in ganz Europa und speziell in Deutschland. Bei Großserienfahrzeugen haben aufgeladene Dieselmotoren vergleichbare Hubraumleistungen wie Saug-Ottomotoren, siehe [24] S. 494. Das maximale Drehmoment ist meist höher und ermöglicht in Verbindung mit Automatikgetrieben eine dynamische und gleichzeitig sparsame Fortbewegung. Vergleicht man leistungsgleiche Pkw-Modelle, die sowohl mit Otto- als auch mit Dieselmotor angeboten werden, sind die Anschaffungskosten des Fahrzeugs mit Dieselmotor meist höher. Die Kfz-Steuer ist für Pkw mit Dieselmotoren deutlich höher, dafür sind die Treibstoffkosten aufgrund niedrigerem Verbrauch und niedrigerer Kraftstoffsteuer deutlich geringer. In Summe amortisieren sich Pkw mit Dieselmotor bei einer Jahresfahrleistung von 15.000 km häufig innerhalb von zehn Jahren, siehe Anhang 7.2.

Im Vergleich zu Ottomotoren konnte bei Dieselmotoren lange Zeit auf eine aufwendige Abgasnachbehandlung verzichtet werden. Um die Jahrtausendwende wurden die ersten Großserien Diesel-Pkw ab Werk mit Rußpartikelfilter ausgestattet, wodurch der Zielkonflikt zwischen Ruß- und Stickoxidemissionen durchbrochen werden konnte [139]. Während man die Stickoxidbildung innermotorisch reduzierte nahm man dabei eine erhöhte Rußbildung in Kauf, die dann im Partikelfilter aufgefangen wurde. Diese Vorgehensweise etablierte sich im Pkw-Bereich im Laufe der kommenden Jahre. Nachteilig an dieser Vorgehensweise ist der leicht erhöhte Kraftstoffverbrauch zur Filterregeneration. In Bereich der Nutzfahrzeuge wurde daher ein anderer Weg beschritten. Dabei werden die Partikelemissionen innermotorisch verringert und die erhöhten Stickoxidemissionen verbrauchsneutral im SCR-Katalysator (selective catalytic reduction) reduziert [37]. Aufgrund der strengen US-Schadstoffgrenzwerte gibt es inzwischen auch Pkw mit Systemen zur Reduktion der Stickoxidemissionen, bspw. [25], [44], [137]. Die nächste Grenzwert-Stufe in Europa, die Euro 6 Norm, sieht eine weitere Reduktion der Stickoxidemissionen vor. Bei Anwendung konventioneller Brennverfahren scheint ein SCR-System daher auch im Pkw-Bereich unumgänglich, was zu einer Erhöhung der Anschaffungskosten führt. Dadurch wird der Dieselmotor als Pkw-Antrieb unattraktiver, da sich die spezifischen Verbräuche von Ottomotoren in den letzten Jahren deutlich verringert haben. Neue Brennverfahren mit denen die innermotorische Schadstoffentstehung reduziert werden könnte werden daher bereits seit einigen Jahren intensiv untersucht.

Während sich die rein homogene Dieselerverbrennung (gemischansaugend oder im DI-Betrieb mit sehr frühen Einspritzbeginn) für den Serieneinsatz als nicht zielführend herausgestellt hat, bietet die teilhomogene Dieselerverbrennung Möglichkeiten die Rohemissionen an Rußpartikeln und Stickoxiden deutlich zu senken, siehe [64] S.98. Die bisherigen Untersuchungen zeigten jedoch auch den immer noch immensen Forschungs- und Entwicklungsbedarf in diesem Themenbereich auf. Aktuelle Forschungsprojekte beschäftigen sich beispielsweise damit, den teilhomogenen Betrieb stationär stabil einregeln zu können, vgl. FVV-Vorhaben „Verbrennungsregelung“ (Projekt-Nr. 997). Dies gestaltet sich recht schwierig, da ein vergleichsweise langer Zündverzögerung notwendig ist, um zumindest eine lokale Homogenisierung zu gewähr-

leisten. Dieser hängt jedoch sehr stark von den Randbedingungen (Temperatur, Druck, AGR-Rate, ...etc.) ab, die im transienten Betrieb schwanken.

Nachdem die numerische Simulation in der Brennverfahrensentwicklung schon seit einigen Jahrzehnten intensiv eingesetzt wird, ist sie zwischenzeitlich auch aus der Serienentwicklung nicht mehr wegzudenken. Optimierungen des Luftpfades oder vergleichende Untersuchungen von verschiedenen Aufladekonzepten werden zunehmend simulativ durchgeführt, da dies meist billiger ist als eine experimentelle Untersuchung. Aufgrund der gestiegenen Rechenleistungen können immer detailliertere Modelle zur Anwendungen kommen wodurch die Belastbarkeit der Ergebnisse ebenfalls zugenommen hat. Im Hinblick auf die homogene und teilhomogene Dieselerbrennung besteht jedoch noch Bedarf an geeigneten Simulationswerkzeugen. Bisher ist kein phänomenologisches Verbrennungsmodell fähig den homogenen bzw. teilhomogenen Betrieb bei vertretbaren Rechenzeiten vorhersagefähig abzubilden. Das im Rahmen dieser Arbeit vorgestellte Modell soll diese Lücke schließen.

2 Grundlagen und Stand der Technik

2.1 Konventionelle Dieselerbrennung

Bis in die späten 80er Jahre des vorherigen Jahrhunderts waren Dieselmotoren im Pkw-Bereich eine Randerscheinung. Hinsichtlich der Gemischbildung handelte es sich um Vor- oder Wirbelkammermotoren. Ein Nachteil dieser Bauarten sind die hohen thermischen Belastungen des Kolbens, welche dadurch verursacht werden, dass die Brennstrahlen aus der Vor- oder Wirbelkammer auf eine eng begrenzte Kolbenbodenfläche treffen, siehe [171] S. 459, S. 462 f und S. 494. Bei Aufladung überstieg die Belastung die Festigkeit damaliger Standard-Werkstoffe, weshalb fast ausnahmslos Saugmotoren entwickelt wurden. Van Basshuysen et al. führten im Verlauf der 1980er Jahre systematische Untersuchungen an Wirbelkammer- und DI-Motoren durch [155]. Durch die direkte Einspritzung in den Brennraum konnten die geschilderten thermischen Probleme umgangen werden und die Motoren daher auch aufgeladen werden, siehe [155] S. 465. Der Kraftstoffverbrauch nimmt aufgrund geringerer Wandwärmeverluste im Vergleich zu Brennverfahren mit indirekter Einspritzung ab, siehe [155] S. 458. Ohne Anpassung des Brennverfahrens nehmen die Geräuschemissionen jedoch deutlich zu, siehe [155] S. 465.

Zum Verständnis der Geräuschproblematik soll im Weiteren ein Dieselmotor mit Direkteinspritzung betrachtet werden. Es wird Luft, oder bei externer AGR ein Luft-Restgas Gemisch, angesaugt. Die Ladung wird komprimiert und es erfolgt eine Kraftstoffeinspritzung in den Brennraum. Der Kraftstoffstrahl breitet sich im Brennraum aus. Die Strahlspitze wird deutlich abgebremst und es kommt zu einer Vermischung von Kraftstoff und Zylindergas. Auch am Strahlrand kommt es aufgrund von Scherkräften zu einer Vermischung. Während dieser Phase zerfallen die größeren Kraftstofftropfen in kleinere Fragmente, was die Verdampfung begünstigt. Gleichzeitig kommt es zu ersten chemischen Reaktionen. Es bilden sich Radikale, allerdings ohne relevante Wärmefreisetzung. Nach einer gewissen Zeit kommt es schließlich zur Zündung und somit zum Brennbeginn. Die chemischen Prozesse bei der Selbstzündung von Dieselkraftstoff werden im nächsten Unterkapitel detailliert dargestellt, während es hier nun um die Betrachtung der Verbrennung geht und Möglichkeiten aufgezeigt werden, sie zu beeinflussen.

Bei einer einzelnen Einspritzung ergibt sich meist ein charakteristischer Brennverlauf, der dem in Abbildung 1 dargestellten ähnelt. Nach Ablauf des Zündverzugs wird der Kraftstoff, der sich bereits während des Zündverzugs gut mit Luft vermischen konnte, relativ zügig umgesetzt, siehe schwarze Ellipse in Abbildung 1. Diese Phase wird Vormischverbrennung oder auch Premixed-Verbrennung genannt und ist rein kinetisch kontrolliert. Das bedeutet die Umsatzgeschwindigkeit wird durch die Reaktionsgeschwindigkeit bestimmt. Mit Ausnahme von sehr niedriger Teillast nahe dem Leerlauf wird die Einspritzung bei Brennbeginn noch nicht beendet sein. Der Kraftstoff der nach Brennbeginn eingespritzt wird muss sich zunächst mit dem Brennraumgas vermischen, was eine gewisse Zeit benötigt. Die Brennrate wird daher in erster Linie von der Vermischungsgeschwindigkeit begrenzt, weshalb man diese Phase der Verbrennung auch Diffusionsverbrennung nennt. Hinsichtlich des Brennverlaufmaximums gibt es laut Barba zwei unterschiedliche Faktoren, siehe [10] S. 30 f. Zum einen wird die Brennrate mit zunehmender Einspritzrate ebenfalls zunehmen, da mehr Kraftstoff-Luft Gemisch aufbereitet wird. Zum anderen wird mit fortschreitender Verbrennung der zur Verfügung stehende Sauerstoff abnehmen. Bei Teillast-Betrieb wird die maximale Einspritzrate kurz vor Einspritzende erreicht, weshalb das Brennverlaufmaximum bei Einspritzende erreicht wird, siehe Abbildung 1. Bei Vollast wird die

maximale Einspritzrate deutlich vor Einspritzende erreicht und verweilt bis dahin auf diesem Niveau. Dadurch ergibt sich auch im Brennverlauf ein vergleichbares Plateau. Da die durch die Einspritzung in den Brennraum eingebrachte turbulente kinetische Energie überwiegend für die Vermischung von Kraftstoff und Luft verantwortlich ist, siehe [29] S. 486, fällt die Brennrate nach Einspritzende unabhängig von der Last deutlich ab. Die Vermischung wird zusätzlich durch den abnehmenden Frischluftanteil im Brennraum verlangsamt. Da die Expansionsphase bereits fortgeschritten ist, fällt auch die Brennraumtemperatur stark ab. Dies führt zu einer Abnahme der Reaktionsgeschwindigkeit und somit zu einer niedrigen Brennrate über einen weiten Kurbelwinkelbereich. Diese letzte Phase der Verbrennung wird meist diffusiver Ausbrand genannt.

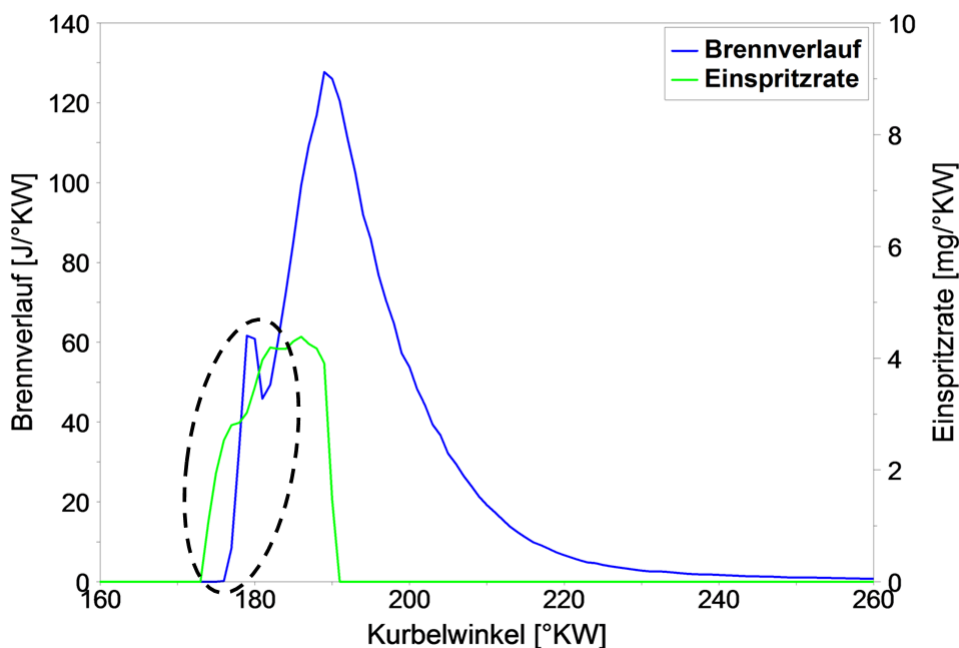


Abbildung 1: Brennverlauf bei konventionellem Dieselmotoren mit einer Einzelspritzung

Hinsichtlich der Geräuschemissionen muss die Premixedverbrennung näher betrachtet werden. Sie findet meist bei einer Kurbelwinkelposition um den oberen Totpunkt statt. Das hat zur Folge, dass die rasche Zunahme des Brennverlaufs zu einem entsprechend hohen Druckgradienten im Brennraum führt. Dieser ist akustisch von außen bzw. im Fahrzeug als sogenanntes Dieselnageln wahrnehmbar. Im Bereich der Nutzfahrzeuge wurde dieser Nachteil des Direkteinspritzverfahrens mit Einzelspritzung gegenüber dem deutlichen Kraftstoffverbrauchsvorteil hinten an gestellt. Im Pkw-Bereich war man nicht bereit, die Komforteinbußen aufgrund der höheren Geräuschemissionen in Kauf zu nehmen. Aufgrund der oben bereits erwähnten Tatsache, dass Motoren mit indirektem Dieselmotoren mit den damals zur Verfügung stehenden Werkstoffen nicht beliebig aufgeladen werden konnten, waren die hubraumspezifischen Leistungen recht niedrig. Dies hatte zur Folge, dass die Fahrleistungen damaliger Diesel-Pkw im unteren Segment angesiedelt waren. Da wirtschaftliche Aspekte bis zum Beginn der 90er Jahre im Pkw-Bereich eher im Hintergrund standen, konnte keine größere Marktdurchdringung im Pkw-Segment erreicht werden.

Bei den ersten Pkw-Motoren mit Direkteinspritzung wurde der erhöhten Geräuschentwicklung durch entsprechende Motorkapselung begegnet. Durch eine ausgeprägte Premixed-Verbrennung wird jedoch auch die Motormechnik zusätzlich beansprucht. Die Motoren mussten stabiler ausgeführt werden, was in Verbindung mit der Kapselung zu einer Vergrößerung des Motorgewichts, des Bauraums und der Kosten führte. Sowohl aus Komfort, als auch aus Festigkeitsgründen, erschien es daher sinnvoll einen zu hohen Premixed-Anteil zu vermeiden. In diesem Zusammenhang war schon frühzeitig die Applikation von Voreinspritzungen Gegenstand von Forschungsuntersuchungen [78], [57] S. 181 ff, [130] S. 3.85 ff.

Bei Voreinspritzungen wird eine relativ geringe Menge an Kraftstoff deutlich vor OT eingespritzt. Ziel ist die Verkürzung des Zündverzugs der später folgenden Haupteinspritzung. Bei Brennbeginn der Haupteinspritzung ist dann deutlich weniger Kraftstoff bereits aufbereitet und entsprechend fällt die Premixed-Verbrennung geringer aus. Bezüglich der Wirkungsmechanismen gibt es verschiedene Erkenntnisse. Aufgrund der geringen Einspritzmenge kann der Kraftstoff der Voreinspritzung sich relativ schnell mit Luft durchmischen. Bei entsprechend früher Einspritzung kann dies zur Folge haben, dass lokal schnell ein sehr mageres Gemisch entsteht. Eine frühe Voreinspritzung wird folglich vor der Haupteinspritzung noch nicht vollständig umgesetzt sein. Je nach lokalen Randbedingungen wie Temperatur, Druck und Luftverhältnis kommt es entweder zu gar keiner Zündung, oder nach einer kurzen Verbrennungsphase zu einer Erlöschung der Vorverbrennung. In diesem Zusammenhang spricht man auch vom Ausmagern. Aufgrund der Vorverbrennung kommt es zu einer lokalen Temperaturerhöhung. Findet nun die Haupteinspritzung statt, kann sich dieser frisch zugeführte Kraftstoff an dem heißen Restgas entzünden. Laut De Neef ist es dabei wichtig, dass sich der Kraftstoff der Haupteinspritzung im Bereich der brennenden Voreinspritzung befindet, damit diese als „Zündfackel“ dienen kann, siehe [39] S. 4.19. Vereinzelt wird auch die Bildung von Radikalen aus dem Kraftstoff der Voreinspritzung als Erklärung für den kürzeren Zündverzug der Haupteinspritzung herangezogen, siehe [69] S. 943 oder [78] S. 1816. Eine Voraussetzung wäre dann jedoch, dass die Voreinspritzung nicht vollkommen oxidiert, sondern lediglich eine Niedertemperaturverbrennung stattfindet, siehe Kapitel 2.2.

Bei den ersten experimentellen Untersuchungen zu Voreinspritzungen wurden noch Verteilereinspritzpumpen in Kombination mit zusätzlichen Einspritzdüsen zur Realisierung der Voreinspritzung verwendet [39], die jedoch nie in Serie gingen. Als Audi 1989 seinen ersten DI-Motor präsentierte, wurde dieser mit einer Kombination aus Verteilereinspritzpumpe und Zwei-Feder-Düsenhaltern ausgestattet [156]. An der ETH Zürich wurde 1984 eine elektromagnetisch betätigte Akkumulier-Einspritzdüse entwickelt, mit der auch eine Voreinspritzung bei flexiblem Einspritzbeginn und -dauer realisiert werden konnte, siehe [57] S.181. Dieses System war die Basis für die spätere Entwicklung des Common Rail Einspritzsystems von Fiat bzw. in Folge von Bosch, dass Ende 1997 im Alfa Romeo 156 JTD Markteinführung hatte [95]. Es ersetzte in den folgenden Jahren die bisherigen Einspritzsysteme mit Hochdruck-Verteilerpumpe, da diese nach wie vor nur eine Voreinspritzung realisieren konnten, siehe [85] S. 309. Parallel zum Common Rail System wurde von Bosch das Pumpe-Düse System für Pkw bis zur Serienreife weiterentwickelt, welches 2000 im Passat B5 (Typ3BG) debütierte, siehe [132] S. 45, [158]. Bei diesem System konnten zwar höhere Einspritzdrücke realisiert werden, siehe [85] S. 309, aber ebenfalls nur eine Voreinspritzung, siehe [85] S. 311. Mit einem Common Rail System waren jedoch ab der zweiten Generation bis zu fünf Einspritzungen pro Arbeitsspiel möglich [145] S. 892. Aus diesem Grund ist auch der VW Konzern seit 2007 dazu überge-

gangen, das Common Rail Einspritzsystem bei Neuentwicklungen einzusetzen [132] S. 45. Aktuelle Systeme im Pkw-Bereich erreichen 2000 bar Systemdruck und können bei Verwendung von Piezo-Injektoren bis zu acht Einspritzungen pro Arbeitspiel darstellen [23].

Bei Nacheinspritzungen unterscheidet man frühe und späte Nacheinspritzungen. Frühe Nacheinspritzungen werden relativ kurz nach Einspritzende der Haupteinspritzung appliziert. In Folge kommt es zu einer Verbrennung, durch die der Rußabbrand gefördert wird und somit die Rußemissionen innermotorisch verringert werden. Späte Nacheinspritzungen erfolgen bei Bedarf relativ spät im Expansionstakt. Aufgrund der bereits niedrigen Temperaturen wird der Kraftstoff nicht mehr im Brennraum verbrannt, sondern gelangt ins Abgassystem. Dort wird er entweder in einem Oxidationskatalysator umgesetzt, oder direkt innerhalb eines Rußpartikelfilters mit einer katalytischen Beschichtung, siehe [67] S.355 f. In beiden Fällen wird dadurch die Abgastemperatur erhöht und somit der beladene Partikelfilter freigebrannt.

2.2 Zündverhalten von Dieselkraftstoff

Diesekraftstoff besteht aus einer Vielzahl an unterschiedlichen, langkettigen Kohlenwasserstoffverbindungen, siehe [144] S.23. Anders als beim fremdgezündeten Ottomotor, beginnt die Verbrennung im Dieselmotor aufgrund von Selbstzündung. Im motorischen Bereich wird die Zeit zwischen Einspritz- und Verbrennungsbeginn allgemein als Zündverzugszeit bezeichnet. Bei Mehrfacheinspritzungen muss folglich zwischen den Zündverzügen der einzelnen Einspritzungen unterschieden werden. In [124] S. 39 ff sind alle gängigen Definitionen des Brennbeginns beschrieben. Bei der Messdatenanalyse von konventionellen Dieselmotoren ohne Voreinspritzungen, wird zur Definition des Brennbeginns häufig der 5%-Umsatzpunkt verwendet. Diese Vorgehensweise ist jedoch nur bei einem einstufigen Zündverhalten zulässig, was – wie die weiteren Ausführungen noch zeigen werden – bei der konventionellen Dieselerverbrennung vorliegt, nicht aber bei homogenen Dieselmotoren.

Die erste Phase nach der Einspritzung besteht aus der Strahlausbreitung, dem Strahlaufbruch und dem Tröpfchenzerfall. Sie wird auch als physikalischer Zündverzug bezeichnet. Die ersten chemischen Reaktionen beginnen, sobald die Verdampfung eingesetzt hat und gasförmiger Kraftstoff vorliegt. Dieser Zeitabschnitt wird daher auch als chemischer Zündverzug bezeichnet. Sowohl die Vorreaktionen während des Zündverzugs als auch die Verbrennung selbst bestehen aus einer Vielzahl aus Zwischenreaktionen, deren Anzahl aufgrund der heterogenen Zusammensetzung zusätzlich erhöht ist. Da n-Heptan in Hinblick auf die Zündverzugszeit ein vergleichbares Verhalten wie Diesel nach EN 590¹ hat, siehe [144] S. 22, wird es oft als Vergleichskraftstoff herangezogen.

Das Zündverhalten höherer Kohlenwasserstoffe lässt sich abhängig von Temperatur und Druck in unterschiedliche Bereiche einteilen, siehe [Abbildung 2](#).

¹ Norm zur Festlegung der Kraftstoffeigenschaften von Standarddiesel in der EU, Island, Norwegen und Schweiz.

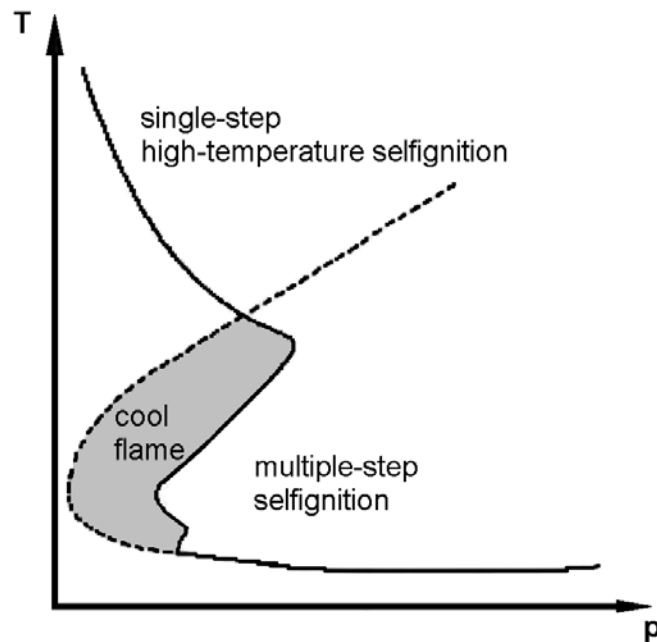


Abbildung 2: Zündverhalten von höheren Kohlenwasserstoffen [118] S. 368 (Nach [142] S.128)

Betrachtet man das Zündverhalten von n-Heptan stellvertretend für Diesel, erkennt man, dass bei Temperaturen oberhalb von 900 K eine einstufige Zündung auftritt, wie man sie beim konventionellen Dieselmotor beobachten kann. Bei niedrigeren Temperaturen und Drücken kommt es jedoch zu einem mehrstufigen Zündverhalten mit sogenannter Cool-Flame Verbrennung [134] S.19. Dieses mehrstufige Zündverhalten ergibt sich aus verschiedenen Reaktionspfaden, die temperaturabhängig durchlaufen werden. Fasst man die unterschiedlich detaillierten Darstellungen aus [35], [116], [121], [124], [134], [142], [144], [149] und [160] zusammen, ergibt sich die in Abbildung 3 dargestellte vereinfachte Übersicht. N-Heptan gehört zu der Gruppe der Alkane² (C_nH_{2n+2}). Zu Beginn reagiert das Brennstoffmolekül³ (RH) gemeinsam mit einem Sauerstoffmolekül (O_2). Es entstehen ein Brennstoffradikal⁴ ($R\cdot$) und ein Hydroperoxyradikal⁵ ($HO_2\cdot$), siehe Gleichung (2-1) in Abbildung 3. Obwohl diese Reaktion endotherm ist, siehe [134] S. 19, findet sie bereits ab 400 K statt, siehe [124] S. 23.

² Trivialname: Paraffine

³ R kann als Alkylrest eines Alkanes bzw. als Alkylgruppe aufgefasst werden ($C_nH_{(2n+2)-1}$), die gemeinsam mit dem Wasserstoffatom ein Alkan bildet (RH).

⁴ $R\cdot$ wird auch als Alkyl-Radikal bezeichnet, siehe [63] S. 10.

⁵ Teilweise auch als Hydroperoxyradikal bezeichnet, siehe [121] S. VI. Nicht zu verwechseln mit dem später noch erwähnten Hydroperoxidradikal ($R\cdot OOH$).

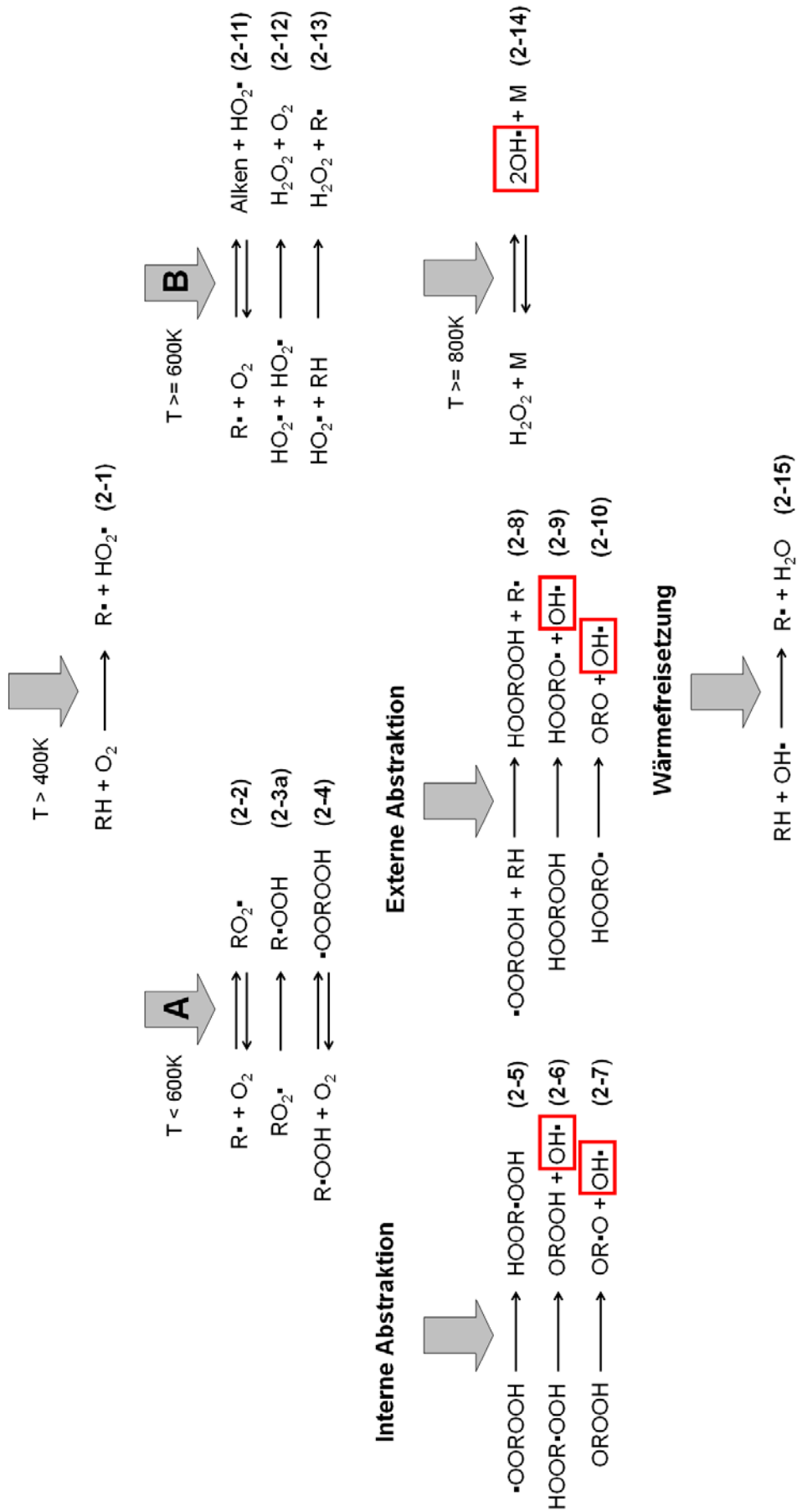


Abbildung 3: Reaktionspfade während der Niedertemperaturverbrennung

Die Brennstoffradikale können über zwei verschiedene Reaktionspfade weiter umgesetzt werden. Solange die Temperatur weniger als 600 K beträgt, verläuft die Reaktion über den in [Abbildung 3](#) dargestellten Pfad A weiter, siehe [121] S. 16. Zunächst lagert sich an das Brennstoffradikal ($R\cdot$) molekularer Sauerstoff (O_2) an und bildet so ein Alkylperoxyl-Radikal⁶ ($RO_2\cdot$), siehe Gleichung (2-2). Über eine interne Wasserstoffabstraktion, bei der sich die freie Valenz von dem Sauerstoffatom zu einem der Kohlenstoffatome verlagert, wird ein Hydroperoxidradikal ($R\cdot OOH$) gebildet, siehe Gleichung (2-3a). Dieser Vorgang ist in [Abbildung 4](#) dargestellt.

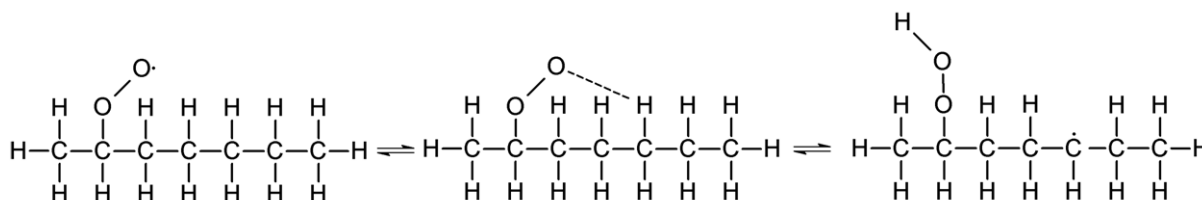
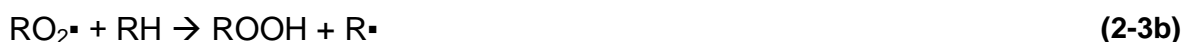


Abbildung 4: Hydroperoxidradikal ($R\cdot OOH$) nach interner Wasserstoffabstraktion mit Bildung eines Carbonsäurerests. Darstellung angelehnt an [144] S. 25/Abb. 2.5

Alternativ kann das Wasserstoffatom eines weiteren Brennstoffmoleküls (RH) abstrahiert und an das Alkylperoxyl-Radikal angelagert werden. Die Produkte dieser externen Wasserstoff-Abstraktion sind ein Brennstoffradikal und ein Hydroperoxid ($ROOH$), siehe Gleichung (2-3b). Da die externe Wasserstoffabstraktion jedoch wesentlich länger benötigt als die interne Wasserstoffabstraktion ist sie für den Selbstzündungsprozess ohne Bedeutung [134] S. 20, [160] S. 253 und daher auch nicht in [Abbildung 3](#) dargestellt.



An das bei der internen Wasserstoffabstraktion umstrukturierte Radikal ($R\cdot OOH$) lagert sich innerhalb kurzer Zeit ein weiteres Sauerstoffmolekül (O_2) an, siehe Gleichung (2-4) in [Abbildung 3](#). Die freie Valenz liegt nunmehr an einem Sauerstoffatom vor, was in [Abbildung 5](#) dargestellt ist.

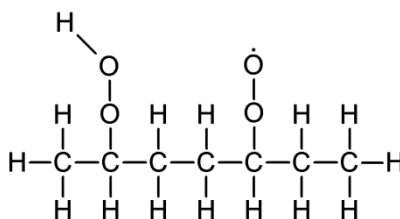


Abbildung 5: Molekül ($\cdot OOROOH$) nach Anlagerung eines Sauerstoffmoleküls an das Hydroperoxidradikal. Darstellung angelehnt an [35] S. 162/Abb. 2

Nach dieser zweiten Sauerstoffaddition kann erneut zwischen zwei Reaktionspfaden mit interner bzw. externer Wasserstoffabstraktion unterschieden werden, die beide gleichzeitig durchlaufen werden. Bei der internen Wasserstoffabstraktion wird die freie Valenz zunächst wieder zu einem Kohlenstoffatom verlagert, siehe Gleichung (2-5). Dieser Zustand ist jedoch aufgrund der niedrigen Bindungsenergie der O-O Bindung nicht stabil [116] S. 108, weshalb sofort ein Hydroxylradikal ($OH\cdot$)

⁶ Teilweise auch als Alkylperoxydradikal oder Alkylperoxidradikal bezeichnet.

abspaltet wird, siehe Gleichung (2-6). Das dabei entstehende Ketohydroperoxid (OROOH)⁷ ist in Abbildung 6 dargestellt.

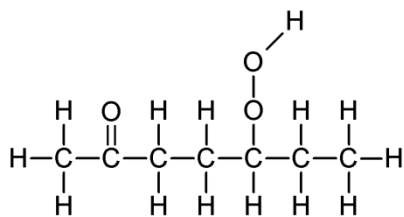


Abbildung 6: Ketohydroperoxid (OROOH). Darstellung angelehnt an [35] S. 162/Abb. 2

Von dem Ketohydroperoxid kann sich unter der Bildung eines Carbonyl-Radikals (OR•O) ein weiteres Hydroxylradikal abspalten, siehe Gleichung (2-7). Diese letzte Reaktion kann als Kettenverzweigung aufgefasst werden, da zwei Radikale entstehen. Sie trägt dazu bei, dass die Reaktivität im Brennraum zunimmt.

Beim Durchlaufen des zweiten Reaktionspfads mit externer Wasserstoffabstraktion, wird zunächst die freie Valenz mit einem Wasserstoffatom aus einem Brennstoffmolekül abgedeckt, siehe Gleichung (2-8) in Abbildung 3. Von diesem Molekül spalten sich in Folge zwei Hydroxylradikale ab, siehe Gleichungen (2-9) und (2-10).

Bei Temperaturen unter 600 K werden die Brennstoffradikale über den bisher aufgezeigten Reaktionsweg A aufgebrochen und somit eine gewisse Anzahl an Hydroxylradikalen gebildet. Sobald Temperaturen oberhalb von 600 K vorliegen können die Brennstoffradikale Reaktionspfad B der Abbildung 3 durchlaufen. Dort reagiert sie zunächst ebenfalls mit Sauerstoff, allerdings wird hierbei ein Alken⁸ (C_nH_{2n}) und ein Hydroperoxylradikal (HO₂•) gebildet, siehe Gleichung (2-11). Letzteres kann entweder mit einem Brennstoffmolekül (RH) zu Wasserstoffperoxid⁹ (H₂O₂) und einem Brennstoffradikal (R•) reagieren, siehe Gleichung (2-13), oder alternativ reagieren zwei Hydroperoxylradikale weiter zu Wasserstoffperoxid (H₂O₂) und Sauerstoff, siehe Gleichung (2-12). Auf den weiteren Zerfall der Alkene wird zu einem späteren Zeitpunkt weiter eingegangen.

Der nächste Reaktionsschritt kann aufgrund der erhöhten Aktivierungsenergie erst ab Temperaturen oberhalb von 800 K erfolgen. Im Vorfeld bildet sich daher relativ viel Wasserstoffperoxid (H₂O₂), das in der folgenden Reaktion unter Anwesenheit eines inerten Stoßpartners (M) in zwei Hydroxylradikale (OH•) zerfällt, siehe Gleichung (2-14).

Bereits bei niedrigen Temperaturen können die über Reaktionspfad A gebildeten Hydroxylradikale mit einem Brennstoffmolekül reagieren und dabei ein Brennstoffradikal (R•) und Wasser (H₂O) bilden, siehe Gleichung (2-15). Bei dieser exothermen Reaktion wird soviel Wärme freigesetzt, dass es zu einer messbaren Druck- und Temperaturerhöhung kommt. Ausgehend von niedrigen Temperaturen kommt es somit zunächst zu einer Umsetzung der über Reaktionspfad A gebildeten

⁷ Ketone bestehen aus einer Carbonylgruppe, deren Kohlenstoffatom mit zwei beliebigen organischen Restgruppen verbunden ist. Die Carbonylgruppe selbst besteht aus einem Kohlenstoffatom, das mit einem doppelt gebundenen Sauerstoffatom verbunden ist.

⁸ Alkene (Trivialname: Olefine) haben im Gegensatz zu Alkanen mindestens eine Doppelbindung zwischen zwei Kohlenstoffatomen.

⁹ Vereinzelt auch Hydrogenperoxid genannt.

Hydroxylradikale. Diese Phase der Verbrennung wird als cool-flame oder auch low temperature combustion (LTC) bezeichnet, siehe Abbildung 7. Laut [118] S. 369 kann in der LTC bis zu 15% der gesamten chemischen Energie umgesetzt werden. Mit steigenden Temperaturen nimmt die Wärmefreisetzung jedoch wieder ab. Dadurch stagniert die Temperatur- und Druckzunahme, wie man Abbildung 7 entnehmen kann. Für dieses Verhalten werden unterschiedliche Ursachen genannt. Pöttker erläutert in [121] S. 16, dass ab bestimmten Temperaturen die gebildeten Alkylperoxy-Radikale (RO_2^\bullet) sofort wieder in ihre Ausgangsprodukte zerfallen, da die Reaktionsrate der Rück-Reaktion entsprechend höher ist, vgl. Gleichung (2-2). Somit kann Reaktionspfad A nicht länger durchlaufen werden und es werden daher auch keine Hydroxylradikale mehr gebildet. Laut Tanaka et al. nimmt die Reaktionsrate von Reaktion (2-11) in Pfad B mit steigender Temperatur so stark zu, dass sie im Vergleich zur Bildung der Alkylperoxy-Radikale über Reaktion (2-2) dominiert, siehe [149] S. 221. Reaktionspfad B kann jedoch bei Temperaturen unter 800 K nur bis zur Wasserstoffperoxidbildung (2-12) und (2-13) durchlaufen werden, weshalb letztlich keine Hydroxylradikale (OH^\bullet) zwischen 600 K und 800 K gebildet werden. Erst oberhalb von 800 K reagiert das Wasserstoffperoxid über Reaktion (2-14) weiter und es kommt zu einer erneuten Wärmefreisetzung.

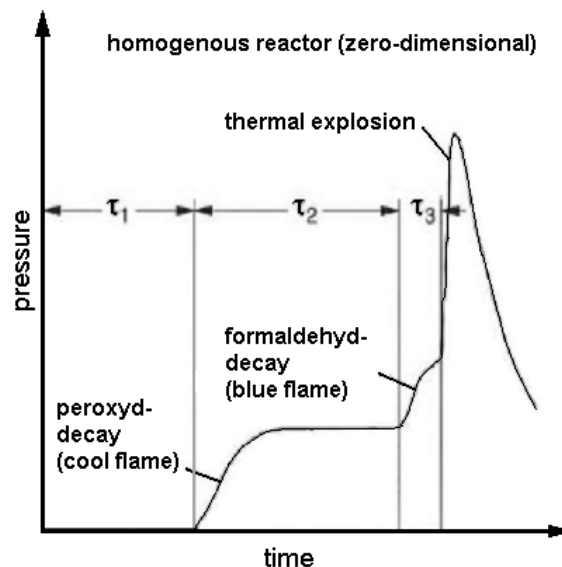


Abbildung 7: Darstellung der verschiedenen Phasen während des Zündverzugs [118] S. 368 (Nach [142] S.134)

Mit steigenden Temperaturen wird der Brennstoff dann zunehmend über einen anderen Weg zerlegt. Allgemein formuliert wird ein Alkan¹⁰ ($\text{C}_n\text{H}_{2n+2}$) wie beispielsweise n-Heptan mit Hilfe eines Radikals (X^\bullet) in ein Alkylradikal ($\text{C}_n\text{H}_{2n+1}$) zerlegt, siehe Gleichung (2-16). Die dafür erforderlichen Radikale¹¹ stammen zunächst aus den bereits beschriebenen Niedertemperaturreaktionen.



¹⁰ Entspricht dem bisher betrachteten Ausgangsprodukt RH.

¹¹ Laut [160] S. 255: H^\bullet , O^\bullet , OH^\bullet , HO_2^\bullet und CH^\bullet -Radikale.

Oberhalb von ungefähr 1100 K - 1200 K, siehe [134] S. 21 und [160] S. 250 f, werden die Radikale zunehmend über folgende kettenverzweigende Reaktion gebildet:



Das bei Reaktion (2-16) entstandene Alkylradikal zerfällt in kleineres Alkylradikal unter Abspaltung eines Alkens (C_iH_{2i}), siehe Gleichung (2-18). Diesen Vorgang bezeichnet man auch als β -Zerfall, siehe [160] S. 255 und [35] S. 152. Die Anzahl der im Alkylradikal verbleibenden Kohlenstoffatome ist dabei variabel, wobei Alkylradikale mit mehr als zwei Kohlenstoffatomen ($n > 2$) solange weiterzerfallen, bis überwiegend Methyl- ($\text{CH}_3\cdot$) und Ethylradikale ($\text{C}_2\text{H}_5\cdot$) vorliegen, siehe [134] S. 21.



Die dabei gebildeten Alkene werden gemeinsam mit denen aus Reaktionspfad B, vgl. Abbildung 3, über Radikale weiter zersetzt. Die Methyl- und Ethylradikale werden unter Bildung von Formaldehyd (CH_2O) zerlegt, siehe [134] S. 21. In Folge führt dies zur Bildung von CO, wobei genügend Wärme entsteht um die Brennraumtemperatur und den Druck weiter zu erhöhen. Dieser Abschnitt wird auch als blue-flame bezeichnet, siehe Abbildung 7. Ausreichend Sauerstoff vorausgesetzt, aus dem über Gleichung (2-17) OH-Radikale gebildet werden, wird das gebildete Kohlenstoffmonoxid schließlich in einer stark exothermen Reaktion zu CO_2 oxidieren, siehe Gleichung (2-19). Dieser in Abbildung 7 als thermische Explosion bezeichnete Abschnitt ist die eigentliche Hochtemperaturverbrennung. Sie beginnt ungefähr ab 1100 K, siehe [134] S. 22, womit sich auch erhöhte CO Emissionen bei zu niedriger Brennraumtemperatur (lokal bei Flammenerlöschung oder global bei homogener Betriebsstrategie) erklären lassen, vgl. [121] S. 17.



Mit den bisher beschriebenen Abläufen lassen sich die in Abbildung 8 dargestellten Zündverzugszeiten von n-Heptan nachvollziehen.

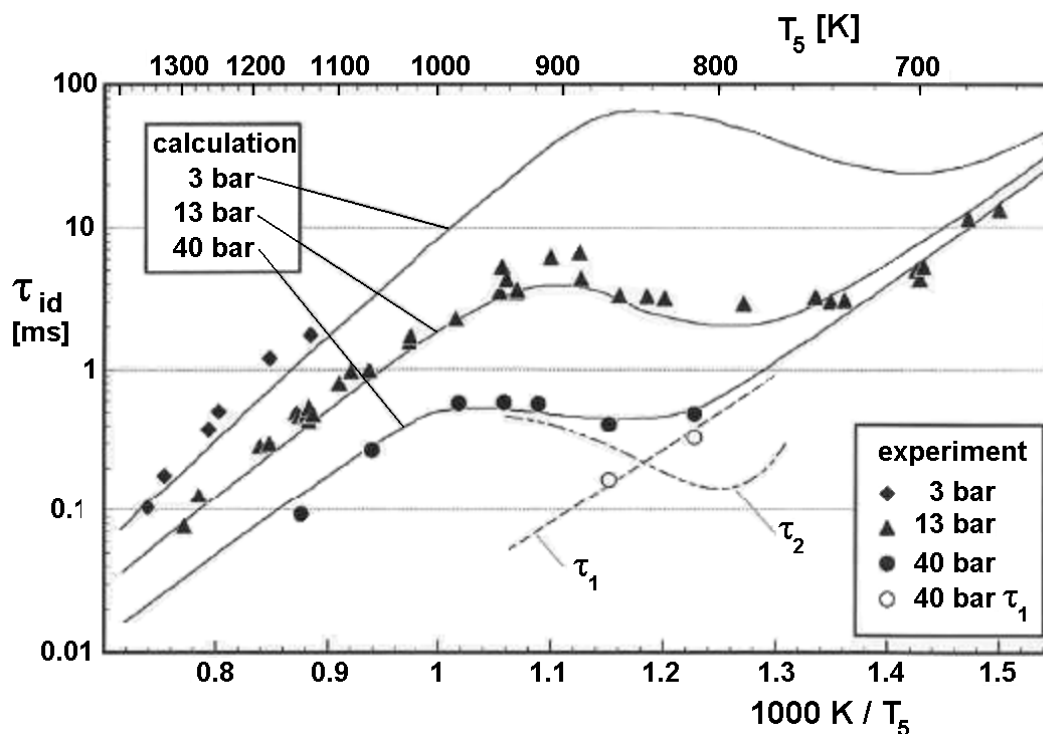


Abbildung 8: Zündverzugszeiten für n-Heptan bei unterschiedlichen Drücken [118] S. 374/Abb. 4.3-6

Bei einem Druck von 40 bar ist der Zündverzug bei einer Starttemperatur zwischen 800 K (1,2) und 1000 K (1) relativ konstant. Bei niedrigeren Drücken nimmt er in bestimmten Temperaturbereichen mit steigenden Starttemperaturen sogar zu, weil bei diesen Startbedingungen zwar der Reaktionspfad A nicht mehr durchlaufen werden kann, es aber noch zu kalt ist, damit Reaktion (2-14) abläuft. Dieses Verhalten des Zündverzugs wird auch als NTC (Negative Temperature Coefficient) bezeichnet.

Die Selbstzündeigenschaften unterschiedlicher Kraftstoffe können anhand ihres Aufbaus abgeschätzt werden, siehe [121] S. 18. Bei Kohlenwasserstoffmolekülen unterscheidet man zwischen primären, sekundären und tertiären Wasserstoffatomen. Von primären Wasserstoffatomen spricht man, wenn sie mit einem Kohlenstoffatom verbunden sind, das wiederum nur mit einem weiteren Kohlenstoffatom verbunden ist. Sekundäre Wasserstoffatome sind mit Kohlenstoffatomen verbunden, die mit zwei weiteren Kohlenstoffatomen Bindungen haben und tertiären Wasserstoffatome sind an C-Atomen mit drei weiteren C-Atomen als Bindungspartnern verbunden. Pöttker erklärt, dass der β -Zerfall bevorzugt an sekundären und tertiären Wasserstoffatomen stattfindet¹², siehe [121] S. 18. Wie aus Abbildung 9 hervorgeht, besteht iso-Oktan überwiegend aus primären Wasserstoffatomen, während n-Heptan eine große Anzahl an sekundären Wasserstoffatomen besitzt. Somit erklärt sich das deutlich bessere Selbstzündverhalten von n-Heptan gegenüber iso-Oktan.

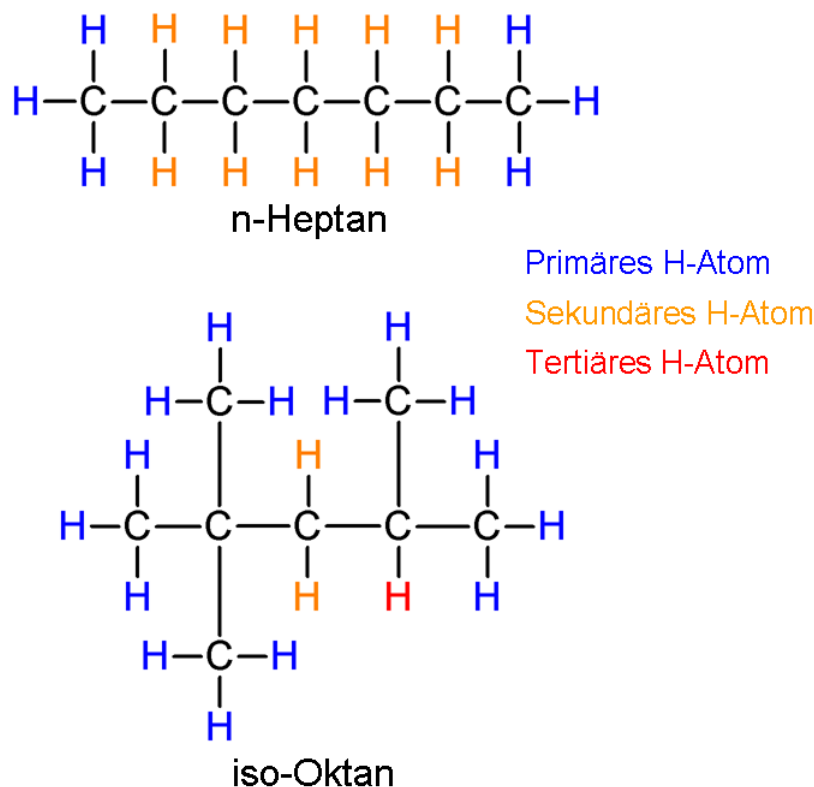


Abbildung 9: Vergleich zwischen n-Heptan und iso-Oktan (2,2,4-Trimethylpentan) hinsichtlich der Anbindung der Wasserstoffatome. Darstellung angelehnt an [121] S. 18

¹² Dies hängt mit der Bindungsenergie der Wasserstoffatome zusammen für die gilt: $E_{\text{Primäres H-Atom}} > E_{\text{Sekundäres H-Atom}} > E_{\text{Tertiäres H-Atom}}$, siehe [121] S. 18.

2.3 Schadstoffentstehung und Abgasnachbehandlung

Bei jedem realen Verbrennungsprozess entstehen neben den eigentlichen Verbrennungsprodukten Kohlenstoffdioxid (CO₂) und Wasser (H₂O) auch unerwünschte Nebenprodukte. Die Emissionen von bestimmten Nebenprodukten sind durch den Gesetzgeber aufgrund ihrer gesundheits- und umweltschädlichen Wirkung limitiert. Im Einzelnen sind dies:

- Kohlenstoffmonoxid
- Kohlenwasserstoffe
- Stickoxide
- Partikel

Kohlenstoffmonoxid (CO) entsteht entweder durch Sauerstoffmangel oder durch zu niedrige Temperaturen während der Verbrennung, siehe [103] S.120 f. Es lagert sich ans Hämoglobin im menschlichen Blut an und behindert so den Sauerstofftransport von der Lunge in die einzelnen Organe, siehe [76] S. 594. Dies führt laut [74] bei geringeren Dosen zu Leistungseinschränkungen, Herz-Kreislauf-Störungen und Stoffwechselstörungen. Bei Schwangeren ist das Risiko einer Hirnschädigung des Säuglings erhöht, bei größeren CO-Mengen im Blut steigt auch das Risiko einer Totgeburt. Das Einatmen von sehr hohen Konzentrationen, beispielsweise 40000 ppm in zwei Minuten oder 1500 ppm in einer Stunde, führt zum Erstickungstod [74]. Beim konventionellen Dieselmotor entstehen CO-Emissionen hauptsächlich bei hohen Lasten, aufgrund von lokalem Sauerstoffmangel durch den Betrieb nahe der Rauchgrenze, vgl. [107] S. 493. Bei homogen betriebenen Dieselmotoren können je nach Applikation aufgrund lokal niedriger Brennraumtemperaturen hohe CO Emissionen auftreten, siehe [64] S. 98.

Kohlenwasserstoffemissionen (HC-Emissionen) treten auf, wenn aufgrund zu niedriger Temperaturen nicht alle zur vollständigen Umsetzung notwendigen chemischen Reaktionen durchlaufen werden¹³. Dabei handelt es sich meist um lokale Effekte mit unterschiedlichen Entstehungsmechanismen abhängig vom Brennverfahren. Bei Ottomotoren kann es bei Annäherung der Flamme an die Brennraumwand zu einem Erlöschen der Flamme kommen (Flammenlöschung), siehe [45] S. 150. Bei konventionellen Diesalbrennverfahren sind die Temperaturen während des Kaltstarts so niedrig, dass die Kraftstoffverdampfung deutlich verzögert oder unvollständig stattfindet, siehe [107] S. 495. Bei Teillastbetrieb gibt es magere Bereiche am Rande des Kraftstoffstrahls, in denen es nicht zur Zündung kommt [103] S.124. Bei DI-Motoren ist es außerdem möglich, dass sich Kohlenwasserstoffe auf dem Ölfilm an der Brennraumwand anlagern, siehe [103] S.125, und erst zu einem späteren Zeitpunkt bei bereits abgefallenen Brennraumtemperaturen wieder freigesetzt werden. Ebenso nennen Merker et al. Kraftstoffverdampfung aus dem Sackloch der Einspritzdüse sowie ungewollte Nacheinspritzungen als mögliche Emissionsursachen. Bei gemischansaugenden Motoren, bzw. Motoren mit sehr frühem Einspritzbeginn, wird

¹³ Auch Sauerstoffmangel wird als Ursache für HC-Emissionen genannt. Von Merker et al. werden beispielsweise die fetten Bereiche im Kern des Einspritzstrahls als Quelle für HC-Emissionen aufgezählt, siehe [103] S. 124. Im weiteren Verlauf des Arbeitsspiels werden sich diese Bereiche jedoch zunehmend mit Luft vermischen und sich somit dem globalen Luftverhältnis annähern. Sollte es dann nicht mehr zu einer Umsetzung kommen, ist dies nun Folge zu niedriger Temperaturen, da der Sauerstoff zumindest für die erste Oxidationsstufe bis CO ausreicht.

Kraftstoff gemeinsam mit Luft während der Kompression in den Quetschspalt gedrückt. Dieses Gemisch wird erst während der Expansion wieder freigegeben und kann dann unter Umständen nicht mehr vollkommen umgesetzt werden, siehe [45] S. 150.

Unter dem Begriff Stickoxide (NO_x) werden alle Verbindungen aus Stickstoff und Sauerstoff zusammengefasst. Bei der Verbrennung im Motor entsteht zunächst Stickstoffmonoxid (NO), durch die Reaktion von elementarem Luftstickstoff (N) mit elementarem Sauerstoff (O), siehe [83] S.11 und [107] S. 490. NO ist ein farbloses Gas, welches im Abgassystem oder in der Atmosphäre zu Stickstoffdioxid (NO_2) oxidiert [154]. NO_2 ist ein braunrotes, im Vergleich zu NO wesentlich giftigeres Gas [154]. Je nach Einwirkungsdauer und Konzentration kommt es zunächst zu Atemnot und Husten, in schwereren Fällen zu Lungenödemen bzw. einer Minderung der Lungenfunktion [154]. In Erdnähe bildet sich aus Stickstoffdioxid und Sauerstoff unter dem Einfluss von UV-Strahlung Ozon [58], [154]. Dieses führt beim Einatmen zu Reizungen der Atemwege, Kopfschmerzen und Mattigkeit [58]. Stickstoffdioxid bildet gemeinsam mit Wasser Salpetersäure [154]. Diese gelangt in Form von saurem Regen in den Boden und führt dort zu einer Absenkung des pH-Werts und schädigt somit die Vegetation, vgl. [107] S. 469 f, [154].

Man unterscheidet bei der NO_x -Bildung folgende Entstehungsmechanismen:

- Thermische NO (Zeldovic-NO)
- Promptes NO (Fenimore-NO)
- Lachgas NO
- Konversion von Brennstoff- N_2

Unter den in Verbrennungsmotoren vorherrschenden Randbedingungen entsteht ein Großteil (ca. 90%) des Stickoxids über den Zeldovic-Mechanismus, siehe [103] S.143. Der restliche Anteil entsteht als promptes NO. Der Reaktionsweg über die Lachgasbildung (N_2O) erfordert ein mageres Gemisch und eine Kombination aus hohem Druck und niedriger Temperatur, da bei höheren Temperaturen der Zeldovic-Mechanismus dominiert, siehe [76] S. 606 f. Diese Randbedingungen sind laut Joos in Gasturbinenbrennkammern gegeben, im Allgemeinen aber nicht in Verbrennungsmotoren. Da in flüssigen Kraftstoffen kaum Stickstoff gebunden ist, tritt in Verbrennungsmotoren auch die Stickoxidbildung über Konversion von Brennstoff- N_2 nicht auf, siehe [66] S. 3, anders als bei der Verbrennung von festen Brennstoffen wie Kohle, siehe [160] S. 266.

Der von Zeldovic erstmal beschriebene Entstehungsmechanismus für thermisches NO besteht aus den folgenden Reaktionen, siehe [160] S. 260:



Die erste Reaktion ist dabei die geschwindigkeitsbestimmende Reaktion, da sie die höchste Aktivierungsenergie hat. Hinsichtlich der Grenztemperatur, oberhalb der die Stickoxidbildung einsetzt, sind in der Literatur unterschiedliche Werte angegeben. 1700 K [83] S. 11, 1800 K [144] S. 30, 2000 K [121] S. 6, 2200 K [107] S. 491 und 2300 K [66] S. 3. Eine mögliche Erklärung dafür wäre, dass in den einzelnen Quellen unterschiedliche Grenz-Reaktionsraten (mol/s) definiert wurden. Andererseits wurden von Heider und Merker et al. jeweils mehrere Gleichungen bzw. unterschiedliche

Reaktionskonstanten¹⁴ zur Berechnung des Geschwindigkeitskoeffizienten der ersten Reaktion vorgestellt, siehe [66] S. 34 ff und [103] S. 136 f. Abhängig vom gewählten Ansatz zur Berechnung der Geschwindigkeitskonstante und der Parametrierung der Reaktionskonstanten, wird somit eine festgelegte Grenz-Reaktionsrate bei unterschiedlichen Temperaturen überschritten. Neben einer hohen Temperatur müssen zur Stickoxidbildung ausreichend Stickstoff, Sauerstoff und Zeit vorhanden sein. All diese Bedingungen sind für homogene Brennverfahren bei einem globalen Luftverhältnis von ca. 1,1 am besten erfüllt und folglich sind die Rohemissionen unter diesen Randbedingungen am höchsten. Bei inhomogenen Brennverfahren ist das Emissionsmaximum zu einem etwas höheren globalen Luftverhältnis verschoben, vgl. [107] S. 491.

Während das thermische NO nur unter mageren und stöchiometrischen Bedingungen auftritt, ist die Bildung von prompten NO an das Vorhandensein von CH-Radikalen gekoppelt. Diese entstehen durch Zerfall von Ethin¹⁵ (C_2H_2), welches bevorzugt unter fetten Bedingungen auftritt. Die Aktivierungsenergie liegt bei prompten NO deutlich niedriger, so dass bereits Temperaturen von ca. 1000 K ausreichend sind, siehe [103] S. 142. Bei konventionellen Dieselmotoren beträgt der Anteil von prompten NO am insgesamt entstehenden NO ungefähr 5 bis 10%, [103] S.143.

Als Partikel werden alle festen und flüssigen Bestandteile des Abgasmassenstroms bezeichnet, die sich auf einem festgelegten Filter abscheiden, wobei zwischen Partikeln unterschiedlicher Durchmesser unterschieden wird, siehe [15] Kapitel 2. Die Partikel im dieselmotorischen Abgas bestehen weitgehend aus Ruß und organischen Verbindungen, siehe Abbildung 10, weshalb auch der Begriff Rußemissionen stellvertretend für Partikelemissionen verwendet wird.

Die Rußentstehung ist noch nicht in allen Einzelheiten erforscht. Bei der am häufigsten zitierten Entstehungstheorie geht man davon aus, dass Ruß durch Wachstum von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffverbindungen (PAK) während der Verbrennung unter lokalem Sauerstoffmangel entsteht, siehe [103] S. 131 ff, [107] S. 492 f, [160] S. 286 ff. Bei Verbrennung unter lokal fetten Bedingungen entsteht zunächst Ethin (C_2H_2). Dieses reagiert mit CH oder CH_2 zu C_3H_3 . Aus zwei C_3H_3 -Molekülen bildet sich ein kettenförmiges C_6H_6 -Molekül woraus sich durch Umlagerung ein erster Benzol-Ring (C_6H_6) bildet. Durch H-Abstraktion und anschließende Anlagerung von C_2H_2 , C_2H oder CH wird der Ring erweitert, siehe Abbildung 11. Zwischendurch finden immer wieder Restrukturierungen statt, wodurch sich eine immer größere Ringstruktur ergibt. Sobald zwei oder mehr Benzolringe über eine gemeinsame Bindung anelliert sind spricht man von PAK. Diese gehen ab einer gewissen Größe in die feste Phase über und bilden so Rußpartikel.

¹⁴ Mit Reaktionskonstanten sind der präexponentielle Faktor und die Aktivierungsenergie gemeint, vgl. Formel (4-19).

¹⁵ Trivialname: Acetylen

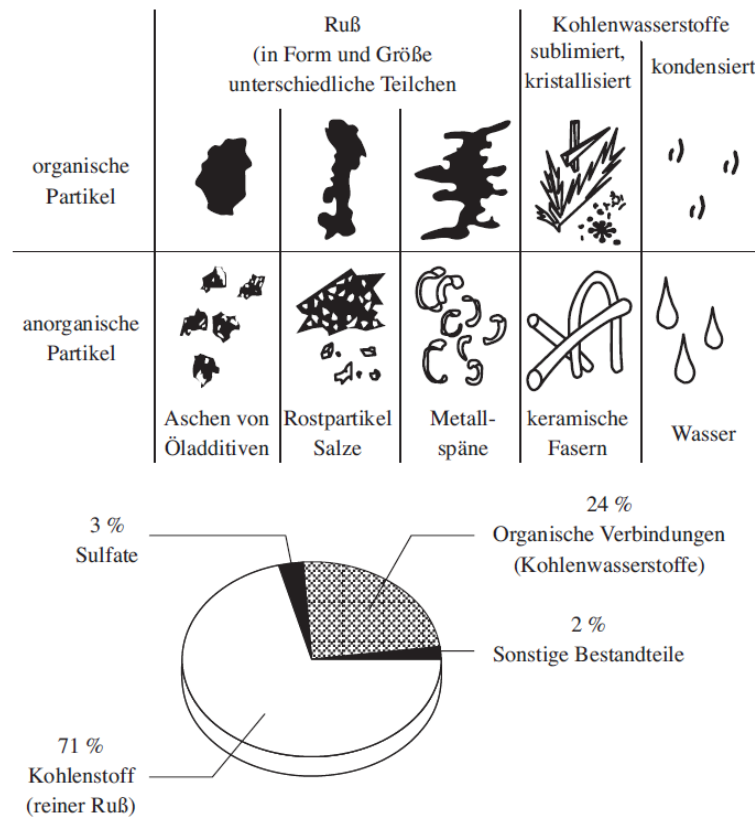


Abbildung 10: Zusammensetzung der Partikel im Abgas eines Dieselmotors
[103] S. 130

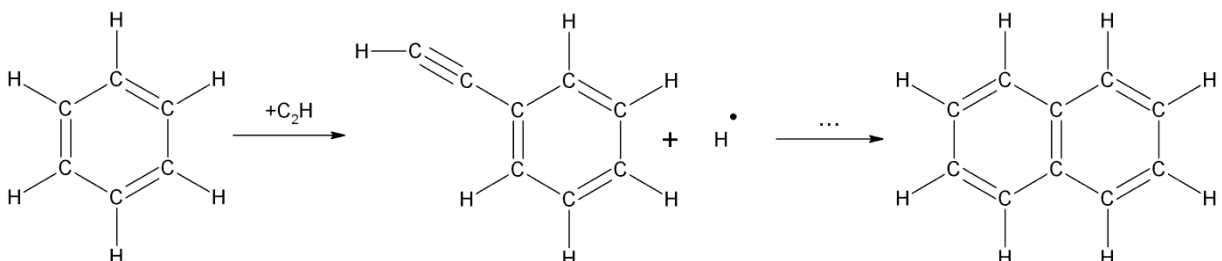


Abbildung 11: Wachstum von Benzol durch Anlagerung und Restrukturierung. Darstellung angelehnt an [103] S. 132

Rußbildung tritt bei lokal fetter Verbrennung mit $\lambda < 0,6$ und Temperaturen oberhalb von ca. 1500 K auf, siehe [63] S. 14. Bei Vorhandensein von Ruß findet parallel zur Rußbildung auch eine Rußoxidation statt, sofern ausreichend Sauerstoff vorhanden ist. Die Partikel-Rohemissionen sind somit das Ergebnis einer zunächst starken Rußbildung und einer anschließenden, unvollständigen Nachoxidation innerhalb des Brennraums. Merker et al. nennen als Temperaturfenster für die Entstehung von Rußemissionen 1500 K bis 1900 K, siehe [103] S. 133. Bedingt durch die angelagerten PAK hat Ruß eine kanzerogene Wirkung [76] S. 595 und ist daher ein limitierter Abgasbestandteil.

Um die Rußbildung zu vermeiden, bzw. die Nachoxidation zu begünstigen, muss die Durchmischung von Kraftstoff und Luft verbessert werden. Dies kann durch eine Erhöhung des Einspritzdrucks oder des Ladungsdralls im Brennraum erreicht werden. Durch diese Maßnahmen verringert sich die Anzahl an lokal fetten Zonen im Brennraum, was niedrigere Rußemissionen zur Folge hat. Gleichzeitig steigen jedoch die Stickoxidemissionen, siehe [83] S. 89 f, S. 143/Abb. 6.9, S. 149/Abb.6.2, [107] S. 497 f. Umgekehrt verhält es sich bei hohen Restgasgehalten. Wenn Frisch-

Luft durch Restgas substituiert wird, führt dies allgemein zu geringfügig niedrigeren Brennraten und höheren Brenndauern. Des Weiteren ist die spezifische Wärmekapazität von Restgas höher als die von Frischluft. Beide Effekte führen zu niedrigeren Spitzentemperaturen im Brennraum und somit zu weniger Stickoxidbildung. Gleichzeitig nehmen jedoch die Rußemissionen zu. Diesen Zielkonflikt, dass eine Verringerung der Stickoxide eine Erhöhung der Rußemissionen zur Folge hat und umgekehrt, nennt man Ruß-NO_x-Schere oder Ruß-NO_x Trade-off. In Abbildung 12 ist dieser Zielkonflikt grafisch dargestellt. Werden die bisher genannten Maßnahmen (Verbesserung der Kraftstoff-Luft Durchmischung, Abgasrückführung) einzeln angewendet, kann der Betriebspunkt nur entlang der durchgezogenen Linie verschoben werden. Kombiniert man die beiden Maßnahmen führt dies zu einer gleichzeitigen Verringerung von Ruß- und Stickoxidemissionen, was durch die gestrichelte Linie angedeutet wird.

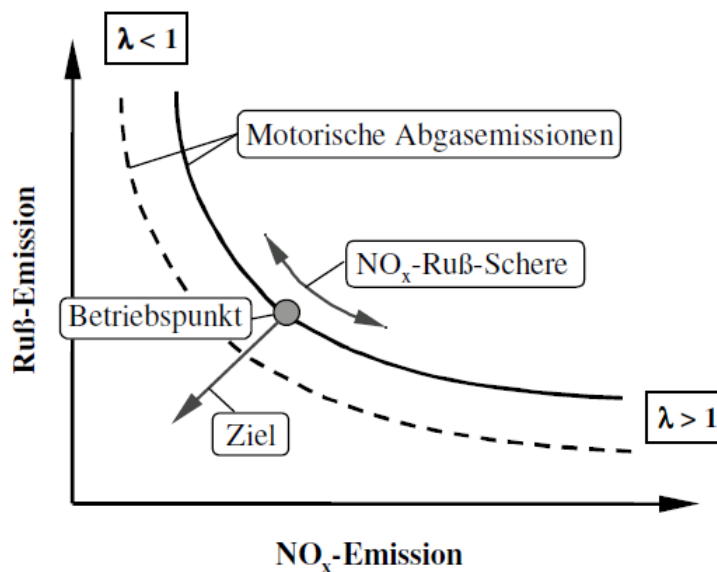


Abbildung 12: Ruß-NO_x Zielkonflikt [114] S. 7

Aufgrund der niedrigen Rohemissionen von Dieselmotoren, wurde bis zur letzten Jahrtausendwende weitgehend auf komplexere Abgasnachbehandlungssysteme verzichtet. Mitte der achtziger Jahre gab es bereits erste Feldversuche mit Dieselpartikelfiltern (DPF) im Pkw-Bereich [136]. Kalifornien hatte zu diesem Zeitpunkt die strengsten Abgasvorschriften für Diesel-Pkw. Zur Erfüllung der Vorschriften, wurden dort im Modelljahr 1985 alle Mercedes-Benz Pkw mit Turbodieselmotor als Kleinserie mit einem Partikelfilter ausgestattet, siehe [2] S. 340. Schwierigkeiten bereitete unter anderem die Verstopfung des Filters aufgrund des häufigen Leerlauf- und Teillastbetriebs in den USA¹⁶. Durch eine verbesserte Lage der Einspritzdüse innerhalb der Vorkammer konnten die Rohemissionen in den folgenden Jahren deutlich gesenkt werden. Aufgrund dieser Fortschritte entschied man sich für die Einführung eines Dieseloxydationskatalysators (DOC) und verzichtete auf eine flächendeckende Einführung eines Partikelfilters im Pkw-Bereich [51] S. 24 f., [52] S. 16 ff. Der 1993 von Mercedes-Benz vorgestellte OM604 besaß erstmalig einen Zylinderkopf mit vier Ventilen, was eine zentrale Anordnung der Vorkammer ermöglichte [53] S. 392 ff. In die Vorkammer wurde außerdem zur besseren

¹⁶ Die Applikation einer Nacheinspritzung war mit den damaligen Einspritzsystemen nicht möglich.

Gemischtaufbereitung ein Kugelstift verbaut. In Kombination mit Abgasrückführung und einem DOC konnten somit die damaligen Schadstoffgrenzwerte eingehalten werden. Mit dem Aufkommen der DI-Motoren entschärfte sich die Emissionsproblematik weiter [165] S. 48 f, so dass im Pkw-Bereich bis Ende der 90er Jahre lediglich DOCs zur Abgasnachbehandlung verbaut wurden, siehe beispielsweise [115] S. 765.

Im Nutzfahrzeugbereich wurden zwischen Mitte der achtziger und Anfang der neunziger Jahre ebenfalls Partikelfilter in Kleinserien erprobt, siehe [38], [96], [97] S. 234, [141]. Auf einen Einsatz in Großserien konnte jedoch letztlich ebenfalls verzichtet werden, siehe [109] S. 193, [43] S. 384, da sich im Nutzfahrzeugbereich DI-Motoren mit ihrem Potenzial zur Verringerung der Schadstoffemissionen früher verbreiteten. Wichtige Eckpunkte in der Entwicklung von schadstoffarmen Nutzfahrzeugmotoren waren steigende Einspritzdrücke, Abgasrückführung, Ladeluftkühlung, Brennräume mit vier Ventilen, die eine zentrale Injektorlage ermöglichen und die Einführung schwefelarmer Kraftstoffe, wodurch die Funktionsweise des DOC verbessert wurde, vgl. [43].

Der DOC war somit das erste Abgasnachbehandlungssystem für Dieselmotoren, das sowohl in Pkw, als auch im Nfz, in größeren Stückzahlen verbaut wurde. Der Aufbau kann der Grundlagenliteratur entnommen werden, beispielsweise [107] S. 504 ff. Innerhalb des Oxidationskatalysators werden nicht nur unverbrannte Kohlenwasserstoffe umgesetzt, sondern abhängig von der Katalysatortemperatur werden auch Kohlenstoffmonoxid und in geringen Mengen sogar im Abgas enthaltene Partikel oxidiert [165] S. 52, [12] S. XV. Eine weitere Eigenschaft, die sowohl zur Unterstützung des Rußabbrands in Partikelfiltern, als auch im Rahmen Abgasnachbehandlung von Stickoxiden genutzt wird, ist eine Veränderung des NO_2 zu NO Verhältnisses, vgl. [107] S. 504. Dieser Aspekt wird weiter unten aufgegriffen.

2000 stellte Peugeot die neuentwickelte Baureihe 607 vor. Diese war als erste Volumenbaureihe im Pkw-Bereich serienmäßig mit einem Dieselpartikelfilter ausgestattet [139] S. 186. In den folgenden Jahren zogen fast alle Pkw-Hersteller sukzessive nach und entwickelten fahrzeugspezifische Filter, die inzwischen zur Serienausstattung gehören. Mit diesen Systemen können Rückhaltegrade von bis zu 95%, bezogen auf die Gesamtpartikelemissionen (TPM)¹⁷, erzielt werden, siehe [139] S. 187, [107] S. 506. Allerdings müssen sie in regelmäßigen Zeitabständen freigebrannt werden, da mit steigender Beladung der Abgasgegendruck zunimmt. Dabei unterscheidet man zwei Abbrandmechanismen:

- Rußoxidation mit Hilfe von O_2 (Thermische Regeneration)
- Rußoxidation mit Hilfe von NO_2 (CRT)

Zur Regenerierung mit Hilfe von Sauerstoff sind Temperaturen oberhalb von 875 K notwendig, die lediglich in Nähe des Nennleistungspunktes auftreten, siehe [107] S. 507. In allen anderen Betriebspunkten wird daher eine späte Nacheinspritzung appliziert, die im DOC umgesetzt wird und so die Abgastemperatur erhöht, siehe [139] S. 187, [107] S. 505. Da sich das Abgas umso stärker abkühlt, je länger die

¹⁷ Die total particle mass (TPM) besteht aus allen Partikelkomponenten, inklusive der wasserlöslichen Fraktion (WSF - water soluble fraction) die auch die Sulfate bzw. die daraus gebildete Schwefelsäure enthält, sowie der löslichen, organischen Anteile (SOF - soluble organic fraction), vgl. [Abbildung 10](#), [15] S. 23 und [110] S. 19ff. Wenn noch höhere Abscheidungsgrade veröffentlicht werden (>98%), ist die Bezugsmasse oftmals die feste Partikelfraktion, vgl. [139] S. 187f.

Abgasstrecke zwischen Motor und Partikelfilter ist, muss die Kraftstoffmenge der späten Nacheinspritzung entsprechend angepasst werden. Dies kann zu Problemen aufgrund von Ölverdünnung durch Kraftstoffwandauftrag führen, siehe [48] S. 554. Daher versucht man Partikelfilter möglichst motornah zu verbauen. Um diese Problematik zu entschärfen, wurden Systeme mit externer Kraftstoffeinspritzung direkt vor dem Partikelfilter untersucht, siehe [55], [67], [131] und bis zur Serienreife weiterentwickelt, siehe [48] S.554. Sie ermöglichen zusätzliche Freiheiten bei der Positionierung des Partikelfilters und senken außerdem den Energiebedarf zur Regeneration, da die Abkühlung in der Abgasstrecke vermieden wird. In den Anfangsjahren waren auch Additivsysteme verbreitet, bei denen dem Abgas bzw. dem Kraftstoff im Fahrzeug ein Zusatzstoff (Meist Cer-¹⁸ oder Eisenverbindungen) beigemischt wurde, siehe [38] S. 134, [139]. Dadurch sinkt die zum Rußabbrand mit Sauerstoff erforderliche Temperatur auf ca. 675 K, vgl. [139] S. 188. Bei durchschnittlichem Betrieb kann mit fünf Liter Additiv eine Strecke von ca. 100000 km zurückgelegt werden, ehe der Vorratstank im Rahmen eines Kundendienstes wieder aufgefüllt werden muss [139] S.188 f. Letztlich existiert jedoch bei allen bisher beschriebenen Ausführungsformen des Partikelfilters das Problem, dass der Kraftstoffverbrauch bei der Regeneration zunimmt.

Anders gestaltet sich die Situation bei der Rußoxidation über NO₂. Der Rußabbrand mit Hilfe von NO₂ kann bereits bei Temperaturen oberhalb von ca. 525 K, siehe [107] S. 508 und [49] S. 355, über folgende Reaktion erfolgen:



Der vor dem Partikelfilter im Abgasstrang angeordnete DOC oxidiert das im Abgas enthaltene NO zu NO₂. Laut [49] S. 355 sollte für eine optimale Regeneration das NO₂/Ruß Massenverhältnis ungefähr 8/1 betragen, was nur durch die Oxidation von NO zu NO₂ realisierbar ist. Bei Betrachtung des Gesamtsystems zeigt sich, dass die zur Regeneration erforderlichen Abgastemperaturen bereits bei erhöhter Teillast erreicht werden. Einzig bei längerem Teillastbetrieb (Stadtverkehr) sind somit zusätzliche Nacheinspritzungen erforderlich, um eine thermische Regeneration anzustoßen. Da die Rußoxidation mit Hilfe von Stickoxid somit über weite Teile des Betriebskennfelds möglich ist, werden Abgasnachbehandlungssysteme die überwiegend mit diesem Abbrandmechanismus arbeiten auch CRT-Systeme (Continuously Regenerating Trap) genannt. In aktuellen Serien-Pkw kommen meist Systeme zum Einsatz, die den Partikelfilter sowohl über Sauerstoff, als auch mit Hilfe von Stickstoffdioxid regenerieren¹⁹. Dabei wird von vielen Herstellern ein fahrzugspezifisches System entwickelt, welches an die vorhandenen Randbedingungen (Einspritzsystem, Packaging, Kosten) angepasst ist.

Abgasnachbehandlungssysteme zur Reduktion der NO_x-Emissionen wurden zuerst bei Ottomotoren mit Mager- oder Schichtbrennverfahren eingesetzt. Bei Dieselmotoren haben die Nutzfahrzeughersteller eine Vorreiterrolle gespielt, da man sich dort

¹⁸ Auch Cerium oder Zerk genannt.

¹⁹ Der Zusammenhang zwischen Strömungswiderstand und Beladung eines Partikelfilters ist auch von der Form der eingelagerten Rußschicht abhängig, siehe [107] S. 509. Deshalb ist es nicht ausreichend die Beladung lediglich messtechnisch über die Druckdifferenz am Partikelfilter zu erfassen, sondern sie wird zusätzlich über echtzeitfähige Modelle im Steuergerät abgeschätzt. Diese Modelle müssen auch den kontinuierlichen Rußabbrand abbilden können, weshalb dieser bei der Applikation von neuen Partikelfiltern berücksichtigt werden muss, vgl. [46] S. 883 f, [97] S. 246 f, [107] S. 509.

von Beginn an auf die innermotorische Reduktion der Rußemissionen konzentriert hatte und entsprechend die Stickoxide über ein Abgasnachbehandlungssystem verringern musste. Dabei kann zwischen folgenden zwei Systemen unterschieden werden:

- NO_x-Speicher-Katalysator (NSK, NSC)
- Selektive Katalytische Reduktion über Harnstoff (SCR)

Im NO_x-Speicher-Katalysator wird NO₂ an einem basischen Metalloxid (z. B. Bariumoxid) eingelagert. Die Aufnahmekapazität ist jedoch begrenzt, weshalb der Speicher-Katalysator in regelmäßigen Zeitabständen entleert werden muss. Dazu wird angefettet ($\lambda < 1$), um eine ausreichende Anzahl an Spezies (HC, CO) für die Reduktion des eingelagerten NO₂ zur Verfügung zu stellen [45] S. 169, [120] S. 214. Durch die Regenerationsphasen ergibt sich somit ein Verbrauchsnachteil. Ein weiteres Problem von NO_x-Speicher-Katalysatoren ist ihre Schwefelempfindlichkeit, welche auf der Sulfatbildung im Katalysator ($\text{SO}_3 \rightarrow \text{BaSO}_4$) beruht. Diese Verbindung ist wesentlich stabiler als das mit Stickstoff gebildete Bariumnitrat Ba(NO₂)₃ [150] S.44. Die zur Desorption der Sulfatverbindung notwendigen Temperaturen (>900 K) und Randbedingungen können im motorischen Betrieb durch deutliche Anfettung erreicht werden, siehe [120] S. 214, [150] S. 44, was jedoch den Kraftstoffverbrauch in Regionen mit schlechter Kraftstoffqualität zusätzlich verschlechtert.

Da bei Nutzfahrzeugen die Wirtschaftlichkeit im Betrieb eines der wichtigsten Kaufkriterien ist, wird dort häufig auf die selektive katalytische Reduktion (SCR) statt einem NO_x-Speicher-System zurückgegriffen. Bereits im Herbst 2001 einigten sich die europäischen Nutzfahrzeughersteller darauf, ein auf Harnstoff basierendes SCR-System zur Abgasnachbehandlung einzuführen, siehe [54] S. 633. Anfang 2005 wurden schließlich die ersten Seriennutzfahrzeuge vorgestellt [37], deren Motoren die Euro 4 Abgasnorm erfüllten, teilweise auch die aktuelle Euro 5 Norm. Vier der sechs wichtigsten europäischen Lkw-Produzenten führten in den darauffolgenden Jahren reine SCR-Systeme zu Abgasnachbehandlung ein, vgl. [148] Abb. 4.

Bei dem SCR-Verfahren wird Harnstoff (NH₂)₂CO in einem Katalysator zunächst in Ammoniak (NH₃) umgewandelt, welches im weiteren Verlauf die Stickoxide über folgende Reaktionen reduziert:



Eine detaillierte Beschreibung des Systemaufbaus kann der Standardliteratur entnommen werden, bspw. [107] S. 509 ff. Bei dem SCR-System muss zwar der Harnstoff als zusätzlicher Betriebsstoff im Fahrzeug mitgeführt werden, allerdings sind keine fetten Betriebsphasen wie bei einem NO_x-Speicherkatalysator notwendig, weshalb der Kraftstoffverbrauch etwas niedriger ist. Während der Kaltstartphase sind die Konversionsraten jedoch deutlich niedriger [150] S. 45 ff.

Im Pkw-Bereich zeichnete sich in den letzten Jahren ab, dass zur Einhaltung der strengen US-Abgasnorm Tier 2 Bin5 oder zur Erfüllung der nächsten Grenzwertstufe in Europa, der Euro 6 Norm, neben dem Einsatz eines Partikelfilters auch ein System zur Reduktion der Stickoxide verbaut werden muss. Dabei gibt es Fahrzeuge, die entweder nur mit einem NO_x-Speicherkatalysator oder einem SCR-System ausgestattet sind, vgl. [137] und [44], oder auch kombinierte Systeme aus motornahem NO_x-Speicher-Katalysator und nachgeschaltetem SCR-System [25]. Dabei befindet sich der NSK vor dem Dieselpartikelfilter in einem gemeinsamen Gehäuse.

2.4 Homogene und teilhomogene Dieselverbrennung

2.4.1 Überblick

Im vorherigen Kapitel wurden sowohl die Schadstoffentstehung als auch momentan im Einsatz befindliche Abgasnachbehandlungssysteme vorgestellt. Diese führen zu einem Anstieg der Anschaffungskosten, beispielsweise bei einem SCR-System für Nutzfahrzeuge um 2500 € [22]. Durch den bei den meisten Systemen unvermeidbaren Kraftstoffmehrverbrauch steigen auch die Betriebskosten. Die damit ebenfalls steigenden CO₂-Emissionen führen zu einem Problem bei der Einhaltung zukünftiger Flottenverbrauchsziele. Daher wird weiter an Brennverfahren mit der Möglichkeit zur innermotorischen Schadstoffreduzierung geforscht.

Aus Abbildung 13 sind die innermotorischen Randbedingungen während der konventionellen Dieselverbrennung ersichtlich. Aufgrund der inneren Gemischbildung, die gleichzeitig während der Verbrennung im Motor stattfindet, sind lokal fette Zonen unvermeidbar, ebenso wie Gebiete mit nahezu stöchiometrischem Luftverhältnis und entsprechend hohen Temperaturen. Um die Ruß-NO_x Schere zu durchbrechen, muss die Gemischbildung daher bei Brennbeginn weitgehend abgeschlossen sein. Je nachdem ob die Gemischbildung im gesamten, oder nur in einem gewissen Bereich des Brennraums abgeschlossen ist, unterscheidet man zwischen homogener und teilhomogener Dieselverbrennung. Chemela et al. haben 2003 eine Klassifizierung dieser Verfahren vorgestellt [30], die bei den nachfolgenden Ausführungen übernommen wurde.

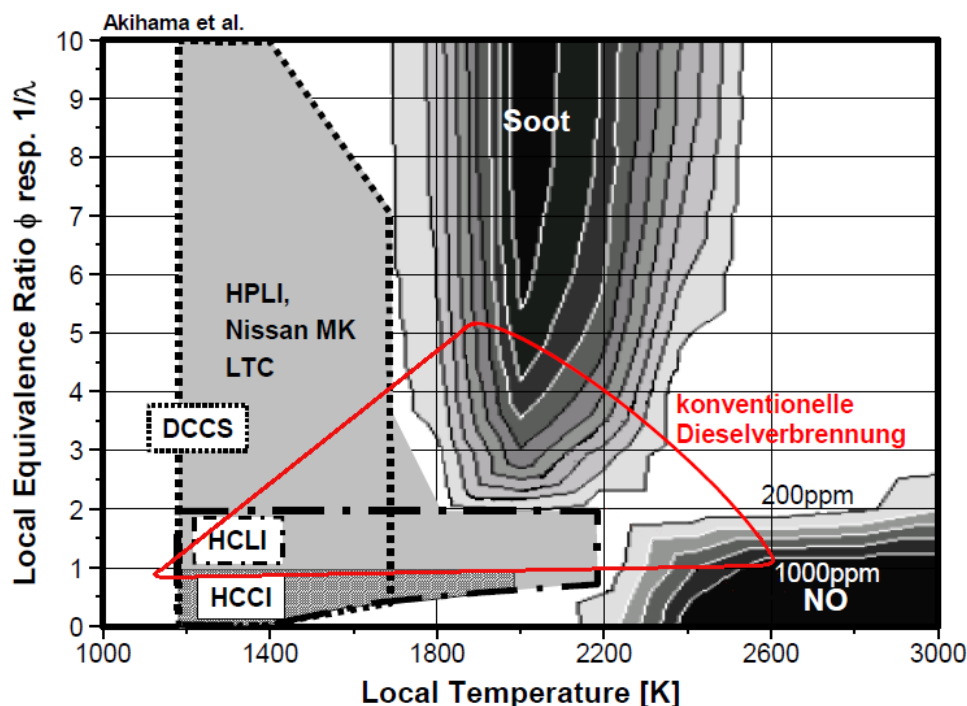


Abbildung 13: Innermotorische Randbedingungen während konventionellen, homogenen und teilhomogenen Dieselbrennverfahren [64] S. 2 (In Anlehnung an [5] S. 11)

In Abbildung 14 sind Einspritz- und Brennverläufe für die verschiedenen Verfahren exemplarisch dargestellt. In grau ist zudem eine konventionelle Dieselverbrennung dargestellt. Auffälligstes Unterscheidungsmerkmal der verschiedenen Brennverfahren ist der Einspritzzeitpunkt. Da es schwierig ist feste Kurbelwinkelbereiche zu definieren, wird in der Literatur vereinzelt auch die Schwerpunktlage der Vormischzeit (CPI - Centre of Premixed Interval) als Unterscheidungskriterium verwendet, siehe

[26] S. 144. Dabei ist die Vormischzeit der Zeitabschnitt zwischen den Maxima von Einspritzverlauf und Brennverlauf. Bei identischer Drehzahl und Last sind die Brenndauern mit Ausnahme des DCCS-Verfahrens bei allen anderen Verfahren kürzer und die maximale Brennrate größer, als bei der konventionellen Dieselerbrennung. Dies führt zu entsprechend hohen Druckgradienten. Schon aus Bauteilschutz- und Geräuschgründen sind die homogenen und teilhomogenen Brennverfahren daher auf die Teillast beschränkt [63] S. 154. Zusätzlich kommt hinzu, dass bei HCLI- oder HPLI-Betrieb die Zeit zur Bildung eines homogenen Gemisches bei höheren Lasten nicht ausreichend hoch ist. Ab mittlerer Last aufwärts muss daher ein konventionelles Brennverfahren appliziert werden.

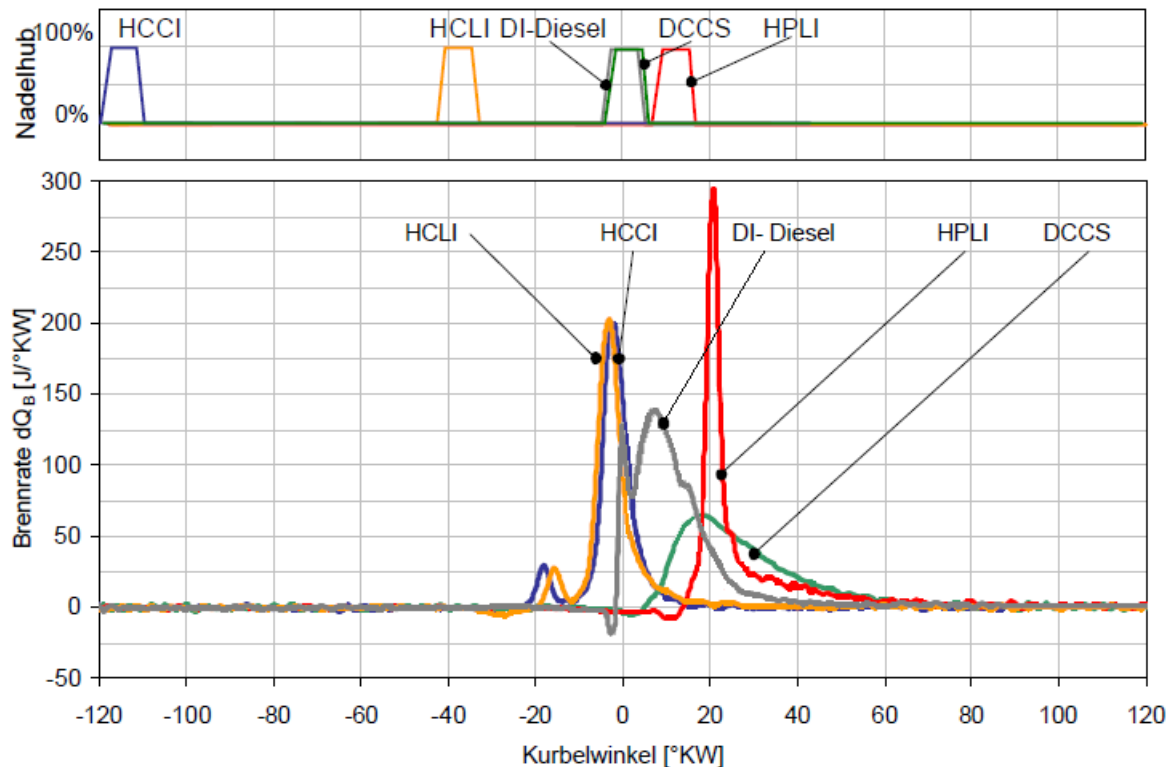


Abbildung 14: Schematische Darstellung von Einspritzzeitpunkt und Brennverlauf für unterschiedliche Brennverfahren [50] S. 278 (mit kleinen Änderungen)

2.4.2 HCCI-Verfahren

Das HCCI-Verfahren (Homogenous Charge Compression Ignition)²⁰ ist das klassische vollhomogene Brennverfahren. Es kann sowohl mit innerer als auch mit äußerer Gemischbildung realisiert werden. Bei der in Abbildung 14 dargestellten Variante, mit innerer Gemischbildung (Im weiteren DI-HCCI genannt²¹), findet die Kraftstoffeinspritzung kurz nach dem Gaswechsel-UT zu Beginn der Kompressionsphase statt.

²⁰ Leider wird in der Literatur der Begriff HCCI oftmals nicht differenziert genug verwendet und daher auch in Verbindung mit Benzinselbstzündung genannt, bspw. [113]. Bei diesem Brennverfahren wird jedoch ein Ottomotor selbstzündend betrieben. Korrekte Bezeichnungen eines solchen Brennverfahrens sind CAI (Controlled Auto Ignition), Gasoline-HCCI oder im deutschen Raum auch RZV (Raumzündverfahren). Des Weiteren wird HCCI manchmal auch als Oberbegriff für alle voll- und teilhomogenen Dieselerbrennverfahren verwendet.

²¹ In manchen Publikationen wird stattdessen die Bezeichnung early-PCCI (PCCI - Premixed Charge Compression Ignition) verwendet, siehe [26] S. 144, vgl. ²³ und ²⁴.

Somit hat der Kraftstoff vergleichsweise viel Zeit, um sich mit der Zylinderladung zu durchmischen. Aufgrund des frühen Einspritzzeitpunkts, werden vom Diesel-Luft Gemisch sehr niedrige Temperaturbereiche während der Kompression durchlaufen und es kommt zu einer ausgeprägten Niedertemperaturverbrennung.

Um ein Auftreffen des Kraftstoffs auf die Zylinderwand zu vermeiden muss der Strahlkegelwinkel und die Kolbengeometrie angepasst werden, siehe [50] S. 277. Sofern man keine Einspritzdüsen mit zwei Lochkreisen verwendet, führt dies zu Problemen bei der konventionellen Dieselverbrennung in der hohen Teil- und Vollast. Aufgrund der niedrigen Zylinderdrücke und Temperaturen während der Einspritzung sind der Strahlaufbruch und die Verdampfung deutlich erschwert. Untersuchungen ergaben, dass es trotz angepasster Geometrie häufig zu einer Benetzung der Brennraumwand mit Kraftstoff und in Folge zu Ölverdünnung und erhöhten HC-Emissionen kommt, siehe [63] S. 102. Laut Haas lässt sich dies auch nicht durch kleinere Einspritzwinkel und Mehrfacheinspritzungen vermeiden, siehe [63] S. VIII. Da bei nahezu vollständiger Durchmischung keine fetten Bereiche im Brennraum vorliegen, kommt es dagegen zu keiner Rußbildung, siehe [50] S. 280. Da keine Flammenfront auftritt, liegt während der Verbrennung eine vergleichsweise homogene Temperaturverteilung im Brennraum vor, wobei die Spitzentemperaturen unterhalb der Zeldovich Einstiegsreaktion liegen, vgl. Kapitel 2.3. Die NO_x-Emissionen befinden sich dadurch ebenfalls auf sehr niedrigem Niveau, siehe [18] S. 292.

Aufgrund der Problematik mit der Anlagerung von Kraftstoff an der Wand und dem damit einhergehenden Verbrauchsanstieg, wurden auch HCCI Verfahren mit äußerer Gemischbildung untersucht. Die Verwendung eines herkömmlichen Common-Rail Einspritzsystems im Saugrohr ist nicht zielführend, da der Dieseldieselkraftstoff aufgrund seiner hohen Siedelinie²² kaum verdampft. Dies hat zur Folge das größere Mengen an Kraftstoff unverdampft in den Brennraum gelangen und dort nicht umgesetzt werden können, siehe [143] S. 12 f. Zu Forschungszwecken wurde daher von der Ohio State University und dem FKFS der „Atomizer“ entwickelt, der in [140] und [16] beschrieben wird. Er zerstäubt den Dieseldieselkraftstoff in sehr feine Tröpfchen, die von der Luftströmung im Saugrohr mitgezogen werden, wodurch eine Anlagerung an der Saugrohrwand vermieden werden kann. Stellvertretend für die äußere Gemischbildung soll im Weiteren der Begriff Atomizer-HCCI verwendet werden. Untersuchungen von Haas haben gezeigt, dass bei Atomizer-HCCI-Betrieb ebenfalls kaum Ruß- und Stickoxidemissionen entstehen, siehe [63] S. 81. Allerdings führen die niedrigen Brennraumtemperaturen während dieser quasi „ideal homogenen“ Dieselverbrennung zu hohen HC- und CO-Emissionen. Außerdem kann die Verbrennung nicht durch die Einspritzung beeinflusst werden, sondern wird ausschließlich über die Randbedingungen im Saugrohr und den Kraftstoff bestimmt.

2.4.3 HCLI-Verfahren

Beim HCLI-Verfahren (Homogenous Charge Late Injection) befindet sich der Einspritzbeginn in einem Bereich von ca. 60 °KW vor OT bis kurz vor OT²³. Auch wenn sich die Ladungshomogenisierung beim HCLI-Betrieb nicht auf den gesamten Brenn-

²² 230-360°C, siehe [63] S. 75.

²³ Bei Einspritzbeginn nahe OT wird für das Brennverfahren auch der Begriff PCCI verwendet, siehe [26] S. 144, vgl. ²¹ und ²⁴.

raum erstreckt, wird diese Betriebsart als homogenes Brennverfahren bezeichnet. Laut Figer et al. kann das Verfahren auch bei einer für die Vollast optimierten Zylinder- und Kolbengeometrie eingesetzt werden, was die gemeinsame Applizierung mit einem konventionellen Dieselmotoren vereinfacht, siehe [50] S. 277. Andere Untersuchungen haben jedoch gezeigt, dass eine Kraftstoff-/Wandinteraktion zumindest bei früheren Einspritzbeginn unvermeidbar ist, siehe [134] S. 43, [63] S. 85 f. Um ein zu frühes Zünden zu verhindern, werden meist erhöhte AGR-Raten appliziert, vereinzelt wird auch das Verdichtungsverhältnis verringert, siehe [50] S. 277. Beide Maßnahmen zielen darauf ab die Brennraumtemperatur zum Einspritzzeitpunkt zu verringern.

Schloz untersuchte den HCLI-Betrieb an einem Einzylinder Lkw-Forschungsmotor mit knapp 2 l Hubraum und einer 30-Lochdüse, siehe [134] S. 27. Durch lastabhängige Verschiebung des Einspritzbeginns im Bereich zwischen 60 und 40 °KW vor OT lies sich ein lokal relativ homogenes Diesel-Luft Gemisch im Brennraum erzeugen. Die Verbrennung ist dementsprechend reaktionskinetisch kontrolliert, wobei eine ausgeprägte Niedertemperaturverbrennung auftritt, vgl. Abbildung 14. Aufgrund der niedrigen Brennraumtemperaturen und der homogenen Ladung kann die Stickoxid- und Rußbildung vermieden werden. Wird ausgehend von diesem Optimum der Einspritzbeginn Richtung früh verstellt, nehmen die CO- und HC-Emissionen aufgrund von lokaler Ausmagerung deutlich zu, insbesondere bei niedriger Last. Begrenzt durch die Wandanlagerung bei einem Einspritzbeginn von 90°KW vor OT oder früher kann keine vollständige Durchmischung im gesamten Brennraum erzeugt werden. Verstellt man den Einspritzbeginn ausgehend vom Optimum Richtung spät, reicht die Zeit selbst für die lokale Homogenisierung nicht mehr aus und es kommt zu hohen NO_x-Emissionen und Druckgradienten. Durch hohe AGR-Raten kann der Lastbereich nach oben erweitert werden.

Haas hat den HCLI-Betrieb an einem Pkw-Einzylindermotor dargestellt, siehe [63] S. 60. Seine Untersuchungen zeigten, dass bis zu einem indizierten Mitteldruck von 5 bar die Stickoxidemissionen bei einem Einspritzbeginn zwischen 60 und 20 °KW vor OT sehr niedrig sind, siehe [63] S. 85, wobei vergleichbare AGR-Raten wie bei Schloz notwendig waren, vgl. [134] S. 103. Bei OT-naher Einspritzung muss die AGR-Rate aufgrund der kurzen Vermischungszeit jedoch deutlich abgesenkt werden. Durch eine Anhebung des Einspritzdrucks auf 1200 bar kann, bedingt durch die bessere Vermischung des Kraftstoffs mit Luft, der Einspritzbeginn zwischen 50 und 30 °KW vor OT variiert werden, ohne dass es zu nennenswerten Rußemissionen kommt, siehe [63] S. 85. Die mit früherem Einspritzbeginn steigenden HC-Emissionen führt Haas auf vorübergehend in Quetschspalt und Feuersteg eingeschlossenen Kraftstoff zurück, der aufgrund der niedrigen Temperaturen im Wandbereich auch nach dem OT nicht mehr umgesetzt werden kann, vgl. Kapitel 2.3. Bei optimaler Abstimmung hinsichtlich aller Schadstoffemissionen liegt der Kraftstoffverbrauch 10% höher als beim Serienbrennverfahren des Motors, siehe [63] S. 135. Da es keine Möglichkeit gibt den Brennbeginn und den Brennverlauf durch die Einspritzung maßgeblich zu beeinflussen, gestaltet sich die Realisierung an einem Motor mit veränderlichen Randbedingungen (Umgebungstemperatur, -druck) schwierig. Aufgrund der Notwendigkeit zur schnellen Veränderung der Ladungszusammensetzung von Arbeitsspiel zu Arbeitsspiel schlägt Haas die Nutzung eines variablen Ventiltriebs vor, was jedoch zu Mehrkosten führt, siehe [63] S. 154.

2.4.4 HPLI-Verfahren

Das HPLI-Verfahren (Highly Premixed Late Injection)²⁴ ist den teilhomogenen Dieselmotoren zuzuordnen. Das Ende der 1990er-Jahre von Nissan im Pkw-Bereich vorgestellte Modulated Kinetics (MK) Brennverfahren [80] kann aufgrund seiner Randbedingungen als Variante des HPLI-Verfahrens angesehen werden. Anders als bei den bisher beschriebenen Verfahren soll beim MK-Verfahren keine vollständige Verteilung des Kraftstoffs im Brennraum erreicht werden, sondern lediglich eine lokale Homogenisierung. Während bei der konventionellen Dieselmotorenverbrennung aus Geräuschgründen der Premixed-Anteil möglichst gering gehalten wird und die Verbrennung somit überwiegend als Diffusionsverbrennung stattfindet, findet beim MK-Verfahren die Verbrennung als reine Premixed-Verbrennung statt. Kimura et al. erreichen dies durch eine Einspritzung nach dem OT in Kombination mit einer erhöhten AGR-Rate, was vergleichsweise lange Zündverzugszeiten zur Folge hat, siehe [80] S. 2 f. Das Restgas senkt außerdem die Sauerstoffkonzentration und dient zudem als Inertgas, was eine Absenkung der Verbrennungstemperatur zur Folge hat. Trotzdem sind bei HPLI-Verfahren die Brennraumtemperaturen während der Einspritzung so hoch, dass es zu keiner Niedertemperaturverbrennung kommt, siehe Abbildung 14. Durch den langen Zündverzug in Kombination mit einem erhöhten Luftdrall ist die Gemischbildungszeit ausreichend, um lokal fette Bereiche zu vermeiden. Somit ergeben sich sowohl niedrige Stickoxid- als auch Rußemissionen, siehe [80] S. 3. Die obere Lastgrenze des MK-Verfahrens ergibt sich aus dem mit steigender Last wärmeren Restgas und der zunehmenden Einspritzdauer. Somit ist es nicht möglich die Einspritzung vollständig vor Brennbeginn abzuschließen, was zu einer teilweisen Diffusionsverbrennung führt, siehe [80] S. 6.

Haas hat im Rahmen seiner Arbeit ein HPLI-Verfahren mit sehr frühem Einspritzbeginn nahe dem oberen Totpunkt untersucht. Dadurch war es möglich die obere Teillast bis zu einem indizierten Mitteldruck von 10 bar abzubilden, wobei der Einspritzbeginn aufgrund der hohen Druckgradienten mit steigender Last nach spät (hinter OT) verschoben werden musste, siehe [63] S. 154. Bei oberer Teillast und einer AGR-Rate von ca. 35% tritt aufgrund des verlängerten Zündverzugs und dem dadurch steigenden Anteil der vorgemischten Verbrennung kaum noch Rußbildung auf, wobei der Brennbeginn sehr kurz hinter dem Einspritzende liegt, siehe [63] S.132. Lokal fette Bereiche sind daher nicht vollständig auszuschließen. Haas zieht daher auch in Betracht, dass die Temperaturen dieser lokal fetten Bereiche tendenziell unterhalb der Rußbildungstemperatur liegen und die Rußbildung dadurch gedämpft wird, siehe [63] S.133. Aufgrund der allgemein geringen Verbrennungstemperaturen sind auch die Stickoxidemissionen niedriger als bei einem konventionellen Brennverfahren, siehe [63] S.136.

2.4.5 DCCS-Verfahren

Eine besonders exotische Variante der teilhomogenen Dieselmotorenverbrennung stellt das DCCS-Verfahren (Dilution Controlled Combustion System) dar, welches von Figer et al. unter anderem optisch untersucht wurde, siehe [50] S. 281. Die Einspritzzeiten sind vergleichbar mit konventionellen Dieselmotorenverfahren, vgl. Abbildung 14. Unterscheidungsmerkmal sind die extrem hohen Abgasrückführaten (> 80%). Diese dienen jedoch in erster Linie nicht der Gemischhomogenisierung²⁵, sondern sollen

²⁴ Das Brennverfahren wird auch als late-PCCI bezeichnet, siehe [26] S. 144, vgl. ²¹ und ²³.

²⁵ Beim DCCS-Verfahren gibt es durchaus einen Diffusionsanteil, siehe [50] S. 278.

sicherstellen, dass die Brennraumtemperatur unterhalb der Rußbildungstemperatur liegt. Abbildung 15 zeigt endoskopische Aufnahmen aus dem Brennraum bei 20°KW nach OT für drei verschiedene AGR-Raten:

AGR-Rate=78 % [links] 82% [mitte] 86% [rechts]; Aufnahmen 20°KW nOT.



Abbildung 15: Unterschiedlich ausgeprägte Rußbildung für verschiedene AGR-Raten beim DCCS-Verfahren [50] S. 281

Während man im linken Teilbild anhand der sichtbaren Flamme auf eine Russbildung schließen kann, ist diese bei 82% AGR im mittleren Teilbild schon deutlich schwächer. Bei 86% AGR im rechten Teilbild kommt es schließlich zu keiner Russbildung mehr. Solch hohe AGR-Raten und die damit einhergehenden niedrigen Temperaturen haben jedoch laut Figer et al. sehr hohe HC- und CO-Emissionen zur Folge, siehe [50] S. 278, da die Oxidation von CO zu CO₂ massiv behindert wird. Der damit einhergehende hohe Kraftstoffverbrauch disqualifiziert dieses Brennverfahren für weitergehende Untersuchungen in Richtung eines Serieneinsatzes, weshalb auch eine Abbildung dieses Verfahrens im Rahmen des in dieser Arbeit erstellten Verbrennungsmodells nicht sinnvoll erscheint.

2.5 Numerische Simulation des Hochdruckprozesses

Seit der Erfindung des Computers besteht grundsätzlich die Möglichkeit naturwissenschaftliche oder technische Fragenstellungen numerisch zu untersuchen. Während es bis Mitte der 80er Jahre des letzten Jahrhunderts fast ausschließlich Großrechner gab, haben sich seitdem auch kleinere Desktoprechner immer weiter verbreitet. Seit Mitte der 90er Jahre hielten sie auf breiter Front Einzug in den Arbeitsalltag der Entwicklungsbüros.

Die Entwicklung der Rechenleistung von Desktopcomputern ist in Abbildung 16 dargestellt, Abbildung 17 zeigt den Entwicklungsverlauf bei Superrechnern. Im Desktop-Bereich konnte die Leistungsfähigkeit zwischen 1988 und 2000 ungefähr um das 1000-fache gesteigert werden. Dieser Trend setzte sich in den weiteren Jahren fort. Wie aus Abbildung 17 hervorgeht, hatte ein leistungsfähiges Notebook Ende 2004 die gleiche Rechenleistung hinsichtlich Berechnungen von Fließkommazahlen wie derjenige Superrechner, der Anfang 1993 auf Platz 500 der weltweit schnellsten Superrechner gelistet war.

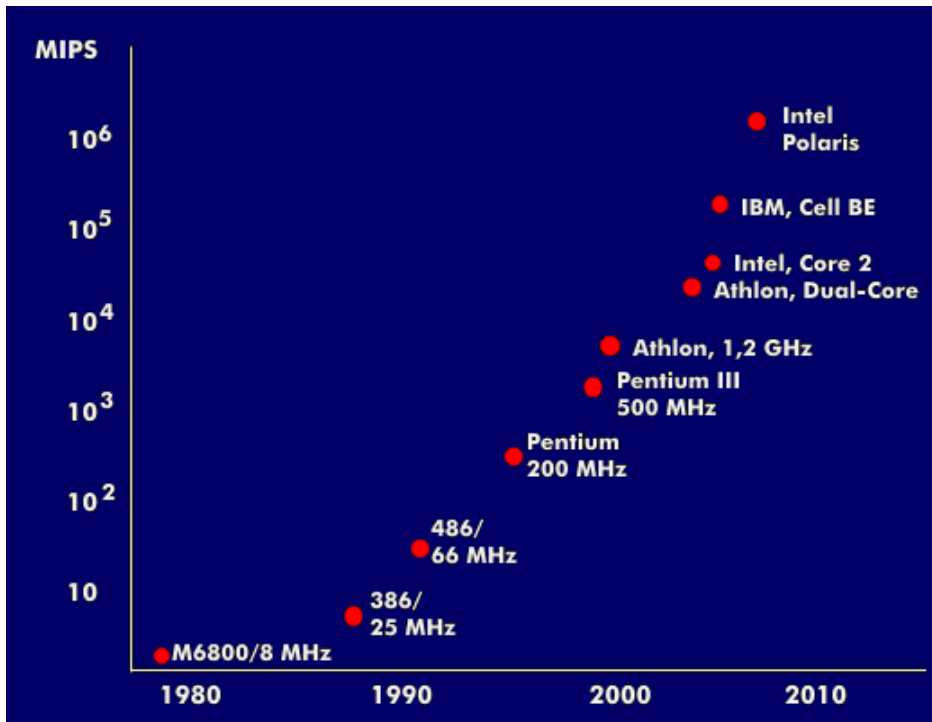


Abbildung 16: Historischer Verlauf der CPU-Leistung bei Desktop-Computern [75]

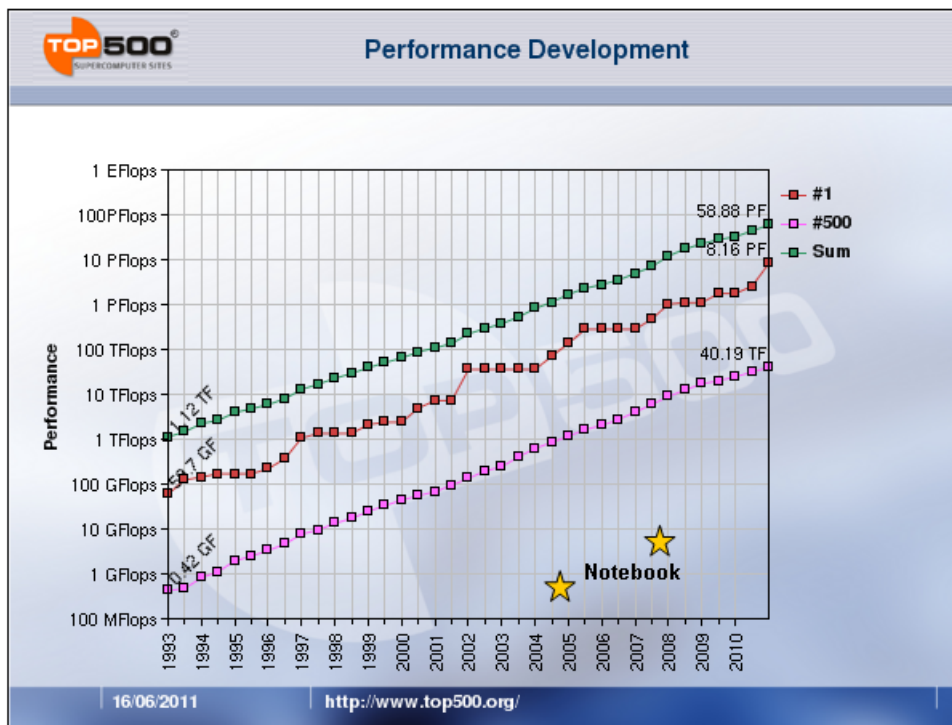


Abbildung 17: Entwicklung der Rechenleistung der 500 schnellsten Supercomputer seit 1993 [152], Notebookwerte aus [104] S. 216

Nicht nur die Rechenleistung sondern auch die Festplattenkapazität nimmt stetig zu. Schiffmann et al. haben dazu nachfolgende Informationen zusammengetragen, siehe [133] S. 171 f. Zunächst betrug die jährliche Steigerungsrate bis 1990 ungefähr 25%. In den nachfolgenden Jahren verdoppelte sich die Festplattenkapazität ungefähr alle 18 Monate. Um die Jahrtausendwende gab es einen deutlichen Schub und die jährliche Steigerungsrate konnten vorübergehend auf 150% gesteigert werden. In den

letzten Jahren ist die Steigerungsrate kleiner geworden. Im Desktop-Bereich sind aktuell Festplatten mit einer Kapazität von 4 TB verfügbar [72].

Durch die technischen Fortschritte im Bereich Einspritzsysteme, Aufladung, Brennverfahren und Abgasnachbehandlung hat die Anzahl an Freiheitsgraden bei der Applikation deutlich zugenommen, siehe Tabelle 2-1. Die damit einhergehende exponentielle Zunahme an Parameterkombinationen ist unter zeitlichen und ökonomischen Gesichtspunkten nicht mehr ausschließlich am Prüfstand untersuchbar. Zur Optimierung der Luftführung ist es daher inzwischen Standard ein 1D-Strömungsmodell aufzubauen. Mit dessen Hilfe können beispielsweise Ansaugstrecken und Ventilsteuerzeiten optimiert und unterschiedliche Aufladekonzepte untersucht werden.

Dieselmotor	Einspritzsystem	Injektorgeometrie	Düsenlochzahl
			Düsenlochdurchmesser
			Strahlwinkel
		Einspritzstrategie	Raildruck
			Anzahl der Einspritzungen
			Einspritzbeginn der jeweiligen Einspritzung
			Einspritzdauer der jeweiligen Einspritzung
			Form des Einspritzverlaufs
	Brennraum	Geometrie	Zylinderanzahl
			Hub
			Bohrung
			Verdichtungsverhältnis
		Brennverfahren	Kolbenmuldengeometrie
			Luftverhältnis
			AGR-Rate
			Drallklappensteuerung
	Ventiltrieb	Geometrie	Warmlaufstrategie
		Betriebsstrategie	Betriebsphasen zur Regeneration der Abgasnachbehandlungssysteme
	Turbolader	Geometrie	Ventilhubkurve / Nockengeometrie
			Ventilsteuerzeiten
Anzahl der Turbolader			
Betriebsstrategie		Turbinendurchmesser	
	Kompressordurchmesser		
Abgasnachbehandlung	Geometrie	Position im Strömungspfad	
		VTG-Stellung oder Wastegate-Ansteuerung	
			Auswahl, Dimensionierung und Anordnung der Komponenten

Tabelle 2-1: Freiheitsgrade bei der Auslegung eines aktuellen Dieselmotors

Innerhalb eines 1D-Strömungsmodells muss neben dem Ladungswechsel im Brennraum auch die Verbrennung abgebildet werden. In diesem Zusammenhang wird zwischen Berechnungen im Niederdruckteil (ND-Teil), bei dem mindestens ein Ventil geöffnet ist und Berechnungen im Hochdruckteil (HD-Teil), bei dem alle Ventile geschlossen sind, unterschieden. Während des HD-Teils ist der Brennraum somit ein abgeschlossenes thermodynamisches System.

Betrachtet man losgelöst aus dem 1D-Strömungsmodell den HD-Teil etwas näher, ist bezüglich Hin- und Her-Rechnung zu differenzieren, siehe Abbildung 18. Bei der Hin-Rechnung, geläufiger ist die Bezeichnung Arbeitsprozessrechnung (APR), ist der

Brennverlauf mittel- oder unmittelbar bekannt und es wird unter Berücksichtigung verschiedener thermodynamischer Annahmen ein Druckverlauf berechnet. Bei der Her-Rechnung, hier hat sich die Bezeichnung Druckverlaufsanalyse (DVA) etabliert, ist der Zylinderdruckverlauf bekannt und es wird daraus, ebenfalls unter bestimmten thermodynamischen Annahmen, der Brennverlauf bestimmt. Die Druckverlaufsanalyse ist somit ein Werkzeug zur Auswertung der am Prüfstand indizierten Zylinderdruckverläufe. Wenn DVA-Brennverläufe mit Brennverläufen aus der Arbeitsprozessrechnung verglichen werden muss sichergestellt sein, dass beide bei gleichen Modellrandbedingungen (Zonenanzahl, Kalorikansatz, Wandwärmansatz) erzeugt wurden. Aufgrund des nicht linearen Kalorikverhaltens ergeben sich beispielsweise bei der ein- und zweizonigen DVA unterschiedliche Brennverläufe, siehe [59] S. 89 f.

Arten der HD-Simulation

- Arbeitsprozessrechnung (Hin-Rechnung)
 - Vorgabe eines Brennverlaufs durch Anwender (unmittelbar)
 - Vorgabe / Berechnung des Brennverlaufs über ein empirisches Verbrennungsmodell (un-/mittelbar)
 - Berechnung des Brennverlaufs über ein phänomenologisches Verbrennungsmodell (mittelbar)
 - Berechnung des Brennverlaufs über ein 3D-CFD Modell (mittelbar)
- Druckverlaufsanalyse (Her-Rechnung)
 - Vorgabe eines Zylinderdruckverlaufs (unmittelbar)

Thermodynamische Modellannahmen

- Kalorik
- Wandwärmemodell
- Anzahl der Zonen

Abbildung 18: Differenzierungsmerkmale der Berechnungen im Hochdruckteil

Für ein besseres Verständnis der weiteren Ausführungen ist es sinnvoll einige Begrifflichkeiten näher festzulegen. Analog zu Grill, siehe [59] S. 5 ff, wird in dieser Arbeit unter einem System ein thermodynamischer Bilanzierungsraum verstanden. Es besteht mindestens aus einer Zone, kann jedoch auch in beliebig viele Zonen unterteilt werden. Innerhalb des Systems liegt Druckhomogenität vor, was zur Folge hat, dass alle Zonen innerhalb eines Systems den gleichen Druck haben. Des Weiteren entsprechen die Massen und die Volumina aller Zonen eines Systems der Gesamtmasse sowie dem Gesamtvolumen des Systems. Mit Hilfe von Zonen können Temperaturinhomogenitäten innerhalb eines Systems dargestellt werden, da jede Zone ihre eigene Temperatur hat. Zonen stellen somit nicht nur einen Massen-, sondern auch einen Energiebilanzraum dar. Je nach Modellansatz findet ein Energie- und/oder Massenaustausch zwischen den Zonen statt. Eine abschließende Bedingung ist, dass in Systemen und somit auch in Zonen die thermische Zustandsgleichung gültig ist. Somit können nach den hier dargestellten Definitionen in Systemen und Zonen nur gasförmige Komponenten bilanziert werden. Im Weiteren sollen nun

die verschiedenen Varianten der Arbeitsprozessrechnung näher betrachtet und ihre jeweiligen Anwendungsgebiete hervorgehoben werden.

Bei der ersten Variante simuliert man eine bereits erfolgte Prüfstandsmessung unmittelbar nach. Der Brennverlauf ergibt sich aus einer zuvor durchgeführten Druckverlaufsanalyse und nicht aus einem Verbrennungsmodell. Man kann somit nur bereits vermessene Betriebspunkte nachsimulieren, um beispielsweise nicht gemessene bzw. nicht messbare Größen zu bestimmen. Möchte man Untersuchungen durchführen, bei denen sich die Randbedingungen bei Einlass-Schließt ändern, ist die Vorgabe eines Brennverlaufs nur dann sinnvoll, wenn der Verbrennungsablauf entweder eine untergeordnete Rolle spielt, oder die zu untersuchenden Konfigurationen keine Auswirkung auf die Verbrennung haben. Beispielhaft hierfür wäre eine Untersuchung des Aufwärmverhaltens von Abgasnachbehandlungskomponenten bei unterschiedlicher Positionierung im Abgastrakt. Im Allgemeinen ist diese Vereinfachung jedoch nicht zulässig. Bereits eine Drehzahlerhöhung verändert den Verbrennungsablauf so stark, dass die Simulation eines Betriebspunkts mit einer Drehzahl von 2000 U/min unter Verwendung eines Brennverlaufs einer Messung bei 1000 U/min nicht zielführend ist.

Empirische Verbrennungsmodelle stellten lange Zeit die einzige Möglichkeit dar, Änderungstendenzen des Brennverlaufs bei veränderten Randbedingungen aufzuzeigen. Hinsichtlich ihres Aufbaus kann zwischen zwei Teilen unterschieden werden. Der immer vorhandene Approximationsteil besteht aus einer mathematischen Funktion, welche mit Hilfe von Abstimmkoeffizienten an einen DVA-Brennverlauf angenähert wird. Der nur bei manchen Modellen vorhandene Funktionsteil dient dazu, die Abstimmkoeffizienten in Abhängigkeit von bestimmten Randwerten, beispielsweise Drehzahl und Last, zu variieren. Dies erfolgt über empirische Funktionen, die anhand von vorhandenen Messdaten entwickelt werden. Modelle ohne Funktionsteil werden auch als Ersatzbrennverlauf bezeichnet. Ihre Verwendung im Rahmen der Arbeitsprozessrechnung bietet jedoch kaum einen Vorteil gegenüber der direkten Vorgabe eines DVA-Brennverlaufs, da ohne Funktionsteil die Auswirkungen von veränderten Randbedingungen auf die Verbrennung überhaupt nicht abgebildet werden. Bei einem vollwertigen empirischen Modell mit Funktionsteil ist es eingeschränkt möglich Betriebspunkte zu simulieren, für die keine Messungen und somit auch keine DVA-Brennverläufe vorliegen. Begrenzend ist dabei, dass der empirische Funktionsteil nur für den Motor und das Brennverfahren Gültigkeit hat, anhand dessen er entwickelt wurde. Bei Änderungen an Motorgeometrie, Kraftstoffeinspritzung oder der Ladungszusammensetzung bei Einlass-Schließt ist keine Vorhersagefähigkeit vorhanden. In [Kapitel 3.1](#) werden einige empirische Verbrennungsmodelle vorgestellt.

Damit die Arbeitsprozessrechnung als sinnvolles Werkzeug bei der Motorenentwicklung eingesetzt werden kann, benötigt man vorhersagefähige Verbrennungsmodelle. Der simulative Vergleich unterschiedlicher Brennverfahren oder verschiedener Aufladekonzepte ist sonst nicht möglich. Mit Hilfe von phänomenologischen Modellen²⁶ wird versucht diejenigen physikalischen und chemischen Effekte abzubilden, die großen Einfluss auf den Brennverlauf haben. Da je nach Brennverfahren unterschiedliche Prozesse vorherrschen, unterscheiden sich auch deren phänomenologische Modellierung. Beim Dieselmotor müssen in erster Linie die Gemischbildung, der Zündverzug und die Verbrennung abgebildet werden. Die Gemischbildung hängt

²⁶ Auch quasidimensionale Modelle genannt.

überwiegend vom Einspritzverlauf ab [29] S. 486, weshalb dieser bei der Simulation mit einem phänomenologischen Modell stets vorgegeben werden muss. Dies erhöht im Gegensatz zur Verwendung eines empirischen Verbrennungsmodells den Aufwand während der Modellerstellung, da der Einspritzverlauf meist nicht unmittelbar verfügbar ist. Es sind unterschiedliche Modelle verfügbar, die unter anderem aus dem Raildruck und den Injektoransteuerzeiten den Einspritzverlauf berechnen können, siehe beispielsweise [20], [79], [105]. In Kapitel 3.2 werden gängige phänomenologische Modelle zur Simulation der konventionellen Dieselerbrennung vorgestellt. Sie unterscheiden sich in ihrer Modellierungstiefe und dadurch auch in ihrem Rechenzeitbedarf. Stand der Technik sind Modelle, mit denen nach Abstimmung an einigen charakteristischen Betriebspunkten das gesamte Betriebskennfeld vorhersagefähig berechnet werden kann. Selbst bei einem Betriebspunkt mit Vor-, Haupt- und Nacheinspritzung beträgt die Rechenzeit pro Arbeitsspiel dabei weniger als eine Sekunde auf einem Standard-PC, vgl. [127]²⁷. Wenn ein schnelles phänomenologisches Modell im Rahmen einer 1D-Strömungssimulation eingesetzt wird, lässt sich damit auch auf einem normalen Desktop-PC bei vertretbarem Zeitaufwand das Transientverhalten des Motors untersuchen, siehe [135], da die den Abgasturbolader beeinflussende Abgasenthalpie mit ausreichender Genauigkeit vom Verbrennungsmodell vorhergesagt wird. So kann beispielsweise der verzögerte Ladedruckaufbau aufgrund der Trägheit des Abgasturboladers untersucht werden (Turboloch). Dieser Effekt hat nicht nur Auswirkung auf die Fahrleistungen eines Fahrzeugs, sondern kann auch zu kurzzeitig erhöhten Ruß- oder Stickoxidemissionen führen. Diese können anhand der Simulation zumindest qualitativ abgeschätzt werden.

Den höchsten Detaillierungsgrad bei der Simulation der innermotorischen Verbrennung haben 3D-CFD Modelle. Sie unterteilen den Brennraum in ein Netz aus Zellen²⁸. Aufgrund der Kolbenbewegung kann nicht durchgängig mit einem ortsfesten, unbeweglichen Netz gerechnet werden. Laut Riegler gibt es folgende Lösungsansätze, siehe [129] S. 76 f:

- Zellenverformung
- Netzwechsel (mesh mapping, rezone)
- Snapping-Algorithmus

Die einfachste Variante ist die Zellenverformung, bei der die Zellen gestreckt und gestaucht werden. Die Anzahl der Zellen bleibt dabei immer gleich. Beim Netzwechsel findet neben der Zellenverformung zu festgelegten Zeitpunkten ein kompletter Wechsel des gesamten Netzes statt, um die numerischen Fehler durch die Netzbeziehung zu verringern. Beim Snapping-Algorithmus wird das Kompressionsvolumen des Brennraums mit einem optimierten, ortsfesten Gitter diskretisiert, dessen Zellen nicht verformt werden. Je nach Bewegungsrichtung werden weitere Zellschichten hinzugefügt oder entfernt, die auch verformt werden. Abhängig von der aktuellen Kurbelwinkelposition ist der Brennraum somit in eine bestimmte Anzahl an Zellen

²⁷ Es existieren auch phänomenologische Modelle mit höheren Rechenzeiten, siehe Kapitel 3.2 und Kapitel 3.3.

²⁸ Im Gegensatz zu einer Zone hat jede Zelle einen individuellen Druck und kann nicht nur gasförmige, sondern auch flüssige Komponenten enthalten.

aufgeteilt, wobei Bereiche mit erhöhter Strömungsturbulenz meist etwas feiner aufgelöst sind, siehe [103] S. 325 ff.

Laut Chiodi ist die maximale Zellenanzahl zur Diskretisierung des Brennraums in den letzten Jahren kontinuierlich auf Werte zwischen $5 \cdot 10^5$ und 10^6 Zellen gestiegen, siehe [28] S. 76. Eine vollständige Modellierung der Strömung im Brennraum über die allgemeinen Navier-Stokes Gleichungen würde dennoch eine wesentlich feinere örtliche Diskretisierung erfordern, was bis auf weiteres zu einer unakzeptabel hohen Rechenzeit führt²⁹, siehe [28] S. 75. Daher wird vereinfachend pro Zelle mit einer gemittelten Turbulenz gerechnet. Des Weiteren werden für jede Zelle die Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie, Spezieskonzentration und Impuls aufgestellt, was zu einem Gleichungssystem aus $6 + N_i$ Gleichungen pro Zelle führt, siehe [28] S.54. N_i ist dabei die Anzahl der betrachteten Spezies, die üblicherweise um die 40 beträgt³⁰. Zum Lösen der Gleichungssysteme müssen weitere Gesetzmäßigkeiten formuliert werden, die unbekannte Größen wie Strömungsdichten oder Drucktensoren aus bekannten Größen berechnen. Dabei kann zwischen allgemeinen Gesetzen³¹ und anwendungsspezifischen Modellen unterschieden werden. Letztere sollen motorenspezifische Effekte wie beispielsweise Selbst- oder Fremdzündung, Wandwärmeverluste, oder Kraftstoffeinspritzung vereinfacht abbilden. Eine genaue Übersicht bieten beispielsweise [160] S. 173 ff oder [28] S. 55 ff.

Bezüglich der Modellierung der Chemie gibt es unterschiedlich detaillierte Modellansätze. Prinzipiell ist es möglich, die chemischen Abläufe der Verbrennung über einen mehr oder weniger detaillierten Reaktionsmechanismus abzubilden. Dies erhöht jedoch in Abhängigkeit der Anzahl an Reaktionsgleichungen die Rechenzeit so stark, dass eine Nutzung im Rahmen der Brennverfahrensentwicklung nicht möglich ist, siehe [13] S. 6. Daher beschränkt sich die Berechnung meist auf ein einfaches Modell zur Vorhersage der Wärmefreisetzung oder einen sehr kleinen Reaktionsmechanismus mit weniger als zehn Reaktionsgleichungen. Trotz all dieser Vereinfachungen betragen die Rechenzeiten für ein Arbeitsspiel zwischen mehreren Stunden und einigen Tagen, vgl. [28] S. 76. Aber auch die Netzgenerierung und die Parametrierung einer 3D-CFD Simulation erfordern wesentlich mehr Zeit und vor allem Geometrieinformationen, als die Erstellung und Abstimmung eines 1D-Simulationsmodells, vgl. [172] S. 4.

Im Entwicklungsprozess eines neuen Motors werden die 1D- und die 3D-CFD Simulation daher zu unterschiedlichen Zeitpunkten und für unterschiedliche Aufgaben eingesetzt. In der Konzeptphase können mit Hilfe der 1D-Simulation schnell unterschiedliche Varianten simuliert und verglichen werden. Sobald das Motorkonzept festgelegt wurde und die Geometriedetails untersucht werden müssen, bietet sich die 3D-CFD Simulation als Werkzeug an. Mit ihrer Hilfe kann beispielsweise die Geomet-

²⁹ Laut Chiodi wären zur direkten numerischen Simulation (DNS) der Turbulenz im Brennraum ca. 10^{13} Zellen sowie $6 \cdot 10^6$ Rechenschritte pro Arbeitsspiel notwendig, siehe [28] S. 75. Aus der im Anhang dargestellten Überschlagsrechnung geht hervor, dass selbst unter optimalen Entwicklungstendenzen im IT-Bereich eine DNS mit Desktop-Rechnern in den nächsten 55 Jahren nicht sinnvoll durchgeführt werden kann.

³⁰ Dabei handelt es sich nicht nur um reale Spezies, sondern auch um sogenannte „virtuelle“ Spezies, die aus mehreren realen Spezies bestehen.

³¹ Werden laut Warnatz et al. auch empirische Gesetze genannt, obwohl sie auch aus der allgemeinen Theorie der irreversiblen Thermodynamik hergeleitet werden können, siehe [160] S. 173.

rie der Einlasskanäle, die Kolbenmuldengeometrie oder die Einspritzstrahlgeometrie des Injektors optimiert werden. Krüger et al. sehen in kommerziellen 3D-CFD Codes aktuell Entwicklungsbedarf bei der Modellierung der Tropfenturbulenz bzw. Dispersion, bei der Behandlung von Sonderfällen der Gasströmung, sowie bei den turbulenten Mischungsmodellen zur Berechnung der Verbrennung, siehe [86] S. 294 f. Ihrer Einschätzung nach ist es sinnvoller, die steigende Rechenleistung in eine Verbesserung der Simulationsqualität statt einer Erhöhung der Quantität einzusetzen, siehe [86] S. 307 f. Belastbare Untersuchungen unterschiedlicher Motorkonfigurationen und Applikationen werden daher in den nächsten Jahren weiterhin mit Hilfe phänomenologischer Verbrennungsmodelle durchgeführt werden.

3 Modellscreening

3.1 Berechnung des Brennverlaufs über ein empirisches Verbrennungsmodell

Das bis heute mit Abstand am meisten bekannte empirische Verbrennungsmodell wurde laut Sitkei bereits 1956 von Vibe³² vorgestellt, siehe [142] S. 222 Quelle 63. Die ältesten deutschsprachigen Veröffentlichungen zu dem Modell sind [142] S. 156 ff und [157]. Das Modell basiert auf der Annahme, dass sich die zeitliche Änderung der „relativen Dichte der aktiven Zentren“ [142] S. 157 oben, mit Hilfe einer Potenzfunktion beschreiben lässt, vgl. [157] S. 51 ff. Letztlich führt dies auf den in Gleichung (3-1) dargestellten Ansatz für den Summenbrennverlauf, aus dem sich durch Ableitung der Brennverlauf ergibt, siehe Gleichung (3-2).

$$Q_B = Q_{B,ges.} \cdot \left(1 - e^{-a \cdot \left(\frac{t-t_{BB}}{\Delta t_{BD}} \right)^{m+1}} \right) \quad (3-1)$$

Q_B :	Summenbrennverlauf zu einem bestimmten Zeitpunkt [J]
$Q_{B,ges.}$:	Energiegehalt des insgesamt zugeführten Kraftstoffs [J]
a :	Abstimmkoeffizient [-]
t :	Aktueller Zeitpunkt [s]
t_{BB} :	Zeitpunkt des Brennbeginns [s]
Δt_{BD} :	Brenndauer [s]
m :	Vibe-Formparameter [-]

$$\frac{dQ_B}{dt} = Q_{B,ges.} \cdot a \cdot (m+1) \cdot \left(\frac{t-t_{BB}}{\Delta t_{BD}} \right)^m \cdot e^{-a \cdot \left(\frac{t-t_{BB}}{\Delta t_{BD}} \right)^{m+1}} \cdot \left[\frac{1}{s} \right] \quad (3-2)$$

dQ_B/dt :	Brennverlauf zu einem bestimmten Zeitpunkt [J/s]
-------------	--

Der normierte, zeitliche Verbrennungsfortschritt, der die zwei Abstimmkoeffizienten Brennbeginn und Brenndauer enthält, ist im Brennverlauf sowohl als Vorfaktor, als auch im Exponenten enthalten³³. Bei Brennende gilt folgendes:

$$Q_{B,BE} = Q_{B,ges.} \cdot \left(1 - e^{-a \cdot (1)^{m+1}} \right) = Q_{B,ges.} \cdot \left(1 - e^{-a} \right) \quad (3-3)$$

$Q_{B,BE}$:	Summenbrennverlauf bei Brennende [J]
--------------	--------------------------------------

³² Die Schreibweise „Vibe“ ergibt sich aufgrund der Transliteration nach ISO R9, siehe [157] Impressum. In [142] sowie im englischsprachigen Raum wird die Schreibweise „Wiebe“ verwendet.

³³ Es ist anzumerken, dass in älteren Werken Brenndauer und Brennbeginn in Sekunden angegeben werden, vgl. [142] S. 157 oder [157] S. 56, während diese in späteren und aktuellen Veröffentlichungen häufig in Grad Kurbelwinkel angegeben werden, siehe beispielsweise [166] S. 111, [112] S. 38, [119] S. 176, wodurch die Brenndauer in Sekunden drehzahlabhängig ist.

Durch Umformen erhält man:

$$a = -\ln(1 - \eta_u)$$

$$\text{bzw. } \eta_u = \frac{Q_{B,BE}}{Q_{B,ges.}} = 1 - e^{-a} \quad (3-4)$$

η_u : Umsetzungswirkungsgrad [-]

Mit Hilfe des Abstimmkoeffizienten a wird somit der Umsetzungswirkungsgrad η_u der Verbrennung festgelegt. In [142] S. 157 beträgt $a=6,9$, was einem Umsetzungswirkungsgrad von 0,999 entspricht. Über den Vibe-Formparameter m kann die Brennrautenform über der Brenndauer beeinflusst werden. Je kleiner m , umso höher ist der Verbrennungsumsatz bei Brennbeginn. Für Dieselmotoren liegt m laut [142] S. 157 zwischen 0,1 und 1. Die entsprechenden Brennverläufe sind in Abbildung 19 dargestellt.

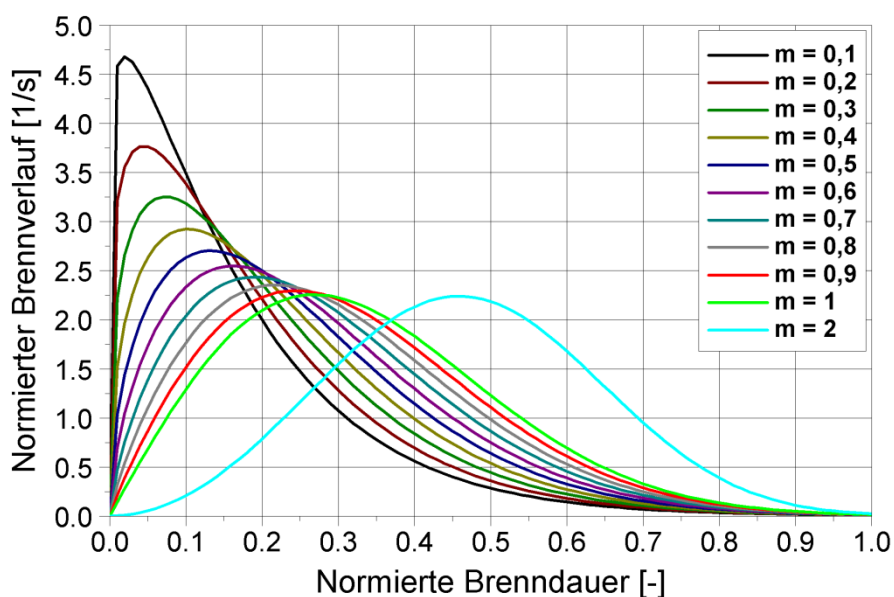


Abbildung 19: Brennverläufe für unterschiedliche Vibe-Formparameter

Die Brennverläufe mit Formfaktor 0,1 bis 0,3 haben eine gewisse Ähnlichkeit mit dem Brennverlauf eines konventionellen Dieselmotors. Allerdings ist es nicht möglich eine Premixedverbrennung und einen diffusiven Ausbrand mit einem Parametersatz, bestehend aus den vier Koeffizienten (t_{BB} , Δt_{BD} , a und m), darzustellen. Ein einzelner Vibe-Brennverlauf ist daher eher zur Simulation einer ottomotorischen Verbrennung mit kugelförmiger Flammenausbreitung³⁴ geeignet und hat sich dafür auch etabliert. Zur Darstellung einer dieselmotorischen Verbrennung wurden teilweise Zweifach-[112], oder sogar Mehrfach-Vibe Ansätze verwendet. Mit diesen konnten Brennverläufe von Betriebspunkten mit ausgeprägter Premixed-Verbrennung besser angenähert werden. Um auch nicht vermessene Betriebspunkte simulieren zu können, veröffentlichten Woschni und Anisitis empirische Funktionen zur Variation des Vibe-Brennverlaufs in Abhängigkeit von Drehzahl, Luftverhältnis sowie Temperatur und Druck bei Kompressionsbeginn, siehe [166] S. 110 ff. Der Brennbeginn eines Be-

³⁴ Und somit bei kugelförmigem Brennraum und zentraler Zündkerzenposition auch parabelförmigem Brennverlauf.

triebspunktes ergibt sich aus der Änderung des Förderbeginns gegenüber dem Referenzpunkt, aus einem in Sekunden konstant angenommenen Einspritzverzug und dem Zündverzug. Letzterer wird über eine Gleichung nach Stikei berechnet, deren Allgemeingültigkeit nach Meinung von Woschni und Anisitis jedoch mit Unsicherheiten behaftet ist, siehe [166] S. 111. Die Brenndauer wird in Abhängigkeit des Luftverhältnisses und der Drehzahl nach Gleichung (3-5) variiert.

$$\Delta\varphi_{BD} = \Delta\varphi_{BD,0} \cdot \left(\frac{n}{n_0}\right)^{0,5} \cdot \left(\frac{\lambda}{\lambda_0}\right)^{0,6} \quad (3-5)$$

$\Delta\varphi_{BD}$: Brenndauer des extrapolierten Betriebspunkts [°KW]

$\Delta\varphi_{BD,0}$: Brenndauer des Referenzbetriebspunkts [°KW]

n : Drehzahl des extrapolierten Betriebspunkts [U/min]

n_0 : Drehzahl des Referenzbetriebspunkts [U/min]

λ : Luftverhältnis des extrapolierten Betriebspunkts [-]

λ_0 : Luftverhältnis des Referenzbetriebspunkts [-]

Die Exponenten in Gleichung (3-5) wurden von Woschni und Anisitis auf Basis der vorhandenen Messdaten festgelegt, siehe [166] S. 111. Durch dieselbe Vorgehensweise wurde auch Gleichung (3-6) zur Variation des Vibe-Formparameters bestimmt, siehe [166] S. 112 f.

$$m = m_0 \cdot \left(\frac{\Delta\varphi_{ZV,0}}{\Delta\varphi_{ZV}}\right)^{0,5} \cdot \left(\frac{n_0}{n}\right)^{0,3} \cdot \frac{p_{RB}}{p_{RB,0}} \cdot \frac{T_{RB}}{T_{RB,0}} \quad (3-6)$$

m : Vibe-Formparameter des extrapolierten Betriebspunkts [-]

m_0 : Vibe-Formparameter des Referenzbetriebspunkts [-]

$\Delta\varphi_{ZV,0}$: Dauer des Zündverzugs im Referenzbetriebspunkt [°KW]

$\Delta\varphi_{ZV}$: Dauer des Zündverzugs im extrapolierten Betriebspunkt [°KW]

p_{RB} : Druck bei Rechenbeginn im extrapolierten Betriebspunkt [Pa]

$p_{RB,0}$: Druck bei Rechenbeginn im Referenzbetriebspunkt [Pa]

T_{RB} : Temperatur bei Rechenbeginn im extrapolierten Betriebspunkt [K]

$T_{RB,0}$: Temperatur bei Rechenbeginn im Referenzbetriebspunkt [K]

Die beschriebene Funktionalität bildet die relevanten physikalischen Aspekte eines modernen Dieselmotors jedoch nicht wirklich ab und kann daher die Auswirkungen von Veränderungen wichtiger Randbedingungen wie beispielsweise Einspritzverlauf, Einspritzdruck oder AGR-Rate nicht vorhersagen.

Der von Oberg vorgestellte Zweifach-Vibe-Ansatz enthält sieben Abstimmkoeffizienten, die ebenfalls betriebspunktabhängig über Funktionen variiert werden, siehe [112] S. 63.

Auch wenn Mehrfach-Vibe Ansätze eine bessere Approximation an reale Brennverläufe von Dieselmotoren ermöglichen, lassen sich typische Brennverlaufsformen nicht wirklich gut damit darstellen. Schreiner stellte deshalb einen sogenannten Polygon-Hyperbel-Ersatzbrennverlauf zur Simulation der dieselmotorischen Verbrennung vor [138], der in Abbildung 20 dargestellt ist.

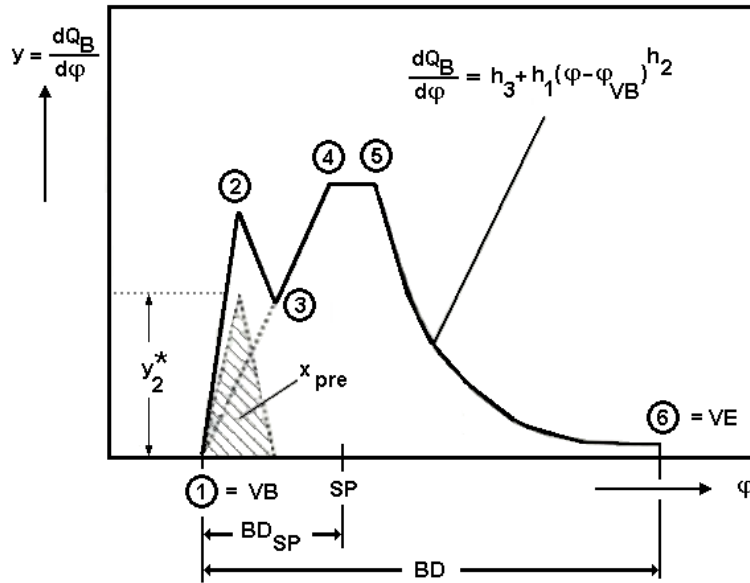


Abbildung 20: Polygon-Hyperbel Ersatzbrennverlauf [138] S. 556

Die Premixed-Verbrennung wird über den Dreiecks-Verlauf 1-2-3 dargestellt, die Diffusionsverbrennung über einen linearen Brennverlaufsanstieg 3-4, der in einem Plateau 4-5 mündet. Der diffusive Ausbrand wird über einen Hyperbel-Verlauf abgebildet. Das Modell hat insgesamt neun Abstimmkoeffizienten, die in [138] auf S. 559 dargestellt werden. Dieser Modellansatz erlaubt eine wesentlich bessere Anpassung an reale Brennverläufe schnelllaufender Dieselmotoren, wobei die Abstimmung aufgrund der vielen Koeffizienten deutlich zeitaufwendiger ist.

Barba hat diesen Modellierungsansatz aufgegriffen, modifiziert und um die Möglichkeit zur Darstellung einer Vorverbrennung mit Hilfe einer Vibe-Funktion erweitert, siehe [10] S. 62. Den Formfaktor m der Vibe-Vorverbrennung wurde auf zwei gesetzt, da dies einem symmetrischen Brennverlauf entspricht, vgl. Abbildung 19. Demnach müssen bezüglich der Vorverbrennung nur noch der Brennbeginn, die Brenndauer und die umgesetzte Brennstoffenergie bestimmt werden. Die beiden letztgenannten Werte ergeben sich indirekt, indem man versucht das Brennverlaufmaximum der Vorverbrennung möglichst gut anzunähern, siehe nachfolgende Abbildung:

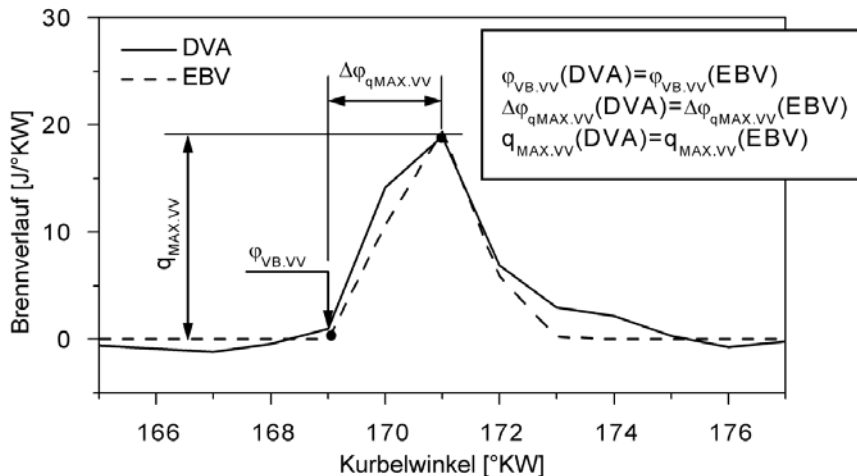


Abbildung 21: Approximation einer Vorverbrennung mit dem Barba-Ersatzbrennverlauf [10] S. 64

Statt wie Schreiner die Hauptverbrennung über einen Polygon-Hyperbel Verlauf abzubilden, verwendet Barba einen Vibe-Hyperbel Ersatzbrennverlauf, siehe Abbildung 22.

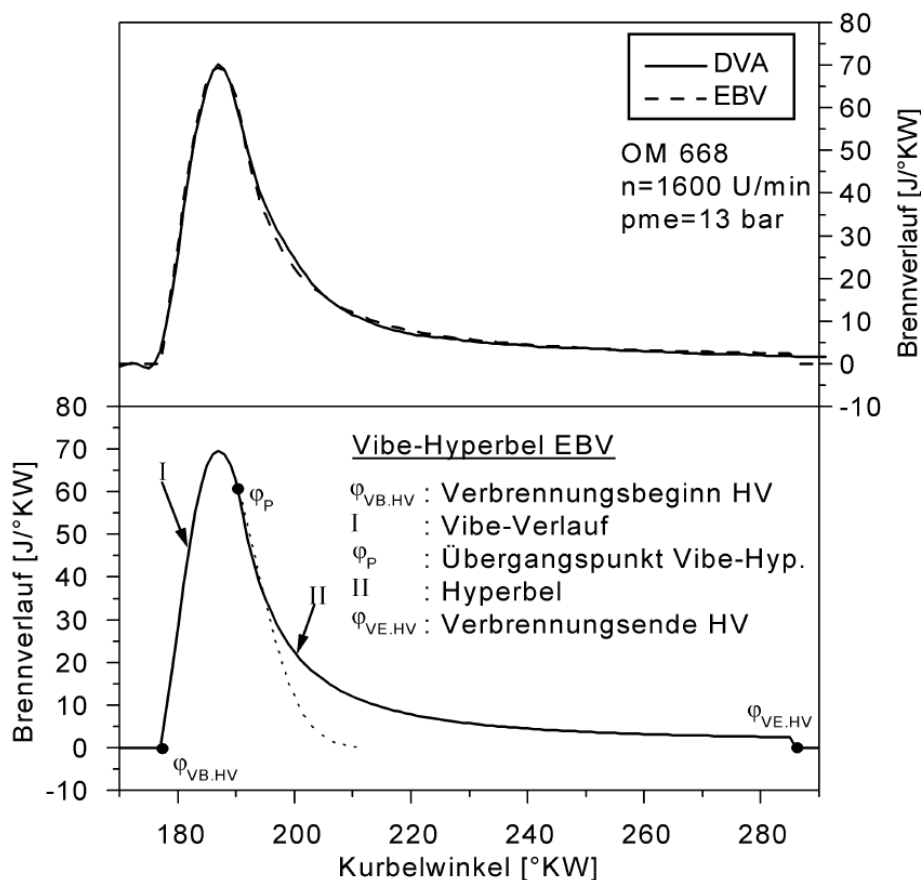


Abbildung 22: Barba-Ersatzbrennverlauf [10] S. 65

Wie man in Abbildung 22 erkennt, wird die Vibe-Funktion nur bis zu Übergangspunkt φ_P berechnet³⁵. In diesem Punkt müssen die Funktionswerte von Vibe- und Hyperbel-Funktion übereinstimmen, nicht aber deren Ableitung, siehe [10] S. 66. Da die Vibe-Funktion nicht vollständig als Ersatzbrennverlauf genutzt wird, entsprechen die beiden Vibe-Koeffizienten *Verbrennungsdauer* und *freigesetzte Wärmeenergie* nicht den Werten der Hauptverbrennung und werden von Barba daher auch als „synthetisch“ bezeichnet, siehe [10] S. 66.

³⁵ Die gestrichelte Darstellung der Vibe-Funktion nach dem Übergangspunkt in Abbildung 22 unten führt eventuell zu einer Fehlinterpretation. Im Gegensatz zu Mehrfach-Vibe-Ansätzen, bei denen im gesamten Kurbelwinkelbereich des Hochdruckteils die einzelnen Vibe-Verläufe aufsummiert werden und so den Brennverlauf bilden, werden beim Barba-Ersatzbrennverlauf der Vibe- und der Hyperbelverlauf nicht aufsummiert. Nach dem Übergangspunkt ergibt sich der Brennverlauf somit direkt aus dem Hyperbelverlauf.

Die sogenannte Hyperbel-Funktion³⁶ ist folgendermaßen definiert:

$$\frac{dQ_{B,II}}{d\varphi} = h_3 + h_1 \cdot (\varphi - \varphi_{BB,HV})^{h_2} \quad (3-7)$$

$dQ_{B,II}/d\varphi$: Der über die Hyperbel-Funktion dargestellte Brennverlaufsteil [J/°KW]

h_1 : Hyperbelparameter [J/°KW²]

h_2 : Hyperbelparameter [-]

h_3 : Hyperbelparameter [J/°KW]

$\varphi_{BB,HV}$: Kurbelwellenposition bei Brennbeginn der Hauptverbrennung [°KW]

Aus dem bisher beschriebenen Ansatz ergeben sich folgende neun Abstimmkoeffizienten, vgl. [10] S. 66:

- Verbrennungsbeginn Hauptverbrennung
- Verbrennungsdauer Hauptverbrennung
- Verbrennungsdauer Vibe-Funktion (synthetisch)
- Vibe-Formfaktor
- Freigesetzte Wärme der Vibe-Funktion (synthetisch)
- Lage des Übergangspunkts
- Hyperbelparameter 1
- Hyperbelparameter 2
- Hyperbelparameter 3

Nur die ersten beiden Abstimmkoeffizienten können direkt aus einem DVA-Brennverlauf bestimmt werden, während alle weiteren Koeffizienten mathematischer Natur sind und daher zeitaufwendig abzustimmen sind. Aus diesem Grund hat Barba sogenannte Verbrennungskenngrößen entwickelt. Damit sind fünf neue Abstimmparameter gemeint, deren Werte direkt durch Betrachtung von DVA-Brennverläufen bestimmt werden können. Im Einzelnen sind dies, siehe [10] S. 67:

- Verbrennungsbeginn Hauptverbrennung
- Brennverlaufsmaximum
- Lage des Brennverlaufsmaximums
- Lage des 50% Umsatzpunktes der Hauptverbrennung
- Lage des 90% Umsatzpunktes der Hauptverbrennung

Diese Verbrennungskenngrößen können unter Einbeziehung zusätzlicher Randbedingungen³⁷ eindeutig in die neun ursprünglichen Abstimmkoeffizienten überführt

³⁶ Barba merkt an, dass es sich bei der Funktion nicht um eine Hyperbel im mathematischen Sinn handelt, siehe [10] S. 66. Aufgrund der Ähnlichkeit des Funktionsverlaufs mit einer Hyperbel wurde dieser Begriff jedoch eingeführt. Da er sich etabliert hat, wird er hier entsprechend verwendet.

³⁷ Beispielsweise befindet sich der Übergangspunkt φ_p immer in einem festgelegten Verhältnis hinter dem Maximum der Brennrate, siehe [10] S. 69.

werden, siehe Abbildung 23, woraus sich dann der Vibe-Hyperbel Ersatzbrennverlauf nach Barba ergibt. Er eignet sich sehr gut zur Darstellung der konventionellen Dieselmotoren. Einzig die korrekte Abbildung von Betriebspunkten, bei denen das Brennverlaufsmaximum zwar im Premixed-Teil liegt, aber danach noch ein ausgeprägtes lokales Maximum im Diffusions-Teil auftritt, ist nicht möglich, vgl. [10] S. 71.

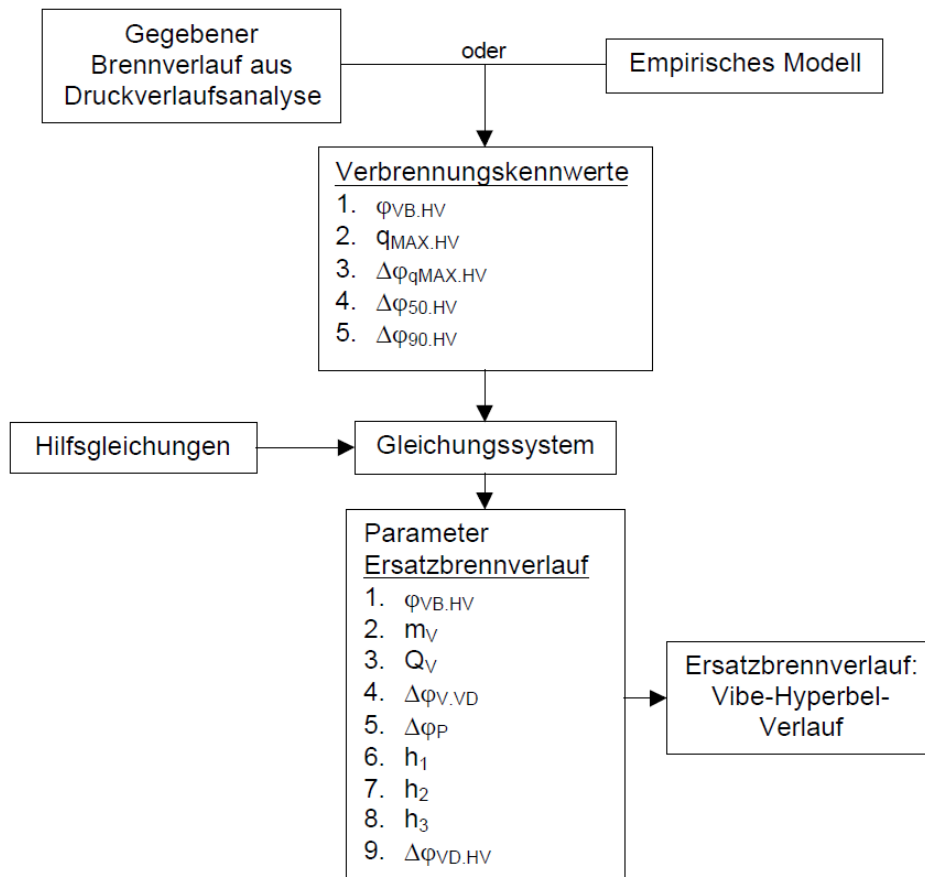


Abbildung 23: Parametrierung des Barba-Ersatzbrennverlaufs über Verbrennungskenngrößen [10] S. 70

Barba stellt auch empirische Funktionen zur Betriebspunktvariation ausgehend von einem vermessenen Referenzbetriebspunkt vor. Dabei wird der Einspritzverzögerungsbetriebspunktunabhängig festgelegt, siehe [10] S. 93. Der physikalische Zündverzögerung ergibt sich aus der mittleren Verdampfungszeit, die sich wiederum aus dem Düsenlochdurchmesser und der mittleren Einspritzstrahlgeschwindigkeit auf Basis der Bernoulli-Gleichung berechnet, vgl. [10] S. 136 und S. 94. Der chemische Zündverzögerung wird über einen Arrhenius-Ansatz nach Wolfer berechnet. Der Einfluss des Luft-Kraftstoffverhältnis auf den Zündverzögerung wird nicht berücksichtigt, vgl. [10] S. 94 und S. 138.

Grundsätzlich geht Barba von kleinen Voreinspritzmengen aus, die vollständig als Premixed-Verbrennung umgesetzt werden, siehe [10] S. 27. Bei sehr geringen Voreinspritzmengen und langen Zündverzögerungen kann es sogar sein, dass die Vorverbrennung nicht beginnt, oder nur ein Teil des Kraftstoffs umgesetzt wird. Durch eine einfache empirische Gleichung wird die freigesetzte Wärme der Vorverbrennung ver-

ringert, sobald der Zündverzug der Voreinspritzung länger als $5 \text{ }^\circ\text{KW}^{38}$ dauert, siehe [10] S. 73 f. Mit längerem Zündverzug nimmt auch die Verbrennungsdauer der Vorverbrennung zu, was ebenfalls berücksichtigt wird, siehe [10] S. 74. Bei zunehmender Voreinspritzmenge nehmen die freigesetzte Wärme und auch die Verbrennungsdauer leicht zu, siehe [10] S. 75. Der Einfluss von Einspritzdruck, Zylinderzusammensetzung (Luftverhältnis und AGR-Rate), Drehzahl und Drall direkt auf die Vorverbrennung wird vernachlässigt, siehe [10] S. 76 f.

Die bei modernen Brennverfahren applizierten Voreinspritzungen führen zu einer Verringerung des Zündverzugs der Haupteinspritzung. Entsprechend gering ist der Premixed-Anteil der Hauptverbrennung bei solchen Brennverfahren. Daher ging Barba bei der Modellentwicklung davon aus, dass sowohl die Lage, als auch die Höhe des Brennverlaufmaximums durch die Diffusionsverbrennung festgelegt wird, vgl. [10] S. 78. Auf Basis folgender Größen wird der Brennverlauf der Hauptverbrennung betriebspunktabhängig variiert, vgl. [10] S. 78 ff:

- Drehzahl
- Raildruck
- Kraftstoffmenge der Haupteinspritzung
- Verhältnis Luftmasse (Frischlufte & unverbrannte Luft des Restgases) zur Masse der gesamten Zylinderfüllung
- Verbrennungsluftverhältnis

Unberücksichtigt bleiben:

- Zündverzug der Haupteinspritzung
- Lage der Haupteinspritzung
- Drall

Barba validierte den Ersatzbrennverlauf und das empirische Modell anhand von Messdaten von drei unterschiedlichen Motoren. Es zeigte sich, dass ausgehend von einer optimalen Anpassung des Ersatzbrennverlaufs an einen ausgewählten Referenzpunkt des jeweiligen Motors³⁹, die relative Abweichung des indizierten Mitteldrucks zwischen +8,7% und -4,3% betrug, siehe [10] S. 95. In der gleichen Größenordnung bewegte sich die relative Abweichung des Spitzendrucks. Noch größere Abweichungen sind zu erwarten, wenn sich vorhandene Vorverbrennungen entsprechend stark auf den Zündverzug der Hauptverbrennung auswirken und sich entsprechend der Premixed-Anteil der Hauptverbrennung deutlich verändert, vgl. [10] S. 100. Da der Zündverzug der Haupteinspritzungen nicht in den empirischen Gleichungen berücksichtigt wird, kann das Modell diesen Mechanismus auch nicht vorhersagefähig abbilden. Da der Einspritzverlauf nicht in die empirischen Gleichungen eingeht, können außerdem nur Betriebspunkte mit gleicher Anzahl an Einspritzungen

³⁸ Barba hat hier eine Kurbelwinkelabhängigkeit und keine Zeitabhängigkeit verwendet, da bei höherer Drehzahl die Turbulenz im Brennraum zunimmt und sich der Kraftstoff deshalb besser mit Luft durchmischt, siehe [10] S. 74.

³⁹ Angaben dazu wurden nur bei einem Motor gemacht. Dort lag der Referenzpunkt im mittleren Last- und Drehzahlbereich, siehe [10] S. 95.

simuliert werden. Die Abbildung einer nur in bestimmten Kennfeldpunkten applizierten Voreinspritzung ist nicht ohne weiteres möglich⁴⁰.

Abschließend ein paar Gedanken, hinsichtlich der Eignung der beschriebenen Ersatzbrennverläufe zur Abbildung der homogenen oder teilhomogenen Dieselerbrennung im Rahmen der Arbeitsprozessrechnung. Die Verwendung eines Polygon-Hyperbelbrennverlaufs erscheint nicht gänzlich vorteilhaft. Zwar eignet sich die Hyperbel recht gut zur Abbildung des hinteren Teils des Brennverlaufs, aber den vorderen Teil des Brennverlaufs könnte man nur über einen linearen Anstieg darstellen⁴¹, ggf. noch in Verbindung mit einem kurzen Plateau vor dem Übergang zum Hyperbel-Teil. Dies entspricht nicht ganz dem typischen Verlauf der Hochtemperaturverbrennung, vgl. Abbildung 14. Die Niedertemperaturverbrennung müsste über einen zusätzlichen Vibe-Term dargestellt werden, womit sich die Parameteranzahl zusätzlich erhöhen würde. Schon eher wäre die Verwendung eines zweifach-Vibe Brennverlaufs denkbar. Mit Hilfe des ersten Vibe-Terms könnte man die Niedertemperaturverbrennung abbilden, mit dem zweiten Term die Hochtemperaturverbrennung. Allerdings müsste man Abweichungen im Bereich des Verbrennungsendes akzeptieren. Der Barba-Ersatzbrennverlauf könnte – nach einer Anpassung – zur Darstellung der Hochtemperaturverbrennung besser geeignet sein als eine Vibe-Funktion, da einige homogene- bzw. teilhomogene Betriebspunkte eine sehr lange Ausbrandzeit haben, deren qualitativer Verlauf sich jedoch vom diffusiven Ausbrand unterscheidet, vgl. Kapitel 5.4. Zur besseren Darstellung erscheint es daher sinnvoll den Abstand zwischen Brennverlaufsmaximum und Übergangspunkt im Vergleich zum ursprünglichen Modellentwurf deutlich zu erhöhen. Dies würde dazu führen, dass auch ein Großteil der abfallenden Vibe-Flanke zur Darstellung des Brennverlaufs genutzt würde und erst gegen Verbrennungsende auf die Hyperbel-Funktion gewechselt wird, um damit einen extrem niedrigen und lang andauernden Ausbrand darzustellen. In Summe müssten drei⁴² Vibe-Parameter zur Anpassung der Vibe-Funktion an die gemessene Niedertemperaturverbrennung und die fünf Verbrennungskennwerte des Barba-Ersatzbrennverlaufs zur Anpassung an die Hochtemperaturverbrennung abgestimmt werden. Dies ist momentan sicherlich die beste Variante, eine homogene Dieselerbrennung über Ersatzbrennverläufe darzustellen.

Bezüglich der empirischen Gleichungen zur Variation der fünf Verbrennungskennwerte muss jedoch berücksichtigt werden, dass diese anhand von Messungen konventioneller Dieselerbrennverfahren entwickelt wurden. Beispielsweise ändert sich abhängig vom Einspritzzeitpunkt der qualitative Verlauf der Verbrennung bei den voll- und teilhomogenen Brennverfahren sehr stark, was in Barbas Gleichungen nicht berücksichtigt wird. Das empirische Modell kann somit nicht zur Untersuchung von voll- oder teilhomogenen Brennverfahren verwendet werden.

⁴⁰ Man muss die Vibe-Vorverbrennung manuell ausschalten.

⁴¹ In dem man bei der Abstimmung des Polygon-Hyperbelbrennverlaufs die Premixed-Verbrennung quasi ausparametriert (deaktiviert).

⁴² Die Niedertemperaturverbrennung sieht qualitativ fast immer gleich aus, weshalb der Formfaktor m und der Abstimmkoeffizient a konstant sind, vgl. Gleichungen (3-1) und (3-2). Somit muss lediglich Brennbeginn, Brenndauer und die insgesamt während der Niedertemperaturverbrennung freigesetzte Wärmemenge festgelegt werden.

3.2 Phänomenologische Modellierung der konventionellen Dieselverbrennung

Die ersten – im historischen Kontext relevanten – Veröffentlichungen von phänomenologischen Ansätzen zur Abbildung der konventionellen Dieselverbrennung stammen aus dem Jahre 1976⁴³, vgl. [Kapitel 3.2.3](#). Zum damaligen Zeitpunkt stellten sie jedoch noch eine Randerscheinung dar. Erst mit der Einführung und Verbreitung von Desktop-PCs Mitte der 1980er Jahre entwickelte sich langsam ein Interesse an solchen Verbrennungsmodellen. Aufgrund der begrenzten Rechenleistungen entwickelten sich unterschiedlich detaillierte Modellierungsansätze, die sich in die nachfolgend genannten Gruppen einteilen lassen und in den folgenden Unterkapiteln detailliert vorgestellt werden:

- Gasstrahlmodelle
- Zeitskalenmodelle
- Paket-Modelle
- Scheiben-Modelle

3.2.1 Gasstrahlmodelle

Die nachfolgende Beschreibung des Modellansatzes orientiert sich in erster Linie an der Arbeit von de Neef [39], welche die Grundlagen des Modells am ausführlichsten darstellt. Daneben existieren unter anderem auch Veröffentlichungen von Dent und Mehta [41], Hohlbaum [73] bzw. Merker, Hohlbaum und Rauscher [102], Zhang [169] und Eilts [47], in denen ebenfalls Gasstrahlmodelle vorgestellt werden.

De Neef hat im Rahmen seiner Arbeit zunächst die Auswirkung einer einzelnen Voreinspritzung auf den Brennverlauf und im Weiteren auf Wirkungsgrad, Schadstoffemissionen und Verbrennungsgeräusch experimentell untersucht. Zur ausführlicheren Betrachtung entwickelte er ein bewusst einfach gehaltenes phänomenologisches Verbrennungsmodell. Thermodynamisch gesehen handelt es sich dabei um ein zwei- bzw. dreizoniges Modell, je nachdem ob man einen Betriebspunkt mit oder ohne Voreinspritzung simuliert, siehe [39] S. 4.1. Es existiert eine unverbrannte Brennraumzone (Frischluf- und Restgas) und – ab Brennbeginn – jeweils eine verbrannte Zone für die Vor- und Hauptverbrennung. Die Luft zur Verbrennung innerhalb der verbrannten Zonen wird der Brennraumzone entnommen. Ein Massenaustausch zwischen den beiden verbrannten Zonen findet nicht statt. Um dennoch die Beeinflussung der Haupt- durch die Vorverbrennung zu modellieren, wird mit Hilfe einer empirischen Gleichung der „Überlappungsgrad“ zwischen Vor- und Haupteinspritzung berechnet, siehe [39] S. 4.21. Dieser ist in erster Linie abhängig vom Abstand zwischen Vor- und Haupteinspritzung und dem Drallniveau innerhalb des Zylinders, siehe [Abbildung 24](#). Im weiteren Verlauf wird die homogene Mischungstemperatur zwischen dem überlappenden Anteil der Voreinspritz- und der Haupteinspritzzone

⁴³ Es gibt auch frühere Veröffentlichungen bspw. [7], [163] und [164]. Diese Modellierungsansätze sind jedoch sehr einfach und würden nach heutigen Maßstäben teilweise auch nicht als phänomenologisch bezeichnet werden. Austen und Lyn gehen beispielsweise von einer linearen Abnahme der Verbrennungsrate in einzelnen Kraftstoffscheiben aus, siehe [7] S. 541. Whitehouse und Way berechnen die Vermischung von Kraftstoff und Luft über eine einfache mathematische Gleichung und berechnen den Brennverlauf dann anhand der aufbereiteten, aber noch unverbrannten Kraftstoffmasse, in Kombination mit einem Arrhenius-Term, siehe [163] S. 2 f. Das modifizierte Modell berücksichtigt die Ausbreitung des Kraftstoffstrahls im Brennraum etwas detaillierter, siehe [164] S.1 ff. Dennoch ist es wesentlich einfacher aufgebaut als die in [Kapitel 3.2.1](#) beschriebenen Gasstrahlmodelle.

berechnet und diese als Temperatur der Haupteinspritzzone übernommen, vgl. [39] S. 4.20. Es findet jedoch kein Massenaustausch zwischen den beiden Zonen statt. Durch die Temperaturerhöhung der Haupteinspritzzone wird die Verbrennung in dieser beschleunigt.

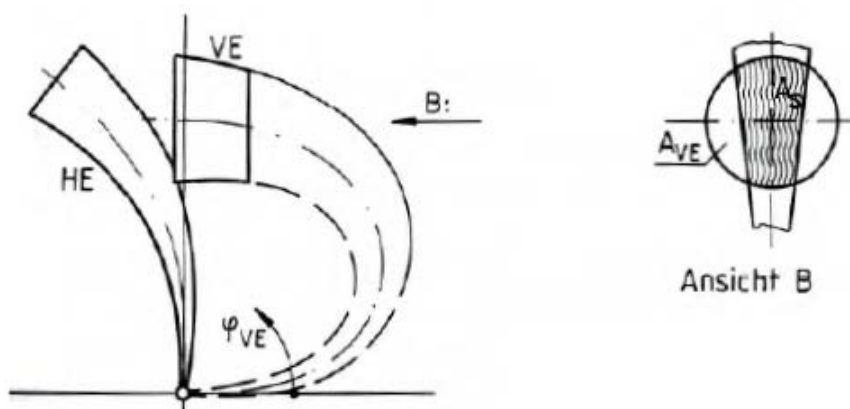


Abbildung 24: Darstellung der Einspritzstrahlüberlappung zwischen VE und HE [39] S. 4.21

Bei der Berechnung der Gemischaufbereitung wird davon ausgegangen, dass der Tropfenzerfall und die Verdampfung sehr schnell ablaufen und das so entstehende Aerosol als stationärer Gasstrahl, in Anlehnung an die Freistrahtheorie von Abramovich [1], modelliert werden kann⁴⁴. Dabei durchläuft die Front des Einspritzstrahles den Brennraum [39] S. 2.2. Über empirische Gleichungen wird für jede Position, die der Strahl bereits durchlaufen hat, ein stationäres Geschwindigkeits- und Kraftstoffkonzentrationsprofil vorgegeben, vgl. [39] S. 2.6 f und [1] S. 276 f. Der Einfluss von Luftbewegung im Zylinder (Drall) kann dabei vereinfacht berücksichtigt werden, vgl. [39] S. 2.23. Aus dem Konzentrationsprofil ergibt sich automatisch ein Lambda-Verteilungsprofil:

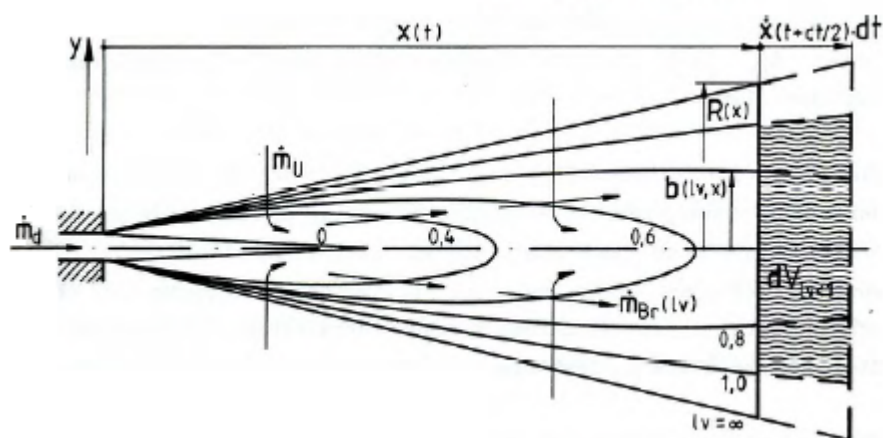


Abbildung 25: Schematische Lambda-Verteilung eines Einspritzstrahls [39] S. 3.9

⁴⁴ Der Gasstrahl besteht in der Modellvorstellung aus einem vollständig flüssigen Anfangsstrahl und einem vollständig dampfförmigen Hauptstrahl, vgl. [39] S. 2.1 und S. 3.7.

Der Gasstrahl kann somit in mehrere Lambda-Bereiche⁴⁵ mit festen Lambda-Grenzen unterteilt werden. De Neef geht von einer stöchiometrischen Verbrennung aus, vgl. [39] S. 3.11. Aus diesem Grund berechnet er in jedem Rechenschritt die stöchiometrische Kraftstoffaufbereitungsrate über folgende Gleichung, siehe [39] S. 3.12:

$$\frac{dm_{\text{Krst.,stö.,aufb.}}}{dt} = \lambda_u \cdot \frac{dm_{\text{Krst.}}(\lambda_u)}{dt} + \int_{\lambda=\lambda_u}^1 \frac{dm_{\text{Krst.}}(\lambda)}{dt} \cdot d\lambda \quad (3-8)$$

$dm_{\text{Krst.,stö.,aufb.}}/dt$:	Änderungsrate der stöchiometrisch aufbereiteten Kraftstoffmasse [kg/s]
λ_u :	Untere Lambda-Grenze [-]
$dm_{\text{Krst.}}(\lambda_u)/dt$:	Änderungsrate der Kraftstoffmasse welche die untere Lambda-Grenze überschreitet [kg/s]
$dm_{\text{Krst.}}(\lambda)/dt$:	Änderungsrate der Kraftstoffmasse welche die jeweilige Lambda-Grenze überschreitet [kg/s]

Die untere Lambda-Grenze λ_u ergibt sich aus dem Übergang zwischen Anfangs- und Hauptstrahl und wurde von de Neef auf den Wert 0,32 festgelegt, da die Verdampfung des Kraftstoffs – bei den im Brennraum vorliegenden Randbedingungen – vollständig abgeschlossen ist, wenn auf der Strahlachse dieses Luftverhältnis erreicht ist, siehe [39] S. 3.11. Sobald Kraftstoff die untere Lambda-Grenze überschreitet sind entsprechend 32% des Kraftstoffs sofort stöchiometrisch aufbereitet. Die restlichen 68% werden im weiteren Verlauf beim Überschreiten der nachfolgenden Lambda-Grenzen sukzessive aufbereitet, bis der Kraftstoff die stöchiometrische Lambda-Grenze erreicht hat, vgl. [39] S. 3.12. Der Kraftstoffmassenstrom durch die verschiedenen Lambda-Grenzen ergibt sich aus einer Massenbilanzierung, unter Berücksichtigung des zeitlich konstanten Einspritzmassenstroms und dem innerhalb des Lambda-Bereichs vorhandenen Kraftstoff, siehe [39] S. 3.20.

Es erfolgt keine separate Zündverzugsberechnung, sondern es wird eine untere und obere Zündgrenze festgelegt, innerhalb der eine Verbrennung stattfinden kann. De Neef verwendet als untere Zündgrenze ebenfalls 0,32, siehe [39] S. 3.10. Grundsätzlich kann jedoch über diesen Parameter der Zündverzug des Modells abgestimmt werden, vgl. [73] S. 48. Wichtig für das Modellverständnis ist die Tatsache, dass als Referenzpunkt für die untere Zündgrenze die Strahlachse verwendet wird. Eine Verbrennung tritt also erst ein, wenn die Strahlfront auf der Strahlachse ein Luftverhältnis von 0,32 erreicht. Zu diesem Zeitpunkt ist das Luft-Kraftstoffverhältnis am Strahlrand bereits deutlich höher und somit ist also auch schon eine gewisse Menge an Kraftstoff stöchiometrisch aufbereitet. Über diesen Mechanismus wird die Premixed-Verbrennung dargestellt.

Da mit zunehmend magerem Gemisch die Verbrennung langsamer abläuft und schließlich erlischt, wird eine obere Zündgrenze bei 1,7 festgesetzt, siehe [39] S. 3.10. Der Kraftstoffmassenanteil des Gasstrahls, der diese obere Zündgrenze durchströmt, wird von der stöchiometrisch aufbereiteten Kraftstoffmasse wieder abgezogen.

⁴⁵ De Neef verwendet in [39] den Begriff „Zone“, allerdings nicht im Sinne der in [Kapitel 2.5](#) beschriebenen Definition. Daher wurde hier der Begriff „Bereich“ verwendet.

Bei einem ausgebildeten Einspritzstrahl ergibt sich somit in Hinblick auf die Gemischbildung folgende Situation:

- Der Kraftstoffanteil, der sich unterhalb von $\lambda = 0,32$ befindet, kann nicht verbrennen.
- Zwischen $0,32 < \lambda \leq 1$ wird die maximale Brennrate durch den stöchiometrisch aufbereiteten Kraftstoffanteil begrenzt, siehe Gleichung (3-8).
- Der Kraftstoffanteil zwischen $1 < \lambda \leq 1,7$ kann theoretisch vollständig verbrennen
- Kraftstoff, der sich oberhalb der oberen Zündgrenze ($\lambda = 1,7$) befindet, kann nicht mehr verbrennen.

Ab dem Zeitpunkt des Einspritzendes breitet sich von der Düsenöffnung ein zweiter, „negativer“ Gasstrahl aus, dessen stöchiometrisch aufbereitete Kraftstoffmasse vom vollständig ausgebildeten ersten Gasstrahl abgezogen wird:

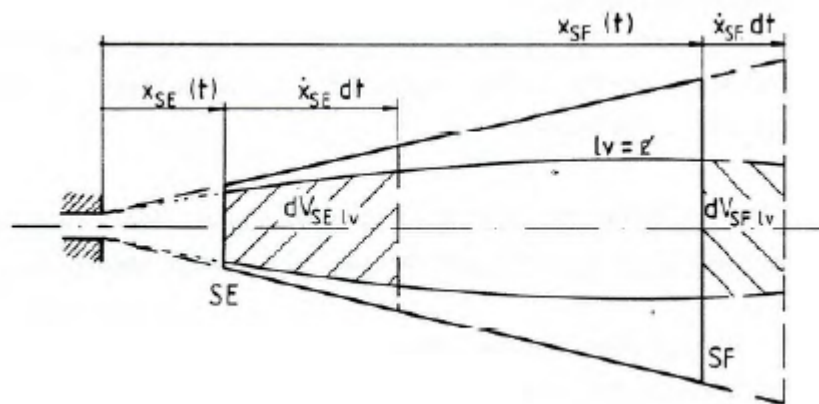


Abbildung 26: Schematische Darstellung von Strahlfront (SF) und Strahlende (SE) kurz nach Einspritzende [39] S. 3.12

In Abhängigkeit der aufbereiteten Kraftstoffmasse, wird die chemische Umsatzrate über einen Arrhenius-Ansatz berechnet. Wenn diese nicht ausreichend hoch ist, um die gesamte aufbereitete, aber noch unverbrannte, Kraftstoffmasse zu verbrennen, ist die Reaktion zu diesem Zeitpunkt reaktionskinetisch kontrolliert. Im anderen Fall hängt die momentane Brennrate folglich von der Gemischbildungsrate ab.

Schwachpunkte der Gasstrahlmodelle sind:

- Der quasistationäre Zustand ergibt sich aus der Annahme einer konstanten Einspritzrate, vgl. [39] S. 2.2 und [47] S. 134. Bei den heutigen Genauigkeitsanforderungen an Verbrennungsmodelle und in Hinblick auf die betriebspunktabhängige Einspritzverlaufsformung (rate-shaping) ist diese Vereinfachung nicht mehr zulässig.
- Die Zündverzugsberechnung stützt sich auf der Annahme, dass die chemischen Prozesse bei der Zündverzugsberechnung vernachlässigt werden können und das physikalische Mischungsprozessen den Zündverzug maßgeblich dominieren, vgl. [39] S. 3.10. Diese Annahme ist ebenfalls nicht zulässig, siehe Kapitel 2.2.

- Bei der Berechnung der chemischen Umsatzrate über die Arrhenius-Gleichung wird der Einfluss der Turbulenz auf die Verbrennung vernachlässigt, vgl. [39] S. 3.18.
- Die Verdampfung wird vernachlässigt⁴⁶, siehe [39] S. 3.11.

3.2.2 Zeitskalenmodelle (Frequenzansatz)

Als nächstes sollen die Zeitskalenmodelle⁴⁷ betrachtet werden. Weisser und Boulouchos stellten diesen Ansatz erstmals 1995 vor [162]. Barba stellte neben seinem empirischen Ersatzbrennverlaufsmodell, siehe [Kapitel 3.1](#), auch ein phänomenologisches Zeitskalenmodell vor, siehe [9] und [10] S. 102 ff, welches von Warth et al. modifizierte wurde [161].

Die Veröffentlichung von Weisser und Boulouchos enthält neben dem Verbrennungsmodell auch ein Modell zur Berechnung der Stickoxidbildung im Dieselmotor. Dabei wird die Entstehung von thermischen NO über einen chemischen Reaktionsmechanismus abgebildet, bei dem 23 Spezies über 77 Reaktionen reagieren. Da die Bildung von thermischen NO stark von Temperatur und Gaszusammensetzung im Brennraum abhängt, wurde der Brennraum in folgende Zonen unterteilt:

- Frischluftzone (Besteht ab Rechenbeginn)
- Gemischzone (Entsteht während der Kraftstoffverdampfung)
- Mehrere Rauchgaszonen (Werden im Laufe der Verbrennung gebildet)

Um akzeptable Rechenzeiten zu erzielen, wurde die Verbrennung vergleichsweise einfach aber dennoch phänomenologisch modelliert. Der Kraftstoffstrahl wird in axialer Richtung in Segmente⁴⁸ diskretisiert. Dabei handelt es sich im thermodynamischen Sinne nicht um Zonen, da hier lediglich Größen des flüssigen Kraftstoffs bilanziert werden, wie beispielsweise Masse und Temperatur. Bei Eintritt in den Brennraum werden auf Basis des Einspritzverlaufs die Segmentgeschwindigkeit, sowie ein repräsentativer Sauter-Durchmesser aller Tropfen eines Segmentes, berechnet. Im weiteren Verlauf wird über eine empirische Gleichung nach Dent, vgl. [40] S. 4, die Abbremsung der Segmente und in Folge die Vermischung mit Luft berechnet. Die Verdampfungsrate wird nach Zhang, vgl. [169] S. 3 ff, auf Basis der Temperatur und Zusammensetzung der Gemischzone berechnet. Die verdampfende Kraftstoffmasse, sowie die entsprechende stöchiometrische Luftmenge, werden dabei der Gemischzone zugeführt⁴⁹. Der Zündverzug wird über ein Zündintegral berechnet, wobei der aktuelle Zündverzug als Funktion von Druck und Temperatur über einen modifizierten Ansatz nach Stringer berechnet wird, siehe [162] S.28. Die Verbrennung wird auf Basis einer charakteristischen Zeit berechnet, wobei unterschiedliche Ansätze zur Unterscheidung von Premixed- und Diffusionsverbrennung verwendet

⁴⁶ Zhang berücksichtigt in seinem Gasstrahlmodell die Verdampfung. Aus seinen Untersuchungen zog er jedoch den Schluss, dass die (konventionelle) Dieselverbrennung nicht von der Verdampfungsrate limitiert wird, siehe [169] S. 7.

⁴⁷ Alternativ: Modelle mit Frequenzansatz.

⁴⁸ In [162] wird der Begriff „Tropfenpakete“ verwendet. Der Begriff „Paket“ wird in verschiedenen Veröffentlichungen mit unterschiedlichen Definitionen verwendet. Da die in [Kapitel 3.2.3](#) behandelten Paket-Modelle ein Paket anders definieren, wurde hier – analog zu Barbas phänomenologischem Modell – der Begriff „Segment“ verwendet, vgl. [10] S. 106.

⁴⁹ Die Luft wird von der Frischluftzone in die Gemischzone übergeschoben.

werden, siehe [162] S.28 f. Der Kehrwert dieser charakteristischen Zeiten, multipliziert mit der zur Verfügung stehenden Kraftstoffmasse, ergibt schließlich die Brennrate. Da die Premixed-Verbrennung in erster Linie reaktionskinetisch kontrolliert ist, wird die Zündverzugszeit als Zeitskala verwendet, siehe Gleichung (3-9). Die Aufbereitungsfunktion berücksichtigt den Umstand, dass es eine gewisse Zeit benötigt, bis Luft und Kraftstoff nach der Verdampfung vollständig durchmischt sind.

$$\frac{dm_{B,Pre}}{dt} = c_{Pre} \cdot \frac{1}{\tau_{ZV}} \cdot f_{Aufbereitung} \cdot m_{Krst.,Pre,verfügbar} \quad (3-9)$$

$dm_{B,Pre}/dt$: Im aktuellen Zeitschritt über die Premixed-Verbrennung umgesetzte Brennstoffmasse [kg/s]

c_{Pre} : Abstimmparameter der Premixedverbrennung [-]

τ_{ZV} : Zündverzugszeit bei den aktuellen Randbedingungen [s]

$f_{Aufbereitung}$: Aufbereitungsfunktion [-]

$m_{Krst.,Pre,verfügbar}$: Für die Premixed-Verbrennung verfügbare Kraftstoffmasse [kg]

Der Brennverlauf wird während einer Diffusionsverbrennung durch die Gemischbildung beeinflusst, bei der es sich um einen turbulenten Diffusionsvorgang handelt. Die Mischungsfrequenz dieses Vorgangs beschreiben Weisser und Boulouchos über den Quotienten aus einer turbulenten Viskosität und dem Quadrat einer charakteristischen Länge⁵⁰:

$$f_{Diff} = \frac{1}{\tau_{char,Diff}} = \frac{\nu_{Diff}}{l_{char,Diff}^2} \quad (3-10)$$

f_{Diff} : Mischungsfrequenz zur Beschreibung der Diffusionsverbrennung [1/s]

$\tau_{char, Diff}$: Charakteristische Zeit der Diffusionsverbrennung [s]

ν_{Diff} : Turbulente (kinematische) Viskosität zur Beschreibung der Diffusionsverbrennung [m²/s]

$l_{char,Diff}$: Charakteristisches Längenmaß der Diffusionsverbrennung [m]

Die turbulente Viskosität ergibt sich aus dem Produkt einer Turbulenz erzeugenden Geschwindigkeit und einer weiteren charakteristischen Länge. Weisser und Boulouchos modellieren zwei unterschiedliche turbulenzgenerierende Phänomene. Zum einen die aufgrund der Kolbenbewegung erzeugte Turbulenz (Ladungsbewegung) und zum anderen die durch den Einspritzimpuls erzeugte Turbulenz, siehe Gleichung (3-11). Die charakteristische Länge für die Berechnung der Ladungsbewegung ist der Kompressionshub, während es bei der Berechnung der Einspritzung der Durchmesser eines einzelnen Düsenlochs ist⁵¹.

⁵⁰ Entspricht quasi einer charakteristischen Fläche.

⁵¹ Die Einspritzgeschwindigkeit lässt sich über die Bernoulli-Gleichung berechnen und ist umgekehrt proportional zum quadrierten Düsenlochdurchmesser. Verkleinert man den Düsenlochdurchmesser bei konstanter Einspritzrate, vergrößert sich somit das Produkt aus Einspritzgeschwindigkeit und Lochdurchmesser. Die turbulente Viskosität und in Folge auch die Brennrate nehmen zu, vgl. Gleichungen (3-10) und (3-13).

3 Modellscreening

$$v_{\text{Diff}} = v_{\text{L.bew}} \cdot l_{\text{char,L.bew}} + v_{\text{Einspr.}} \cdot l_{\text{char,Einspr.}} = c_m \cdot h_{\text{Komp}} + v_{\text{Einspr.}} \cdot d \quad (3-11)$$

$v_{\text{L.bew}}$:	Geschwindigkeit zur Beschreibung der Ladungsbewegung [m/s]
$l_{\text{char,L.bew}}$:	Charakteristische Länge zur Beschreibung der Ladungsbewegung [m]
$v_{\text{Einspr.}}$:	Einspritzgeschwindigkeit [m/s]
$l_{\text{char,Einspr.}}$:	Charakteristische Länge zur Beschreibung des Einspritzimpulses [m]
c_m :	mittlere Kolbengeschwindigkeit [m/s]
$h_{\text{Komp.}}$:	Kompressionshöhe [m]
d_D :	Düsenlochdurchmesser [m]

Vereinfachend gehen Weisser und Boulouchos von einer homogenen Verteilung der Turbulenz im Brennraum aus. Das für den Frequenzansatz benötigte charakteristische Längenmaß berechnet sich somit aus dem Brennraumvolumen, dem globalen Luftverhältnis und der Einspritzlochanzahl:

$$l_{\text{char,Diff}} = \left(\frac{V_{\text{Zyl}}}{\lambda \cdot n_D} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (3-12)$$

V_{Zyl} :	Aktuelles Zylindervolumen [m ³]
λ :	globales Luftverhältnis [-]
n_D :	Düsenlochanzahl [-]

Die Brennrate der Diffusionsverbrennung ergibt sich schließlich über folgende Gleichung:

$$\frac{dm_{\text{B,Diff}}}{dt} = c_{\text{Diff}} \cdot f_{\text{Diff}} \cdot f_{\text{A,turb}} \cdot m_{\text{Krst.,Diff,verfügbar}} \quad (3-13)$$

$dm_{\text{B,Diff}}/dt$:	Im aktuellen Zeitschritt über die Diffusionsverbrennung umgesetzte Brennstoffmasse [kg/s]
c_{Diff} :	Abstimmparameter der Diffusionsverbrennung [-]
$f_{\text{A,turb}}$:	Flächenkorrekturfaktor [-]
$m_{\text{Krst.,Diff,verfügbar}}$:	Für die Diffusionsverbrennung verfügbare Kraftstoffmasse [kg]

Um die Gemischbildung vollständig zu beschreiben, ist auch die zur Verfügung stehende Kraftstoffmasse in Gleichung (3-13) enthalten. Der Flächenkorrekturfaktor $f_{\text{A,turb}}$ berücksichtigt die Tatsache, dass die turbulente Durchmischung zu einer zerklüfteten Gemischoberfläche führt, was über Gleichung (3-12) nicht ausreichend abgebildet wird. Betrachtet man die Gleichungen (3-10), (3-12) und (3-13) gemeinsam, kann man außerdem nachvollziehen, dass die Brennrate mit steigendem globalem Luftverhältnis ebenfalls zunimmt.

Die Kraftstoffmasse der Gemischzone ergibt sich aus einer Massenbilanzierung, bei welcher die aktuell verdampfende, sowie die gerade verbrennende Kraftstoffmasse, berücksichtigt werden. Innerhalb der Gemischbildungszone wird die Kraftstoffmasse in einen Premixed- und einen Diffusionsanteil aufgeteilt. Vor Brennbeginn wird der gesamte innerhalb der Gemischzone vorliegende Kraftstoff der Premixed-Verbrennung zugeordnet. Die erst nach dem Brennbeginn verdampfende Kraftstoffmasse wird, mit steigendem Verbrennungsfortschritt der Vormischverbrennung, zunehmend der Diffusionsverbrennung zugeordnet. Weisser und Boulouchos begrün-

det dies damit, dass sich eine Diffusionsverbrennung nur in den Bereichen ausbilden kann, in denen durch die Vormischverbrennung entsprechende Randbedingung geschaffen wurden, siehe [162] S. 30. Der durch Verbrennung umgesetzte Kraftstoff wird – mit dem entsprechenden stöchiometrischen Luftanteil – einer Rauchgaszone zugeführt. Im weiteren Verlauf werden in diskreten Zeitabständen neue Rauchgaszonen initialisiert. Zusätzlich findet eine Zumischung von Luft aus der Frischluftzone in alle vorhandenen Rauchgaszonen statt, bis diese jeweils auf das globale Luftverhältnis abgemagert sind. Ein Austausch zwischen den Rauchgaszonen findet nicht statt. Die Erzeugung unterschiedlicher Rauchgaszonen wurde von Weisser und Boulouchos nur zur Berechnung der Stickoxidemissionen modelliert. Das dies zur Berechnung des Brennverlaufs nicht zwingend notwendig ist, zeigt das phänomenologische Verbrennungsmodell nach Barba [9], [10], welches ebenfalls auf einem Frequenzansatz beruht.

Das von Barba vorgestellte Verbrennungsmodell dient zur Abbildung und Vorhersage des Brennverlaufs von Common-Rail Motoren mit maximal einer Voreinspritzung. Es handelt sich dabei um ein 1-Zonen Modell, siehe [10] S. 102, was ausreichend ist, da auf die Berechnung von Schadstoffemissionen verzichtet wird. Die Rechenschrittweite beträgt $0,2^\circ\text{KW}$, siehe [10] S. 103. Es besteht aus vier Untermodellen zur Berechnung von Verdampfung, Zündverzug, Premixed-Verbrennung und Diffusionsverbrennung. Wie schon bei Weisser und Boulouchos werden, unter Berücksichtigung des Einspritzverlaufs, Austrittsgeschwindigkeit sowie ein repräsentativer Tropfendurchmesser (Sauterdurchmesser) berechnet, vgl. [10] S. 105. Zwar diskretisiert Barba den Kraftstoffstrahl ebenfalls in axiale Segmente, allerdings beschränkt er sich dabei auf die Massenbilanzierung. Eine Energiebilanzierung mit einer damit einhergehenden Berechnung der Temperatur des flüssigen Kraftstoffs erschien ihm nicht notwendig, da die Diffusionsverbrennung in erster Linie durch die Vermischung von Kraftstoff und Luft begrenzt wird und nicht durch die Verdampfung, vgl. [10] S. 106. Somit hielt er es für ausreichend einen empirischen d^2 -Ansatz zur Berechnung der Verdampfung zu verwenden, der von einer linearen Abnahme des quadrierten Tropfendurchmessers mit der verstrichenen Zeit nach Einspritzbeginn ausgeht, siehe Gleichung (3-14). Eine Kraftstofftemperatur wird dementsprechend nicht benötigt.

$$d_{\text{Tr}}^2 = d_{\text{Tr,Einspr.}}^2 - \beta \cdot (t - t_{\text{Einspr.,Tr}}) \quad (3-14)$$

d_{Tr} : Tropfendurchmesser im aktuellen Zeitschritt [m]

$d_{\text{Tr,Einspr.}}$: Tropfendurchmesser bei der Einspritzung [m]

β : Abstimmparameter [m^2/s]

$t_{\text{Einspr.,Tr}}$: Zeitpunkt der Einspritzung des Tropfens (Segments) [s]

Der in allen Segmenten verdampfende Kraftstoff wird aufsummiert und der Brennraumzone zugeführt, siehe Abbildung 27. Die insgesamt in der Brennraumzone vorliegende Kraftstoffmasse ist die Eingangsgröße für die nachfolgenden Berechnungen, vgl. [10] S. 109 ff. In Barbas Modellvorstellung vermischt sich der vor dem Brennbeginn verdampfte Kraftstoff mit Luft und bildet für jeden Einspritzstrahl eine Gemischwolke. Diese Wolken sind keine eigenständige thermodynamische Zonen, sondern lediglich Massenbilanzräume innerhalb der Brennraumzone⁵². Entsprechend

⁵² Auch wenn Barba vereinzelt den Begriff Premixed-Zone statt Gemischwolke verwendet, weist er explizit darauf hin, dass in den Gemischwolken die Massenmitteltemperatur vorliegt, siehe [10] S. 110.

der aktuell verdampfenden Kraftstoffmasse, wird eine proportionale Menge an Brennraumluft – bestehend aus Frischluft und eventuell vorhandenem Restgas – den Gemischwolken zugeordnet. Aufgrund der diffusiven Ausbreitung der Gemischwolken im Brennraum findet eine weitere Beimischung von Brennraumluft statt. Das Luft-Kraftstoffverhältnis in den Gemischwolken nimmt somit während des Zündverzugs kontinuierlich zu, siehe Abbildung 28. Eine Vermischung der Gemischwolken untereinander wird bei dem Modell nicht berücksichtigt.

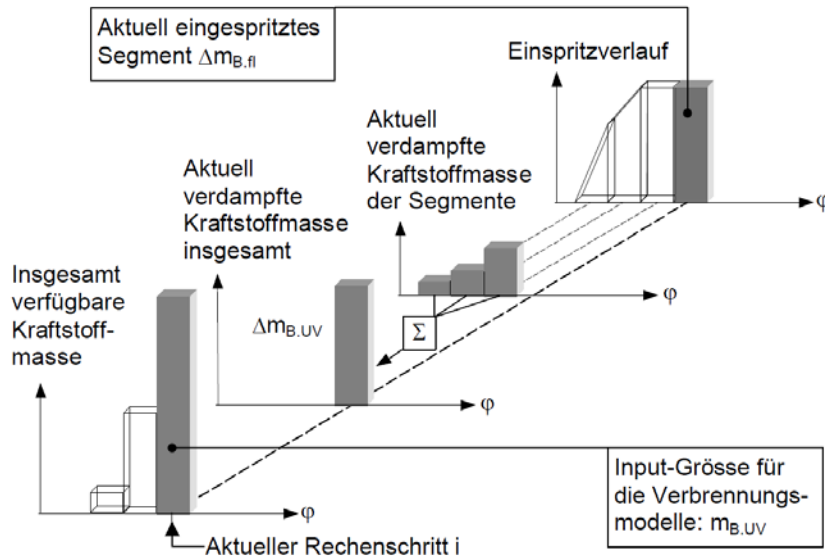


Abbildung 27: Darstellung der Kraftstoffbilanzierung im phänomenologischen Barba Modell [10] S. 107

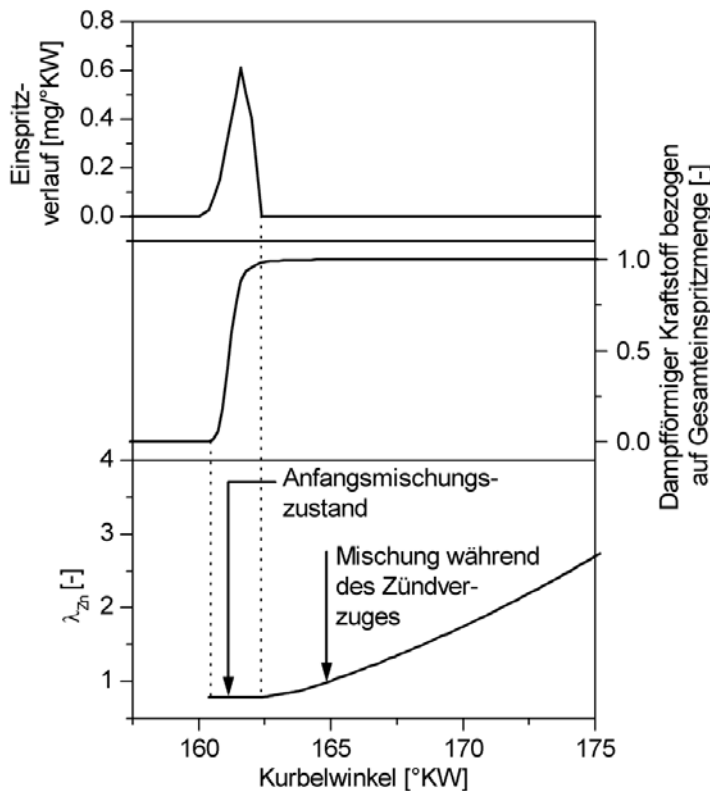


Abbildung 28: Veränderung des Luftverhältnis in den Gemischwolken aufgrund der Beimischung [10] S. 113

Analog zu seinem empirischen Ersatzbrennverlaufsmodell verwendet Barba zur Berechnung des Zündverzugs einen Arrhenius-Term nach Wolfer, vgl. [10] S. 133 ff, der jedoch leicht abgeändert wurde, siehe Gleichung (3-15). Zum einen geht das Luftverhältnis der Gemischwolken in die Berechnung mit ein, zum anderen wird der physikalische Zündverzug hinzuaddiert, der sich aus Gleichung (3-16) ergibt.

$$\tau_{ZV} = \tau_{ZV,phy.} + c_{ZV,chem.} \cdot \left(\frac{p_{Zyl}}{p_0} \right)^{c_2} \cdot \lambda_{Gw.}^{c_3} \cdot e^{\frac{T_{Akt.}}{T_{Zyl}}} \quad (3-15)$$

$\tau_{ZV,phy.}$:	physikalische Zündverzugszeit [s]
$c_{ZV,chem.}$:	Parameter zur Abstimmung des chemischen Zündverzugs [s]
p_{Zyl} :	Druck im Zylinder im aktuellen Rechenschritt [Pa]
p_0 :	Referenzdruck (1 bar laut [10] S. 135) [Pa]
c_2 :	Parameter zur Abstimmung des Druckeinflusses [-]
$\lambda_{Gw.}$:	Luftverhältnis der Gemischwolken [-]
c_3 :	Parameter zur Abstimmung des Gemischeinflusses [-]
$T_{Akt.}$:	Aktivierungstemperatur [K]
T_{Zyl} :	Massenmitteltemperatur im Zylinder im aktuellen Rechenschritt [K]

$$\tau_{ZV,phy.} = c_{ZV,phy.} \cdot v_{Einspr.,m}^{-1,68} \cdot d_{D,eff}^{0,88} \quad (3-16)$$

$c_{ZV,phy.}$:	Parameter zur Abstimmung des physikalischen Zündverzugs [$m^{0,8}/s^{2,68}$]
$v_{Einspr.,m}$:	Mittlere Einspritzgeschwindigkeit [m/s]
$d_{D,eff}$:	Effektiver Düsenlochdurchmesser [m]

Da sich Temperatur und Druck im Brennraum laufend verändern, ist es zur Berechnung des Zündverzugs nicht ausreichend Gleichung (3-15) einmalig zu lösen. Stattdessen wird die Gleichung in jedem Rechenschritt gelöst und das Ergebnis aufintegriert. Sobald das Integral einen gewissen Grenzwert (bei Barba beträgt er 1, siehe [10] S. 135) überschritten hat, beginnt die Verbrennung:

$$\int_{t_{EB}}^{t_{BB}} \frac{1}{\tau_{ZV}} dt = T_{ZV} = 1 \quad (3-17)$$

t_{EB} :	Zeitpunkt des Einspritzbeginns [s]
T_{ZV} :	Zündverzugsgrenze [-]

Die Berechnung der komplexen Prozesse des Zündverzugs über ein einzelnes Zündintegral stellt eine gängige Verallgemeinerung und Vereinfachung dar. In Barbass Modell, wie auch in den meisten anderen Modellansätzen, erfolgt die Berechnung anhand der Massenmitteltemperatur. Lokale Temperaturinhomogenitäten werden somit vernachlässigt. Barba weist in diesem Zusammenhang auf den Unterschied zwischen Vor- und Haupteinspritzungen hin. In beiden Fällen führt die Verdampfungsenthalpie nur zu einer sehr geringen Verringerung der Massenmitteltemperatur⁵³. Mit zunehmender Kraftstoffmenge kommt es aber in der Nähe des verdampfenden

⁵³ Bzw. zu einer verringerten Erhöhung der Massenmitteltemperatur, da die Verdampfung während der Kompression stattfindet.

Kraftstoffs zu einer stärker ausgeprägten lokalen Temperaturabsenkung. Ist der Arrhenius-Term so abgestimmt, dass er den Zündverzug bei Voreinspritzungen korrekt berechnet, wird der Zündverzug der Haupteinspritzung tendenziell zu kurz berechnet, da es in Realität in Kraftstoffnähe deutlich kühler sein wird, vgl. [10] S. 137. Diesem Umstand begegnet Barba, indem er unterschiedliche Parametrierungen für Vor- und Haupteinspritzungen verwendet⁵⁴.

Nach Ablauf des Zündverzugs, findet zunächst die Umsetzung des bereits vorge-mischten Kraftstoffs statt. Dabei geht Barba von zwei unterschiedlichen Mechanis-men aus, siehe [10] S. 114 ff. Zunächst von einer Zündung an einem einzelnen Ort im Brennraum, mit einer anschließenden Flammenausbreitung von diesem Ort aus. Im weiteren Verlauf wird es auch an anderen Stellen im Brennraum zur Zündung kommen, quasi zu einer Verbrennung ausgehend von multiplen Zündorten. Im Extremfall HCCI oder HCLI-Betrieb ist auch eine Art Raumzündung denkbar, allerdings wäre dies dann meist eine zweistufige Zündung/Verbrennung, während Barbass Mo-dell nur den bei konventionellen Brennverfahren auftretenden Hochtemperaturteil der Vormischverbrennung abbilden kann.

Die Flammenausbreitung von einem einzelnen Zündort aus wird über Gleichung (3-18) beschrieben.

$$\frac{dm_{B,Pre,1}}{dt} = \frac{\rho_{UV} \cdot s_{turb} \cdot A_{Flam.}}{1 + \lambda_{Gw.} \cdot L_{min} \cdot \left(1 + \frac{m_{stö.Rg.,Gw.}}{m_{Luft,Gw.}}\right)} \quad (3-18)$$

$dm_{B,Pre,1}/dt$: Über die von einem Zündpunkt ausgehende Premixed-Verbrennung theoretisch umgesetzte Brennstoffmasse im aktuellen Zeitschritt [kg/s]

ρ_{UV} : Dichte im Unverbrannten [kg/m³]

s_{turb} : turbulente Flammengeschwindigkeit [m/s]

$A_{Flam.}$: Flammenoberfläche [m²]

L_{min} : stöchiometrischer Luftbedarf [-]

$m_{stö.Rg.,Gw.}$: Stöchiometrische Restgasmasse der Gemischwolke [kg]

$m_{Luft,Gw.}$: Luftmasse der Gemischwolke [kg]

Die für die Berechnung erforderliche turbulente Flammengeschwindigkeit ergibt sich aus der laminaren Flammengeschwindigkeit, sowie der stellvertretend für die Turbulenzintensität verwendeten mittlere Kolbengeschwindigkeit:

$$s_{turb} = s_{lam} \cdot (1 + 1,6) \cdot \left[\frac{c_m}{s_{lam}} \right]^{0,8} \quad (3-19)$$

s_{lam} : laminare Flammengeschwindigkeit [m/s]

Die laminare Flammengeschwindigkeit ist wiederum eine Funktion von Temperatur, Druck und Restgasgehalt, siehe Gleichung (3-20), sowie des Verbrennungsluftverhältnis in der Gemischwolke, siehe Gleichung (3-21). Die Exponenten zur Berech-

⁵⁴ Er variiert die Aktivierungstemperatur T_A in Gleichung (3-15).

nung des Temperatur- und Druckeinflusses berechnen sich über die Gleichungen (3-22) und (3-23).

$$s_{\text{lam}} = s_{\text{lam},0} \cdot \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\gamma} \cdot \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\delta} \cdot (1 - 2,1 \cdot x_{\text{AGR}}) \quad (3-20)$$

$s_{\text{lam},0}$: laminare Flammgeschwindigkeit bei Referenzbedingungen [m/s]

γ : Exponent zur Darstellung des Temperatureinflusses [-]

δ : Exponent zur Darstellung des Druckeinflusses [-]

x_{AGR} : AGR-Rate [-]

$$s_{\text{lam},0} = 0,276 \left[\frac{m}{s}\right] - 0,47 \cdot \left(\frac{1}{\lambda_{\text{Gw.}}} - \frac{1}{0,91}\right)^2 \left[\frac{m}{s}\right] \quad (3-21)$$

$$\gamma = 2,18 - 0,8 \cdot \left(\frac{1}{\lambda_{\text{Gw.}}} - 1\right) \quad (3-22)$$

$$\delta = -0,16 + 0,22 \cdot \left(\frac{1}{\lambda_{\text{Gw.}}} - 1\right) \quad (3-23)$$

Zur Beschreibung der Flammenausbreitung von mehreren Zündorten aus verwendet Barba einen ähnlichen Zeitskalenansatz, wie ihn schon Weisser und Boulouchos zur Berechnung der Premixed-Verbrennung angewandt haben:

$$\frac{dm_{\text{B,Pre,2}}}{dt} = c_{\text{Pre}} \cdot \frac{1}{\tau_{\text{Pre}}} \cdot m_{\text{Krst.,Pre,verfügbar}} \quad (3-24)$$

$dm_{\text{B,Pre,2}}/dt$: Über die von mehreren Zündorten ausgehende Premixed-Verbrennung theoretisch umgesetzte Brennstoffmasse im aktuellen Zeitschritt [kg/s]

c_{Pre} : Parameter zur Abstimmung der Premixed-Verbrennung [-]

τ_{Pre} : charakteristische Zeit zur Darstellung der Premixed-Verbrennung [s]

$$\tau_{\text{Pre}} = \frac{r_{\text{Gw.}} \cdot \Lambda_{\text{Gw.}}^2}{s_{\text{turb}}} \quad (3-25)$$

$r_{\text{Gw.}}$: Radius der (kugelförmigen) Gemischwolke [m]

$\Lambda_{\text{Gw.}}$: Zerklüftungsmaß der Gemischwolke [-]

Die darin enthaltene charakteristische Zeit ergibt sich aus dem Quotienten einer charakteristischen Länge und der turbulenten Flammgeschwindigkeit, siehe Gleichung (3-25). Die charakteristische Länge besteht aus dem Gemischwolkenradius und dem quadrierten Zerklüftungsmaß der Gemischwolke. Die Idee dahinter ist, dass eine Modellierung der Flammenausbreitung von mehreren Zündorten nur zu Beginn über die Vorstellung mehrerer, ideal kugelförmigen Flammen erfolgen kann, siehe [10] S. 117. Mit fortschreitender Verbrennung werden sich diese Flammenkugeln jedoch zum einen überlappen und zum anderen auch zunehmend zerklüften. Als Maß für den Verbrennungsfortschritt verwendet Barba den Quotienten aus summierter Luft- und Restgasmasse und der erforderlichen Luftmasse für eine stöchiometrische Verbrennung der in der Gemischwolke vorliegenden Kraftstoffmasse, siehe Gleichung (3-26).

$$\Lambda_{\text{Gw.}} = \frac{m_{\text{Luft,Gw.}} + m_{\text{Rg,Gw.}}}{L_{\text{min}} \cdot m_{\text{Krst.,UV,Gw.}}} \quad (3-26)$$

$m_{\text{Krst.,UV,Gw.}}$: Unverbrannter Kraftstoff in der Gemischwolke [kg]

Vergleicht man Gleichung (3-24) mit Gleichung (3-9) aus dem Modell von Weisser und Boulouchos fällt auf, dass Barbas Term keinen Aufbereitungsfaktor enthält. Dieser ist nicht notwendig, da die Premixed-Verbrennung bei Barba sich immer aus der geringeren Brennrate der beiden Gleichungen (3-18) und (3-24) ergibt. Insofern wird die Verbrennung zu Beginn aufgrund der nicht vorhandenen Flammenoberfläche in Gleichung (3-18) begrenzt, während sie gegen Verbrennungsende aufgrund der abnehmenden unverbrannten Kraftstoffmasse in der Premixed-Gemischwolke begrenzt wird, vgl. (3-24). Dies entspricht auch der Vorstellung, dass es zunächst zu einer Verbrennung ausgehend von einem einzelnen Zündort kommt und dass erst im weiteren Verlauf Zündungen an mehreren anderen Stellen in der Gemischwolke auftreten, vgl. S. [10] 115.

Gleichung (3-21) wurde von Barba so parametrisiert, dass die laminare Flammgeschwindigkeit bei einem Luftverhältnis größer als drei negativ wird, was dann einem Erlöschen der Verbrennung entspricht, vgl. [10] 117 f. Dies ist eine Besonderheit des Barba-Modells, da es dadurch in der Lage ist, ein Ausmagern von Voreinspritzungen abzubilden, weshalb dieser Modellaspekt auch in später vorgestellten Modellen aufgegriffen wird, siehe Kapitel 3.2.4.

Auch wenn Parallelen zwischen den Frequenzansätzen von Barba und Weisser/Boulouchos zur Beschreibung der Diffusionsverbrennung erkennbar sind, unterscheiden sie sich dennoch im Detail, vgl. [10] S. 120 ff. Während Weisser und Boulouchos den Quotienten aus turbulenter Viskosität und einer Fläche verwenden, siehe Gleichung (3-10), benutzt Barba den Quotienten aus einer für die Vermischung relevanten Geschwindigkeit und einer charakteristischen Länge, siehe Gleichung (3-27). Diese Länge entspricht der von Weisser & Boulouchos verwendeten Länge zur Berechnung ihrer Bezugsfläche, vgl. (3-12). Mit Hilfe des normierten Summenbrennverlaufs wird erzwungen, dass nach Brennbeginn zunächst der Premixed-Kraftstoff umgesetzt wird, während die Diffusionsverbrennung später einsetzt, vgl. [10] S. 126.

$$\frac{dm_{\text{B,Diff}}}{dt} = \frac{v_{\text{Verm.}}}{l_{\text{char,Diff}}} \cdot m_{\text{Krst.,Diff,verfügbar}} \cdot X_{\text{B,Pre}}^{c_{\text{Pre-Diff}}} \quad (3-27)$$

$dm_{\text{B,Diff}}/dt$: Über die Diffusionsverbrennung umgesetzte Brennstoffmasse im aktuellen Zeitschritt [kg/s]

$X_{\text{B,Pre}}$: Normierter Summenbrennverlauf der Premixed-Verbrennung [-]

$c_{\text{Pre-Diff}}$: Exponent zur Abstimmung des Einflusses der Premixed-Verbrennung auf die Diffusionsverbrennung [-]

$v_{\text{Verm.}}$: Geschwindigkeit zur Beschreibung des Vermischungsprozesses [m/s]

Weisser und Boulouchos gehen in ihrer Veröffentlichung nicht näher darauf ein, wie sie das globale Luftverhältnis⁵⁵ definieren, welches zur Berechnung der charakteristischen Länge verwendet wird, vgl. (3-12). Barba verwendet die in Gleichung (3-28)

⁵⁵ Sie verwenden auch den Begriff „integrales Luftverhältnis“, siehe [162] S. 29.

dargestellte Definition, siehe [10] S. 121 und S. 8. Die zur Berechnung verwendete Luftmasse ergibt sich sowohl aus verbrannter als auch aus unverbrannter Luft, während nur die bereits verbrannte Kraftstoffmasse in die Berechnung des Luftverhältnisses eingeht. Somit ist der Zähler unabhängig vom Verbrennungsfortschritt konstant, während der Nenner mit fortschreitender Verbrennung immer größer wird und somit das Verbrennungsluftverhältnis immer kleiner wird.

$$\lambda = \frac{m_{\text{Luft,frisch}} + m_{\text{Luft,Rg.}}}{(X_B \cdot m_{\text{Krst.,Einspr.}} + m_{\text{Krst.,Rg.}}) \cdot L_{\text{min}}} \quad (3-28)$$

$m_{\text{Luft,frisch}}$:	Im aktuellen Arbeitsspiel frisch angesaugte Luftmasse [kg]
$m_{\text{Luft,Rg.}}$:	Luftmasse im Restgas (verbrannte & unverbrannte Luft) [kg]
X_B :	Normierter Summenbrennverlauf [-]
$m_{\text{Krst.,Einspr.}}$:	In den Brennraum eingespritzte Kraftstoffmasse [kg]
$m_{\text{Krst.,Rg.}}$:	Kraftstoffmasse im Restgas (Unter der Annahme vollständiger Verbrennung nur verbrannter Kraftstoff) ⁵⁶ [kg]

Hinsichtlich der Definition der vermischungsrelevanten Geschwindigkeit $v_{\text{Verm.}}$ aus Gleichung (3-27) ergeben sich ebenfalls Parallelen zu Weisser und Boulouchos. Barba argumentiert, dass es im Rahmen eines phänomenologischen Modells nicht zielführend ist, zwischen den Turbulenzen durch Einlassströmung, Drall und Quetschströmung zu unterscheiden, siehe [10] S. 122. Daher fasst er diese zu einer „Grundturbulenz“ zusammen, die er über die mittlere Kolbengeschwindigkeit abbildet. Da sich, insbesondere bei einem Common-Rail Einspritzsystem, die Turbulenz des Einspritzstrahls betriebspunktabhängig ändern wird, bildet er diese detaillierter ab. Die Grundturbulenz sowie die Einspritzerturbulenz werden vektoriell addiert, siehe Gleichung (3-29), und als vermischungsrelevante Geschwindigkeit in Gleichung (3-27) verwendet.

$$v_{\text{Verm.}} = \sqrt{c_{\text{turb,1}} \cdot c_m^2 + c_{\text{turb,2}} \cdot k} \quad (3-29)$$

$c_{\text{turb,1}}$:	Abstimmparameter der Grundturbulenz [-]
$c_{\text{turb,2}}$:	Abstimmparameter der durch die Einspritzung verursachten Turbulenz [-]
k :	spezifische Turbulenz im Brennraum [m^2/s^2]

Über die in Gleichung (3-29) enthaltenen Abstimmparameter kann der Einfluss der Grundturbulenz gegenüber der Einspritzerturbulenz abgestimmt werden. Dies ist laut Barba bei Motoren mit Einlasskanalabschaltung und damit einhergehender Erhöhung

⁵⁶ Barba beschreibt nicht, ob er diese Größe auch unverbrannten Kraftstoff enthalten kann, vgl. [10] S. 8. Auch ist nicht klar, ob der normierte Summenbrennverlauf eine eventuell stattfindende Verbrennung von zurückgebliebenem unverbranntem Kraftstoff berücksichtigt. Falls ja wäre es klar, dass der rechte Summand nur verbrannten Kraftstoff enthält, da sonst der anfangs unverbrannte Kraftstoff des vorherigen Arbeitsspiels bei vollständiger Umsetzung im aktuellen Arbeitsspiel sowohl im linken, als auch im rechten, Summanden des Nenners auftauchen würde. Falls der normierte Summenbrennverlauf jedoch wie üblich nur die während des aktuellen Arbeitsspiels zugeführte Kraftstoffmasse berücksichtigt, ist es unwahrscheinlich, dass $m_{\text{Krst,Rg}}$ auch unverbrannten Kraftstoff enthält, da es keinen Sinn ergeben würde im linken Summanden nur verbrannten Kraftstoff zu berücksichtigen, im rechten Summanden jedoch auch unverbrannten Kraftstoff. Die plausibelste Annahme ist daher, dass $m_{\text{Krst,Rg}}$ nur aus verbranntem Kraftstoff besteht.

des Luftdralls notwendig, vgl. [10] S. 122 f. k stellt die spezifische Turbulenz im Brennraum dar, die durch die Einspritzung verursacht wird. Bei Vernachlässigung der Impulserhaltung⁵⁷ ergibt sich die Änderung der spezifischen Turbulenzenergie aus Bilanzierung ihrer Entstehung und Dissipation, siehe Gleichung (3-30). Die Turbulenzentstehung hängt in erster Linie von der Einspritzrate und der quadrierten Einspritzgeschwindigkeit – quasi der Änderungsrate der Einspritzenergie – ab. Damit Energie dissipieren kann, muss sie überhaupt vorliegen. Entsprechend enthält der hintere Teil der Gleichung auch die spezifische Turbulenzenergie. Desweiteren gilt, dass bei kleineren Düsenlochdurchmessern auch mehr Energie am Düsenloch verloren geht⁵⁸.

$$\frac{dk}{dt} = c_{\text{Einspr.}} \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{dm_{\text{Einspr.}}}{dt} \cdot v_{\text{Einspr.}}^2 \cdot \frac{1}{m_{\text{Zyl}}} - c_{\text{Diss.}} \cdot \frac{1}{d_D} \cdot k^2 \quad (3-30)$$

$c_{\text{Einspr.}}$: Abstimmparameter [-]

$dm_{\text{Einspr.}}/dt$: Einspritzrate [kg/s]

$c_{\text{Diss.}}$: Abstimmparameter [-]

Im Gegensatz zu Weisser und Boulouchos hat Barba auch einen simplen Ansatz zur Modellierung des Auftrags von Kraftstoff an der Zylinderwand implementiert, vgl. [10] S. 128 ff. Dazu berechnet er, ähnlich zu den noch vorzustellenden Paket-Modellen, die Eindringtiefe des Kraftstoffstrahls. Über einfache geometrische Überlegungen kann er so eine Kollision des Strahls mit der Zylinderwand detektieren. Es wird davon ausgegangen, dass bei Segmenten mit Wandkontakt ein Teil des gerade verdampfenden Kraftstoffs an der Zylinderwand zwischengespeichert wird. Über einen Zeitanatz wird dieser Kraftstoff dann verzögert den Verbrennungstermen zugeführt.

Warth et al. [161] haben den Modellansatz von Barba nur geringfügig modifiziert, weshalb auf eine detaillierte Modellvorstellung an dieser Stelle verzichtet wird und lediglich die Änderungen kurz beschrieben werden. Die für die Diffusionsverbrennung relevante Geschwindigkeit berechnet sich nicht nur aus der Grund- und Einspritzerturbulenz, vgl. Gleichung (3-29), sondern berücksichtigt nun auch die Turbulenz die durch die Verbrennung selbst erzeugt wird, siehe [161] S. 120. Statt dem in Gleichung (3-28) dargestellten Verbrennungsluftverhältnis wird ein synthetisches Verbrennungsluftverhältnis verwendet. Dieses berücksichtigt sowohl den Verbrennungsfortschritt, als auch die Verbrennungsgeschwindigkeit. Bei Brennbeginn wird das globale Verbrennungsluftverhältnis etwas ins Magere verschoben, was die Verbrennung künstlich erhöht. Gegen Verbrennungsende wird zunehmend das tatsächlich vorliegende globale Verbrennungsluftverhältnis für die Berechnungen verwendet, was die Verbrennung abbremst. Wenn die Brennrate über einer Referenzbrennrate bei Vollast liegt, wird das synthetische Verbrennungsluftverhältnis außerdem zunehmend Richtung stöchiometrisches Verbrennungsluftverhältnis verschoben. Warth et al. wollten damit die Verdrängung von Sauerstoff aufgrund der Verbrennung besser ab-

⁵⁷ Die Berücksichtigung hätte laut Barba eine Änderung in der Größenordnung von 1% zur Folge, siehe [10] S. 123.

⁵⁸ Der Dissipationsterm soll somit zwei räumlich getrennte Effekte gleichzeitig abbilden. Die Dissipation im Brennraum und die Einspritzverluste bei kleineren Düsenlöchern.

bilden, siehe [161] S. 120. Der Schwerpunkt von der Veröffentlichung lag jedoch, wie schon bei Weisser und Boulouchos, auf der Emissionsmodellierung.

3.2.3 Paket-Modelle

Obwohl die nun vorgestellten Paket-Modelle wesentlich detaillierter sind, als die bisher beschriebenen Modellansätze, liegen die ersten Veröffentlichungen bereits 36 Jahre zurück. Die Grundidee zu diesem Modellansatz stammt von Hiroyasu und Kadota, deren erste Veröffentlichung von 1976 [70] bereits die wichtigsten Elemente enthielt, insbesondere die detaillierte Diskretisierung des Einspritzstrahls. Meguerdichian und Watson griffen den Modellansatz wesentlich vereinfacht 1978 auf [99]. 1983 stellten Hiroyasu et al. einen im Detail verbesserten Modellansatz vor [71]. Zu diesem Zeitpunkt konnte das Modell jedoch nur auf Großrechenanlagen eingesetzt werden. Eine Nutzung auf einem herkömmlichen Desktop-PC war, aufgrund der hohen Rechen- und Speicheranforderungen, damals nicht möglich. Aus diesem Grund wurden zunächst die wesentlichen einfacheren Gasstrahl- und Zeitskalenmodelle aufgebaut und weiterentwickelt, während es kaum Veröffentlichungen über Paket-Modelle gab. Erst Anfang der 1990er Jahre erreichten die Rechenleistungen im Desktop-Bereich ein Niveau, das den Einsatz von Paket-Modellen grundsätzlich auch in diesem Rahmen ermöglichte. In den folgenden zehn Jahren kam es regelmäßig zu Veröffentlichungen von modifizierten oder auch etwas vereinfachten Paket-Modellen, beispielsweise [14], [168], [167], [93], [82], [34], [100]. Stiesch kann als Pionier dieses Ansatzes in Deutschland angesehen werden [146], [147]. Aufbauend auf seiner Arbeit erstellte Thoma im Rahmen des FVV-Vorhabens 778 ein Paket-Modell mit dem erstmalig auch Betriebspunkte mit einer Voreinspritzung über diesen Ansatz berechnet werden konnten [151]. Auch in den letzten Jahren gab es immer wieder Veröffentlichungen über weitere Varianten dieses Modelltyps, beispielsweise [77], [123], [27]. In der für 1-D Strömungssimulationen häufig verwendeten Software GT-Power ist ebenfalls ein Paket-Modell integriert, das laut [56] S. 32 auf [168] und [108] basiert.

Trotz der Vielzahl an Veröffentlichungen und der Integration in kommerzielle Software, blieb dem Modellansatz ein intensiver Einsatz in der Serienentwicklung bis dato verwehrt. Der wahrscheinlichste Grund dafür ist das vergleichsweise schlechte Aufwand-Nutzen-Verhältnis bei diesem Modellansatz. Um dies zu verstehen und die Leistungsfähigkeit der später noch erläuterten Scheiben-Modelle einschätzen zu können, soll der Ansatz nun grob vorgestellt werden, wobei in erster Linie die Implementierungen von Stiesch [146] und aus dem FVV-Vorhaben 778 [151] beschrieben werden.

Grundidee ist eine Diskretisierung des Kraftstoffstrahls sowohl in axialer, als auch in radialer Richtung, in sogenannte Pakete, die sich im Brennraum ausbreiten, siehe Abbildung 29.

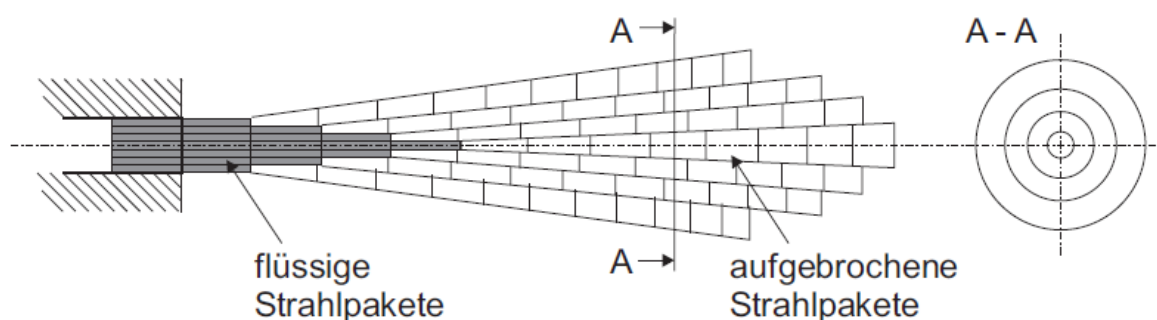


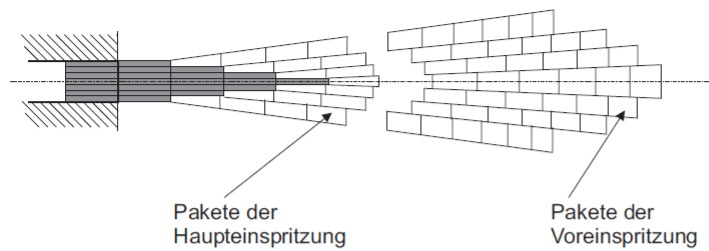
Abbildung 29: Diskretisierung eines einzelnen Einspritzstrahls [151] S. 17

Ein Paket ist ein Bilanzierungsvolumen sowohl für flüssige, als auch für gasförmige Komponenten, vgl. [151] S. 17. Jedes Paket kann somit als Zone aufgefasst werden, wobei die flüssige Phase separat bilanziert werden muss, da – bei der in dieser Arbeit verwendeten Definition – in einer Zone die thermische Zustandsgleichung gültig sein soll, vgl. Kapitel 2.5. In festen Zeitabständen werden Pakete erzeugt, die den zuletzt eingespritzten Kraftstoff zunächst in flüssigem Zustand enthalten. Entsprechend der Einspritzdauer ergibt sich so die axiale Diskretisierung. Da die Vermischung von Kraftstoff und Luft in der Strahlmitte anders abläuft als am Strahlrand, wird der Kraftstoffstrahl auch in radialer Richtung diskretisiert. Bei der Paketerzeugung wird der im letzten Zeitschritt eingespritzte Kraftstoff somit auf mehrere Pakete in radialer Richtung gleichmäßig aufgeteilt. Sowohl die Schrittweite, mit der die Pakete erzeugt werden, als auch die radiale Diskretisierung, sind im Modell festgelegt, wobei es Unterschiede zwischen den verschiedenen Veröffentlichungen gibt.

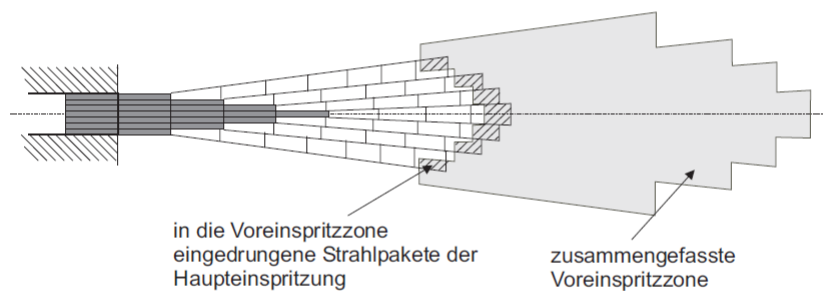
In der ersten Veröffentlichung von Hiroyasu und Kadota wurden zu jedem vollen Kurbelwinkel Pakete erzeugt, siehe [70] S. 518. Bei den damaligen Einspritzdauern wurden bis zu 250 Pakete generiert, was auf eine radiale Diskretisierung von zehn Paketen schließen lässt, was auch mit den Angaben in [71] S. 572 übereinstimmt. Xiaoping et al. und Li et al. verzichten auf eine radiale Diskretisierung, siehe [167] S. 2 und [93] S. 170. Thoma hat bei der Einbindung seines Paket-Modells in die Simulationsumgebung der FVV (GPA) die axiale Diskretisierung von der Motordrehzahl abhängig gemacht, vgl. [151] S. 46. Damit wollte er erreichen, dass auch bei Drehzahlen unterhalb von 1000 U/min akzeptable Rechenergebnisse erzielt werden, indem die Schrittweite der Paket-Erzeugung auf der Zeitskala ungefähr konstant bleibt. Oberhalb von 1000 U/min beträgt die axiale Diskretisierung immer 0,25 °KW. In radialer Richtung wird der Kraftstoffstrahl wie schon von Stiesch in fünf Pakete unterteilt, vgl. [151] S. 20 und [146] S. 17. Grundsätzlich gilt es hier einen Kompromiss zwischen Rechengüte und Rechenzeit zu finden, da bei feinerer axialer oder radialer Diskretisierung mehr Zonen bilanziert werden müssen.

Zusätzlich zu den Paket-Zonen gibt es noch eine Frischluftzone, welche bei Rechenbeginn die gesamte gasförmige Ladung im Brennraum enthält. Die Luftbeimischung, die Verdampfung, der Zündverzug und die Verbrennung werden separat für jedes Paket berechnet. Ein Massen- oder Wärmeaustausch zwischen Paket-Zonen ist bei den meisten Veröffentlichungen nicht vorgesehen, sondern lediglich die Beimischung von Ladungsgas aus der Frischluftzone in die einzelnen Paket-Zonen, vgl. [146] S. 18. Die Modelle von Bazari und Cui et al. bilden Ausnahmen in der Hinsicht. Beide Veröffentlichungen sehen nach dem vollständigen Massentransfer von der Frischluft-Zone in die Paket-Zonen eine Vermischung der Paket-Zonen untereinander vor, siehe [14] S. 41 und [34] S. 997 f. Bei Betriebspunkten mit einer Voreinspritzung weicht das FVV-Modell ebenfalls von der üblichen Implementierung ab. Dort werden, sobald ein Paket der Haupteinspritzung die letzten Pakete der Voreinspritzung eingeholt hat, sofort alle Pakete der Voreinspritzung zu einer Zone zusammengefasst, siehe Abbildung 30.

a) Vor der Mischung zwischen Voreinspritzung und Haupteinspritzung



b) Zusammenfassung der Pakete der Voreinspritzung



c) Mischung zwischen Voreinspritzung und Haupteinspritzung

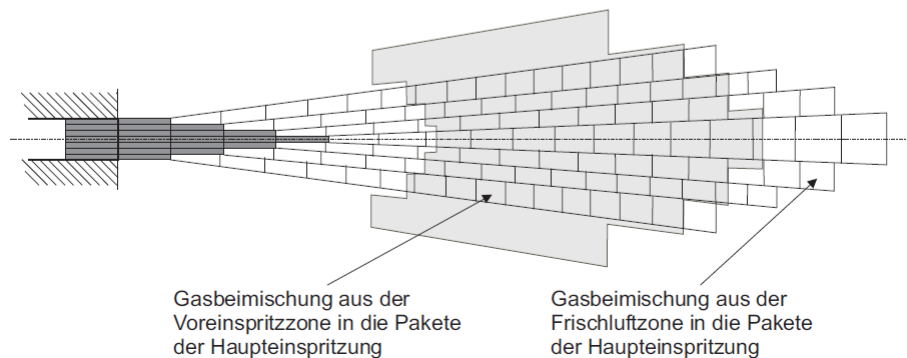


Abbildung 30: Schematische Darstellung der Bildung der Voreinspritzzone [151] S. 19

Nach dieser Zusammenfassung wird die Voreinspritzzone formal wie ein einzelnes großes Paket behandelt, vgl. [151] S. 18 f. Dieses bezieht sein Entrainment aus der Frischluftzone, während Pakete der Haupteinspritzung, die sich innerhalb der VE-Zone befinden, von dort ihr Entrainment beziehen. In so einem Fall gelangt unverbrannter, gasförmiger Kraftstoff von der VE-Zone in andere Pakete. Sobald ein Paket der Haupteinspritzung die Voreinspritzzone wieder verlässt, oder die VE-Zone aufgebraucht ist, bezieht es sein Entrainment wieder aus der Frischluftzone. Da eine Vermischung verschiedener Einspritzstrahlen in allen Veröffentlichungen nicht berücksichtigt wird, ist es ausreichend einen einzelnen Einspritzstrahl zu berechnen und die Ergebnisse entsprechend der Anzahl an Düsenlöchern zu skalieren.

Um die Beimischung von Ladungsgas in die Paket-Zonen zu berechnen wird meist von einer Impulserhaltung der einzelnen Pakete ausgegangen. Die Massenzunahme der Paket-Zone ist demnach proportional zur Geschwindigkeitsabnahme des Pakets, siehe Gleichung (3-31). Ausnahme in der Hinsicht ist zum einen der Originalansatz von Hiroyasu und Kadota, bei dem die Spraygeometrie bis auf den Spraywinkel fest vorgegeben ist, woraus sich das Volumen der einzelnen Pakete und damit auch das

Entrainment ergibt, vgl. [70] S. 515. Kouremenos et al. verwenden einen ähnlichen Ansatz, da sie die Meinung vertreten, dass sich bei der Abbildung einer realistischen Beimischrate über den Impulserhaltungsansatz unrealistische Strahleindringtiefen ergeben, vgl. [82] S. 193.

$$\frac{dm_{\text{Entr,Paket}}}{dt} = \frac{I_{\text{Paket}}}{\Delta t_{\text{Rsw}}} \cdot \left(\frac{1}{v_{\text{Paket},i}} - \frac{1}{v_{\text{Paket},i-1}} \right) \quad (3-31)$$

$dm_{\text{Entr,Paket}}/dt$: Ladungsbeimischrate eines Pakets im aktuellen Rechenschritt [kg/s]

I_{Paket} : Impuls des Pakets [kg·m/s]

Δt_{Rsw} : Rechenschrittweite [s]

$v_{\text{Paket},i}$: Paketgeschwindigkeit im aktuellen Rechenschritt [m/s]

$v_{\text{Paket},i-1}$: Paketgeschwindigkeit im vorherigen Rechenschritt [m/s]

Bei Verwendung der Impulserhaltungsmethode ist es folglich notwendig die Paketgeschwindigkeit zu berechnen. Dies geschieht über empirische Gleichungen, wobei sich die meisten Veröffentlichungen in diesem Punkt unterscheiden. Hiroyasu et al. haben ihre Gleichungen anhand optischer Freistrahlmessungen aufgestellt, vgl. [71] S. 572. Diese Grundgleichungen wurden immer wieder an die sich ändernden Rahmenbedingungen wie beispielsweise Einspritzdruckerhöhung oder Mehrfacheinspritzung angepasst. Gleichung (3-32) zeigt eine allgemeine Formulierung der Geschwindigkeitsabnahme in der Strahlmitte als Funktion der Zeit, vgl. [151] S. 21. Aufgrund von Scherkräften wird die Geschwindigkeitsabnahme zum Strahlrand hin größer. Dies wird über Gleichung (3-33) berücksichtigt.

$$v_{j,1} = c_{v,1} \cdot \left(\frac{(p_{\text{Einspr.}} - p_{\text{Zyl}}) \cdot d_D^2}{\rho_{\text{Luft,Zyl}}} \right)^{0,25} \cdot (t - t_{\text{Einspr.,Paket},j})^m [s^{-(0,5+m)}] \quad (3-32)$$

$v_{j,1}$: Geschwindigkeit des Strahlachsenpakets auf der axialen Position j [m/s]

$c_{v,1}$: Abstimmparameter [-]

$p_{\text{Einspr.}}$: Einspritzdruck [Pa]

$\rho_{\text{Luft,Zyl}}$: Luftdichte im Brennraum [kg/m³]

$t_{\text{Einspr.,Paket},j}$: Einspritzzeitpunkt der Pakete auf der axialen Position j [s]

m : massen- und einspritzdauerabhängiger Exponent [-]

$$v_{j,k} = v_{j,1} \cdot e^{-0,0386 \cdot (k-1)^2} \quad (3-33)$$

$v_{j,k}$: Geschwindigkeit des Pakets auf axialer Position j und radialer Position k [m/s]

Stiesch führte erstmals einen Windschatteneffekt ein, siehe [146] S. 18, womit die Geschwindigkeitsabnahme abhängig von der axialen Position variiert wird, siehe Gleichung (3-34). Dies soll berücksichtigen, dass die Strahlspitze wesentlich stärker abgebremst wird, als der nachfolgende Kraftstoffstrahl und wurde so auch von Thoma übernommen, siehe [151] S. 21.

$$v_{j,k} = c_{v,2} \cdot v_{1,k} \cdot \left(1 + \left(\frac{j-1}{j_{\max}-1} \right)^{c_{v,3}} \cdot \frac{\Delta t_{ED}}{c_{v,4}} \right) \quad (3-34)$$

- $c_{v,2}$: Abstimmparameter [-]
 $v_{1,k}$: Geschwindigkeit des Pakets an der Strahlspitze und der radialen Position k [m/s]
 j_{\max} : axiale Position der bei Einspritzende erzeugten Pakete [-]
 $c_{v,3}$: Abstimmparameter [-]
 Δt_{ED} : Einspritzdauer [s]
 $c_{v,4}$: Abstimmparameter [s]

Während in allen vorherigen Veröffentlichungen der Exponent m in Gleichung (3-32) stets -0.5 betragen hatte, führte Thoma im Rahmen seines FVV-Projektes eine Abhängigkeit dieses Parameters von der Einspritzmenge und -dauer ein, vgl. [151] S. 22:

$$m = -0,5 \cdot \left(1 + e^{\frac{c_{v,5} \cdot m_{Krst.,Einspr.} \cdot \Delta t_{ED}}{m_{Krst.,Einspr.,VL} \cdot \Delta t_{ED,VL}}} \right) \quad (3-35)$$

- $c_{v,5}$: Abstimmparameter [-]
 $m_{Krst.,Einspr.}$: Eingespritzte Kraftstoffmasse im aktuellen Betriebspunkt [kg]
 $m_{Krst.,Einspr.,VL}$: Eingespritzte Kraftstoffmasse bei Volllast [kg]
 $\Delta t_{ED,VL}$: Einspritzdauer bei Volllast [s]

Bei besonders geringen Einspritzmengen und -dauern nähert sich somit der Parameter m dem Wert -1, siehe [Abbildung 31](#). Dies führt dazu, dass beispielsweise Voreinspritzungen stärker abgebremst werden als Haupteinspritzungen und sich somit auch schneller mit Luft durchmischen.

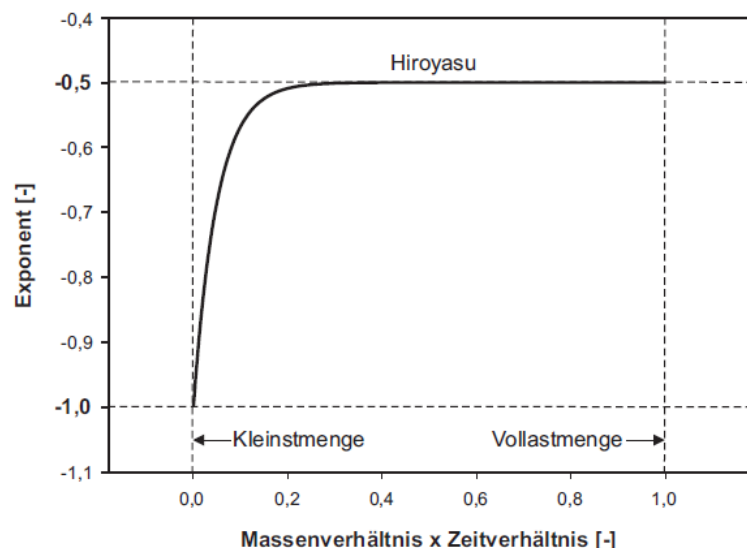


Abbildung 31: Veränderung des Exponenten m über der Last [151] S. 22

Hiroyasu et al., Bazari und Cui et al. berücksichtigten in ihren Veröffentlichungen zur Berechnung der Luftbeimischung nicht nur die axiale Ausbreitungsgeschwindigkeit, sondern auch radiale Strömungen erzeugt durch Luftdrall, vgl. [71] S. 572, [14] S. 44,

[34] S. 998. Mit Hilfe der Drallzahl wird für jedes Paket, abhängig von seiner axialen Position, die radiale Geschwindigkeitskomponente berechnet und mit der axialen Geschwindigkeit zusammengeführt. Das Ergebnis wird dann in Gleichung (3-31) eingesetzt. Sowohl Stiesch als auch Thoma haben diesen Aspekt in ihrem Modell nicht integriert. Stiesch begründet dies über eine Veröffentlichung von Chmela et al. aus der hervorgeht, dass die kinetische Energie des Einspritzstrahls um Faktor 100 größer ist als die kinetische Energie der Ladungsbewegung im Zylinder und letztere daher vernachlässigt werden kann, vgl. [146] S. 17 f, [29] S. 486. Nach der Einspritzung breiten sich die Pakete zunächst eine gewisse Zeit ohne eine Geschwindigkeitsabnahme im Brennraum aus. Erst nach Ablauf der für jedes Paket individuell berechneten Strahlaufbruchszeit⁵⁹, kommt es zu einem Aufbruch des jeweiligen Pakets und zu einer Berechnung der Geschwindigkeitsabnahme und des Entrainments, vgl. [151] S. 20 f.

Mit der Beimischung von Luft beginnt die Verdampfung des flüssigen Kraftstoffs innerhalb des jeweiligen Pakets, vgl. [151] S. 22 ff. Dazu wird zunächst ein repräsentativer Tröpfchendurchmesser berechnet. Die zu Beginn vollständig flüssige Kraftstoffmasse verteilt sich auf eine entsprechende Anzahl von Tröpfchen mit diesem Durchmesser. Es wird angenommen, dass die Anzahl der Kraftstofftropfen in dem Paket während der Verdampfung konstant bleibt und dass es keine Wechselwirkung zwischen den einzelnen Tropfen gibt. Daher beschränkt man sich auf die Abbildung eines einzelnen Tropfens für jedes Paket, dessen Verdampfung berechnet wird und entsprechend der Tropfenanzahl des jeweiligen Pakets skaliert wird. Laut Stiesch werden zusätzlich folgende Annahmen getroffen, vgl. [146] S. 21:

- Das Tropfeninnere wird als isotherm angesehen. Man unterscheidet somit zwischen Tropfentemperatur, Oberflächentemperatur und Temperatur des gasförmigen Kraftstoffs (entspricht der Zonentemperatur)
- Einfluss der Wärmestrahlung wird nicht berücksichtigt
- Der Einfluss der Tropfenkrümmung auf den Dampfdruck wird vernachlässigt

Für eine detaillierte Beschreibung sei auf die angegebenen Literaturstellen verwiesen. Es bleibt jedoch festzuhalten, dass die Verdampfungsberechnung im Gegensatz zu den bisherigen Modellansätzen nicht auf einer empirischen, sondern auf einer physikalischen Modellierung unter Berücksichtigung der lokalen Randbedingungen des jeweiligen Paketes basiert.

Mit der Verdampfung setzt auch die Berechnung des chemischen Zündverzugs ein, vgl. [151] S. 26 ff. Der physikalische Zündverzug wird durch die Strahlaufbruchszeit und die damit einhergehende Verzögerung des Entrainments abgebildet. Der chemische Zündverzug wird für jedes Paket über ein eigenständiges Zündintegral berechnet. Der im FVV-Modell dafür verwendete Arrhenius-Term ist in Gleichung (3-36) dargestellt. Bei Paket-Modellen gibt es somit keinen globalen Verbrennungszustand, sondern je nach Fortschritt findet in einer bestimmten Anzahl an Paket-Zonen eine Verbrennung statt.

⁵⁹ Auch in deutschsprachigen Veröffentlichungen oft als „Breakup-Zeit“ bezeichnet.

$$\tau_{ZV} = c_{ZV} \cdot \frac{\lambda_{\text{Paket}}}{p_{\text{Zyl}}^2} \cdot e^{\frac{T_{\text{Akt.}}}{T_{\text{Paket}}}} \quad (3-36)$$

c_{ZV} :	Abstimmparameter [$\text{Pa}^2 \cdot \text{s}$]
λ_{Paket} :	Luftverhältnis in der jeweiligen Paketzone [-]
T_{Paket} :	Temperatur der jeweiligen Paketzone [K]

Um die Premixed-Verbrennung und ihre Veränderung durch Applikation einer Voreinspritzung besser abbilden zu können, gibt es einige Sonderbehandlungen, je nach Anzahl der Einspritzungen. Bei einem Betriebspunkt ohne Voreinspritzungen, werden bei der Zündung des ersten Pakets im Brennraum alle bereits aufgebrochenen Pakete – unabhängig vom Wert ihres Zündintegrals – ebenfalls gezündet, wodurch es zu einer ausgeprägteren Premixed-Verbrennung kommt, siehe [146] S. 28. Bei Betriebspunkten mit Voreinspritzung gibt es diese Sonderbehandlung nicht. Dafür kann es zu der bereits angesprochenen Zusammenfassung der Pakete der Voreinspritzung kommen. Dabei wird das Zündintegral mit dem höchsten Wert als Zündintegral für die zusammengefasste Voreinspritzzone übernommen. Sofern also bisher noch kein Paket der Voreinspritzung gezündet hat, zünden zu einem späteren Zeitpunkt alle Pakete innerhalb der Voreinspritzzone gleichzeitig. Wenn aber schon einzelne Pakete der Voreinspritzung brennen, zünden alle noch nicht brennenden Pakete bei der Zusammenfassung zur Voreinspritzzone. Alle nachträglich in die Voreinspritzzone eindringenden Pakete fangen ebenfalls sofort zu brennen an, vgl. [151] S. 29.

Sobald der Zündverzug eines Pakets abgelaufen ist, beginnt die Verbrennung in diesem Paket, wobei stets von einer stöchiometrischen Verbrennung ausgegangen wird, vgl. [151] S. 29 ff. Das bedeutet, je nach Luft-Kraftstoffverhältnis innerhalb des Pakets wird die Verbrennung durch die Luft- oder die Kraftstoffmasse begrenzt, siehe Gleichungen (3-37) und (3-38). Zusätzlich wird die Verbrennung durch die maximal mögliche chemische Umsatzrate begrenzt, die sich aus der in Gleichung (3-39) dargestellten Arrhenius-Gleichung ergibt⁶⁰. Die Brennrate eines Pakets ergibt sich somit aus dem kleinsten Wert der drei Gleichungen, wobei die Arrhenius-Gleichung die Verbrennung nur bei niedrigeren Temperaturen begrenzt, vgl. [151] S. 30. Um die Abmagerung von Voreinspritzungen abzubilden, wird eine bereits begonnene Verbrennung in einem Paket abgebrochen, sobald das Luftverhältnis des Pakets oberhalb von drei⁶¹ liegt, siehe [151] S. 31.

⁶⁰ Die von Thoma veröffentlichte Gleichung enthält die Dichte des zündfähigen Gemisches ohne den Exponenten zwei, siehe [151] S. 30. In dem von ihm veröffentlichten Quellcode ist der Exponent zwei enthalten, siehe Subroutine *burningrate1* in *SpraySub.f90*. Dies entspricht der Implementierung von Bazari, vgl. [14] S. 45.

⁶¹ Dies ist der gleiche Wert wie bei Barbas Zeitskalenmodell, vgl. [Abschnitt 3.2.2.](#)

3 Modellscreening

$$\frac{dm_{B,\text{Paket},\lambda \geq 1}}{dt} = \frac{m_{\text{Krst.,gasf.,Paket}}}{\Delta t_{\text{Rsw.}}} \quad (3-37)$$

$dm_{B,\text{Paket},\lambda \geq 1}/dt$: möglicher Brennstoffmassenumsatz innerhalb eines Pakets aufgrund des vorhandenen gasförmigen Kraftstoffs [kg/s]

$m_{\text{Krst.,gasf.,Paket}}$: gasförmige Kraftstoffmasse des Pakets [kg]

$$\frac{dm_{B,\text{Paket},\lambda < 1}}{dt} = \frac{m_{\text{Luft,Paket}}}{L_{\text{min}} \cdot \Delta t_{\text{Rsw.}}} \quad (3-38)$$

$dm_{B,\text{Paket},\lambda < 1}/dt$: möglicher Brennstoffmassenumsatz innerhalb eines Pakets aufgrund der vorhandenen Luft [kg/s]

$m_{\text{Luft,Paket}}$: Masse der unverbrannten Luft innerhalb des Pakets [kg]

$$\frac{dm_{B,\text{Paket,chem.U.}}}{dt} = c_{\text{Verb.}} \cdot \rho_{\text{Gem.}}^2 \cdot \xi_{\text{Krst.,gasf.,Paket}} \cdot \xi_{\text{O}_2,\text{Paket}}^5 \cdot e^{\left(\frac{-12000\text{K}}{T_{\text{Paket}}}\right)} \cdot V_{\text{Paket}} \quad (3-39)$$

$dm_{B,\text{Paket,chem.U.}}$: möglicher Brennstoffmassenumsatz innerhalb eines Pakets aufgrund der maximal möglichen chemischen Umsatzrate [kg/s]

$c_{\text{Verb.}}$: Abstimmkoeffizient der Verbrennung [$\text{m}^3/(\text{kg}\cdot\text{s})$]

$\rho_{\text{Gem.}}$: Dichte des zündfähigen Gemischs [kg/m^3]

$\xi_{\text{Krst.,gasf.,Paket}}$: Massenanteil des gasförmigen Kraftstoffs innerhalb des Pakets [-]

$\xi_{\text{O}_2,\text{Paket}}$: Massenanteil des Sauerstoffs innerhalb des Pakets [-]

V_{Paket} : Paketvolumen [m^3]

Während in dem Modell von Hiroyasu et al. die Pakete bei Wandkontakt weitgehend unverändert entlang der Zylinderwand weiterfliegen, vgl. [146] S. 573, enthalten die neueren Modellvarianten meist auch ein Wandanlagerungsmodell. Eine Kollision mit der Kolbenmulde lässt sich durch einfache geometrische Überlegungen detektieren, da man durch Integration der Geschwindigkeit die axiale Position jedes Pakets kennt. In Bazaris Modell wird bei Wandkontakt die Geschwindigkeitsabnahme der Pakete verringert, was zu einer langsameren Luftbeimischung führt⁶², vgl. [14] S. 43 f. Falls in einem auftreffenden Paket noch flüssiger Kraftstoff vorhanden ist, wird in Abhängigkeit von der Weberzahl ein Teil dieses Kraftstoffs einem Wandfilm zugeführt⁶³. Der andere Teil verbleibt unverändert im Paket. In dem Wandfilm, dessen Oberfläche der Grundfläche des Strahlkegels auf der Zylinderwand entspricht, wird der angelagerte Kraftstoff von allen Paketen bilanziert. Basierend auf dem Wandwärmeübergang zwischen Gas und Brennräumwand, wird die dem Flächenanteil des Wandfilms entsprechende Wärmemenge dem Wandfilm zugeführt und führt zu einer Verdampfung. Der verdampfende Kraftstoff wird dabei auf alle bereits auf die Wand aufgetroffenen Pakete gleichmäßig verteilt. Thoma beschreibt sein Wandanlagerungsmodell

⁶² Bazari veröffentlichte statt den Gleichungen für die Paketgeschwindigkeit, die Gleichungen der axialen Paketposition, siehe [14] S. 43. Bei Wandkontakt verändert er den Exponenten des Zeiteinflusses auf die Paketposition von 0,5 auf 0,75. Dies entspricht einer Änderung des Koeffizienten m in Gleichung (3-32) von -0,5 auf -0,25.

⁶³ Bazari beschreibt das zugrunde liegende Modell nicht genauer. Eine mögliche Modellbeschreibung bietet Thoma, was im Anschluss erläutert wird.

dell sehr ausführlich, vgl. [151] S. 37 ff. Bei Auftreffen von flüssigem Kraftstoff auf die Wand sind zwei Fälle zu unterscheiden. Zum einen Kraftstofftropfen die sich an der Wand anlagern und zum anderen Kraftstofftropfen die wieder abprallen. Das Verhalten lässt sich mit Hilfe der Weberzahl vorhersagen, die eine Größe für die auf den Tropfen einwirkenden Kräfte ist. Dabei ist zwischen aufbrechenden Kräften und zusammenhaltenden Kräften, beispielsweise der Oberflächenspannungskraft zu unterscheiden. Die Weberzahl ergibt sich somit aus der Auftreffgeschwindigkeit und den Stoffeigenschaften des Kraftstofftropfens:

$$We_{Tr} = \frac{\rho_{Tr} \cdot d_{Tr} \cdot v_{Tr}^2}{\sigma_{Tr}} \quad (3-40)$$

We_{Tr} :	Weberzahl des auftreffenden Kraftstofftropfens [-]
ρ_{Tr} :	Dichte des Kraftstofftropfens [kg/m^3]
d_{Tr} :	Tropfendurchmesser [m]
v_{Tr} :	Geschwindigkeit des Tropfens beim Aufprall [m/s]
σ_{Tr} :	Oberflächenspannung des Tropfens [N/m]

Bei Weberzahlen kleiner als 80 prallen die Tropfen wieder von der Wand ab, andernfalls bleiben sie auf der Wand haften, siehe [151] S. 38. Da aufgrund der bisherigen Annahmen alle Tropfen eines Pakets den gleichen Durchmesser haben, wird mit Hilfe einer empirischen Gleichung die Verteilung der Tropfendurchmesser berechnet. Der Durchmesser und die Dicke des als zylinderförmig angenommen Wandfilms werden über empirische Gleichungen aus seiner Masse und einigen temperaturabhängigen Größen berechnet, siehe [151] S. 40 f. Im weiteren Verlauf der Simulation erfolgt ein Wärmeeintrag durch das Zylindergas und die Brennraumwand. Die Verdampfung des Kraftstoffs ist ebenso detailliert modelliert, wie die reguläre Verdampfung in den Paketen. Im Gegensatz zu Bazaris Modell nimmt bei Thoma das Entrainment in die Paket-Zonen nach deren Wandkontakt deutlich zu, vgl. [151] S. 39.

Bei ganzheitlicher Betrachtung des Paket-Ansatzes fällt auf, dass einige physikalische Effekte sehr detailliert modelliert werden, beispielsweise die Tropfenverdampfung. Andererseits gibt es Effekte wie die Paketausbreitung, welche letztlich nur über empirische Gleichungen abgebildet werden, obwohl sie das Entrainment und damit alle weiteren Prozesse (auch die Tropfenverdampfung) entscheidend beeinflussen. Auch die unterschiedlichen Verfahrensweisen bei der Zündung, abhängig von der Anzahl der Einspritzungen, zeigen Modellschwächen auf. Da das Verbrennungsmodell von Thoma vor dem FVV-Zylindermodul [60] entwickelt wurde, hat es eine eigenständige Simulationsumgebung für die Berechnung des Hochdruckprozesses. Diese Simulationsumgebung wurde wiederum in das GPA-Modul der FVV integriert, siehe [151] S. 91. Die Rechenzeiten zur Berechnung eines Arbeitsspiels liegen oftmals über einer Minute, vgl. [151] S. 90, was für ein phänomenologisches Modell, das in eine 1-D Strömungssimulation eingebunden werden soll, inakzeptabel lang ist. Im Vorfeld dieser Arbeit wurde versucht das Modell von Thoma in das FVV-Zylindermodul zu integrieren. Dadurch konnte zwar ein deutlicher Rechenzeitgewinn erzielt werden, dennoch war die Simulationsgüte im Verhältnis zum Rechenaufwand nicht befriedigend, vgl. [125] S. 98. Durch die Vielzahl an Abstimmparametern ist eine Anpassung an einen Motor sehr zeitaufwendig. Ein Nachteil ist insbesondere, dass einzelne Phänomene wie Zündverzug, Premixed-Verbrennung und auch Diffusionsverbrennung nicht separat abgestimmt werden können. Ebenso erscheint die Nutzung des Modellansatzes zur Simulation von Betriebspunkten mit mehreren Vor-

und auch Nacheinspritzungen ohne die Implementierung von Sonderbehandlungs-routinen – beispielsweise bei der Zündverzugsberechnung – unmöglich.

3.2.4 Scheiben-Modelle

Chemela et al. veröffentlichten 1998 zunächst einen neuen Ansatz zur Berechnung der Diffusionsverbrennung, den sie MCC-Ansatz (Mixing Controlled Combustion) nannten [29]. Langfristiges Ziel war es, zunächst ein sehr einfaches Modell zu entwerfen, das im Laufe der Jahre immer wieder weiterentwickelt wurde. Eine Modifikation wurde jedoch nur vorgenommen, wenn sich neuere Messdaten mit dem bisherigen Modell nicht simulieren ließen und sich die Veränderung auch physikalisch plausibel erschien, vgl. [29] S. 485. Da die Diffusionsverbrennung von der Vermischung von Kraftstoff und Luft abhängt, erschien es sinnvoll diesen prozesssteuernden Effekt abzubilden. Durch grundsätzliche Überlegungen zeigten sie auf, dass die Vermischung von Kraftstoff und Luft beim DI-Dieselmotor überwiegend von der Einspritzung gesteuert wird und nicht von der Luft-Turbulenz⁶⁴, vgl. [29] S. 486. Unter der Annahme, dass die Quadratwurzel der spezifischen Einspritzturbulenz proportional zur Mischungsgeschwindigkeit von Kraftstoff und Luft ist, ergibt sich gemeinsam mit der unverbrannten Kraftstoffmasse folgende Formulierung der Brennrate:

$$\frac{dQ_B}{dt} = c_{\text{mod},1} \cdot m_{\text{Krst.,UV}} \cdot e^{\frac{\sqrt{k}}{\sqrt[3]{V_{\text{Zyl}}}}} \cdot H_u \quad (3-41)$$

$c_{\text{mod},1}$:	Abstimmparameter [1/s]
$m_{\text{Krst.,UV}}$:	Unverbrannte Kraftstoffmasse [kg]
H_u :	unterer Heizwert [J/kg]
k :	spezifische Einspritzturbulenz [m ² /s ²]
n :	Drehzahl [U/min]

Die Berechnung der spezifischen Einspritzturbulenz erfolgt beim MCC-Ansatz aus der gerade vorherrschenden globalen Turbulenzenergie, sowie der bisher eingespritzten Kraftstoffmasse und dem globalen Luftverhältnis, siehe Gleichung (3-42). Die Änderung der globalen Turbulenzenergie ergibt sich aus dem Einspritzverlauf und einer zur aktuellen Energie proportionalen Dissipationsrate.

$$k = c_{\text{turb}} \cdot \frac{E_{\text{turb,Zyl}}}{m_{\text{Krst.,Einspr.}} \cdot (1 + \lambda_{\text{Zyl}} \cdot L_{\text{min}})} \quad (3-42)$$

c_{turb} :	Abstimmparameter [-]
$E_{\text{turb,Zyl}}$:	Turbulenzenergie im Brennraum [J]

Für ein vollständiges Verbrennungsmodell fehlten jedoch noch Untermodelle zur Berechnung des Zündverzugs und der Premixed-Verbrennung, die von Chemla et al. 2004 vorgestellt wurden [31]. Die Berechnung des Zündverzugs erfolgt wie auch bei den bisherigen Modell-Ansätzen, vgl. [Abschnitt 3.2.2](#) und [Abschnitt 3.2.3](#), über ein Zündverzugsintegral mit einem Arrhenius-Term, siehe [31] S.5. Innerhalb des erweiterten Modellansatzes wird zwischen zwei globalen Kraftstoffpools unterschieden, vgl. [31] S.6. Zum einen der Kraftstoff der über eine Premixed-Verbrennung umge-

⁶⁴ Diesen Überlegungen lag ein Einspritzdruck von 1200 bar zugrunde.

setzt wird, zum andern der Kraftstoff der über die Diffusionsverbrennung umgesetzt wird. Der eingespritzte Kraftstoff wird anhand der über Gleichung (3-43) berechneten Zuordnungsfunktion dem Premixed- oder dem Diffusionspool zugeordnet. Abbildung 32 bietet eine beispielhafte Darstellung der Zuordnungsfunktion. Der Umschlagpunkt muss so gewählt werden, dass die Funktion bis kurz vor dem Zündzeitpunkt den Wert eins hat und somit der gesamte Kraftstoff dem Premixed-Pool zugeordnet wird. Genauere Informationen über die Festlegung oder Berechnung des Umschlagpunkts, bzw. der Steigung in diesem, sind in [31] jedoch nicht veröffentlicht.

$$f_{\text{Zuord,Pre}} = \frac{1}{1 + e^{\frac{\varphi - a}{b}}} \quad (3-43)$$

- $f_{\text{Zuord,Pre}}$: Zuordnungsfunktion für den Premixed-Pool [-]
 a : Kurbelwinkelstellung des Umschlagpunkts [°KW]
 b : Parameter zur Beeinflussung der Steigung im Umschlagpunkt [°KW]

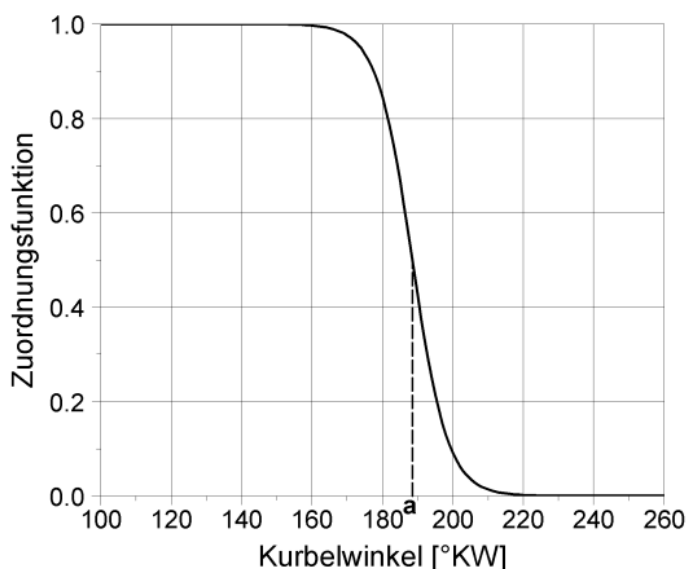


Abbildung 32: Schematische Darstellung der Zuordnungsfunktion (in Anlehnung an [31] S. 6)

Der Kraftstoff des Premixed-Pools wird als gasförmig angenommen, während der Kraftstoff im Diffusionspool zunächst flüssig vorliegt, vgl. [31] S.6 f. Entsprechend wurde ein Verdampfungsmodell integriert, welches die Verdampfungszeit abhängig von Temperatur und spezifischer kinetischer Energie berechnet, siehe Gleichung (3-44), womit dann die Verdampfungsrate bestimmt wird, siehe Gleichung (3-45).

$$\tau_{\text{Verd.}} = c_{\text{Verd.}} \cdot d_D \cdot k^{-1} \cdot T_{\text{Zyl}}^{-3,3} \quad (3-44)$$

- $\tau_{\text{Verd.}}$: Verdampfungszeit bei aktuellen Randbedingungen [s]
 $c_{\text{Verd.}}$: Abstimmparameter der Verdampfung [$\text{m} \cdot \text{K}^{3,3} / \text{s}$]

$$\frac{dm_{\text{Krst.,Diff.,Verd.}}}{dt} = \frac{m_{\text{Krst.,Diff.,fl}}}{\tau_{\text{Verd}}} \quad (3-45)$$

- $dm_{\text{Krst.,Diff.,Verd.}}/dt$: Verdampfungsrate des Kraftstoffs im Diffusionspool [kg/s]
 $m_{\text{Krst.,Diff.,fl}}$: Masse des flüssigen Kraftstoffs im Diffusionspool [kg]

Die Umsetzung des verdampften Kraftstoffs des Diffusions-Pools erfolgt über den bereits bekannten MCC-Ansatz, der etwas angepasst wurde, siehe [31] S. 8 f. Da der Zündverzögerung nun berechnet wird, muss der Brennbeginn nicht länger vorgegeben werden. Außerdem wird statt der Exponentialfunktion nur noch der ehemalige Exponent aus Gleichung (3-41) verwendet und der Term wurde um das globale Luftverhältnis erweitert, um den AGR-Einfluss auf den Brennverlauf abzubilden:

$$\frac{dQ_{B,Diff}}{dt} = c_{mod,1} \cdot m_{Krst.,Diff,UV} \cdot \lambda \cdot \frac{\sqrt{k}}{\sqrt[3]{V_{Zyl}}} \cdot H_u \quad (3-46)$$

- $dQ_{B,Diff}/dt$: Brennverlauf der Diffusionsverbrennung [J/s]
 $c_{mod,1}$: Abstimmparameter [-]
 $m_{Krst.,Diff,UV}$: Masse des unverbrannten, gasförmigen Kraftstoffs im Diffusionspool [kg]

Auch bei der Berechnung der Änderungsrate der globalen Turbulenzenergie gab es Anpassungen. Statt der aktuellen Einspritzrate, wird die um einen festen Betrag verschobene Einspritzrate verwendet. Dadurch soll die Zeit berücksichtigt werden, die der Kraftstoff von der Düse bis zur Flammenzone benötigt⁶⁵.

Die Berechnung der reaktionskinetisch gesteuerten Premixed-Verbrennung erfolgt über einen Arrhenius-Term, siehe Gleichung (3-47). Wie schon beim MCC-Ansatz werden jeweils nur die globalen Werte verwendet. Das Volumen in dem die Verbrennung stattfindet wird unter der Annahme berechnet, dass die Verbrennung bei einem Luftverhältnis von 0,5 stattfindet, siehe Gleichung (3-48), vgl. [31] S. 5 und 8.

$$\frac{dQ_{B,Pre}}{dt} = \frac{c_{Pre,1}}{M_{Luft}} \cdot \lambda_{Pre} \cdot L_{min} \cdot e^{\frac{-c_{Pre,2} \cdot T_{Akt}}{T_{Zyl}}} \cdot \frac{m_{Krst.,Pre,UV}^2}{V_{Pre}} \cdot H_u \quad (3-47)$$

- $dQ_{B,Pre}/dt$: Brennverlauf der Premixedverbrennung [J/s]
 $c_{Pre,1}$: Abstimmparameter der Premixedverbrennung [m³/(mol·s)]
 M_{Luft} : Molare Masse der Luft [kg/mol]
 λ_{Pre} : Luftverhältnis in dem die Premixed-Verbrennung stattfindet (0,5) [-]
 $c_{Pre,2}$: Abstimmparameter [-]
 $m_{Krst.,Pre,UV}$: unverbrannte Kraftstoffmasse des Premixedpools [kg]
 V_{Pre} : Volumen in dem die Premixed-Verbrennung stattfindet [m³]

$$V_{Pre} = \frac{m_{Krst.,Pre,UV}}{\rho_{Krst.,gasf.}} + \frac{0,5 \cdot L_{min} \cdot m_{Krst.,Pre,UV}}{\rho_{Zyl,gasf.}} \quad (3-48)$$

- $\rho_{Krst.,gasf.}$: Dichte des gasförmigen Kraftstoffs [kg/m³]
 $\rho_{Zyl,gasf.}$: Dichte der gasförmigen Ladung im Brennraum [kg/m³]

⁶⁵ Die von Chmela et al. diesbezüglich veröffentlichten Gleichungen sind nicht ganz eindeutig beschrieben, siehe [31] S. 9. Die Gleichung zur Berechnung der Zeitverschiebung enthält die Einspritzgeschwindigkeit, allerdings ist nicht klar, ob die aktuelle Einspritzgeschwindigkeit oder die mittlere Einspritzgeschwindigkeit verwendet wird, wobei letzteres in diesem Modellstadium wahrscheinlicher erscheint.

Mit diesem Modellstand konnten bereits Brennverläufe von Pkw-, wie auch Nfz-Motoren, recht passabel dargestellt werden, vgl. [31] S. 13 f. Dennoch schien es nicht ausreichend, die Verbrennung nur über globale Turbulenzgrößen darzustellen.

Deshalb erweiterten Chemla, Pirker et al. den Modellansatz erneut und veröffentlichte 2006 ein überarbeitetes Modell [32], [117],[33]⁶⁶. Dieses enthielt erstmals den nenngebenden Scheiben-Ansatz. In den Scheiben werden sowohl flüssiger Kraftstoff, als auch gasförmige Komponenten bilanziert. Anders als beim den Paketen befinden sich die gasförmigen Komponenten aber nicht in separaten Zonen, sondern es werden lediglich die Massen bilanziert. Die einzelnen Scheiben haben daher keine eigene Temperatur. Während der Einspritzung werden in diskreten Zeitabständen Kraftstoffscheiben erzeugt, die sich im Brennraum ausbreiten. Dabei durchqueren sie eine empirisch vorgegebene Verteilung des Luftverhältnisses. In Abbildung 33 sind schematisch drei verschiedene Lambda-Bereiche dargestellt, die durch Linien mit konstantem Luftverhältnis getrennt werden.

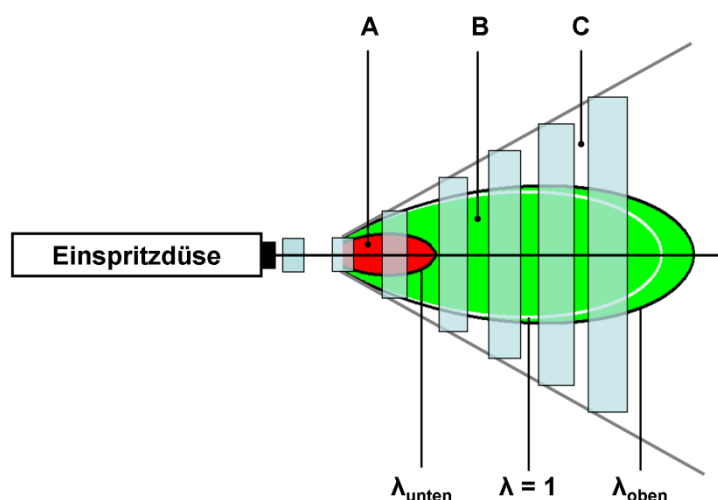


Abbildung 33: Schematische Darstellung der Scheibenausbreitung im Brennraum [127] S. 744

Bereich A stellt einen sehr fetten Bereich dar, in dem so wenig Luft vorhanden ist, dass der Kraftstoff noch nicht verbrennen kann. Innerhalb von Bereich B, in dem auch das stöchiometrische Luftverhältnis liegt, kann eine relativ schnelle Diffusionsverbrennung stattfinden. Bereich C repräsentiert zunehmend magere Gebiete, in denen eine verlangsamte Diffusionsverbrennung stattfindet. Die Linien mit konstantem Luftverhältnis beschreiben die Verhältnisse im ausgebildeten Strahlkegel. Während der Scheibenrand relativ schnell abmagert, dauert dies im Strahlkern wesentlich länger.

Die Berechnung des Zündverzugs wurde von Chmela et al. ebenfalls überarbeitet. Bei der Berechnung des Zündintegrals wird neben der chemischen Reaktionsrate, siehe Gleichung (3-49), nun auch der Einfluss der spezifischen Turbulenz nach Gleichung (3-50) berücksichtigt. Da die Zündverzugsberechnung global erfolgt, wird dazu die globale spezifische Turbulenz verwendet. Es wird angenommen, dass sich die charakteristischen Zeiten der beiden Mechanismen gemeinsam zur Zündverzugszeit

⁶⁶ Die Quellen sind unterschiedlich detailliert und haben nicht in allen Bereichen eine einheitliche Nomenklatur. Die Themenschwerpunkte sind leicht unterschiedlich, wobei die Modellbeschreibung in [117] am detailliertesten ist.

summieren und dass die charakteristischen Zeiten proportional zum Kehrwert der jeweiligen Reaktionsrate sind, vgl. [32] S.470. Daher nimmt das Zündintegral die in Gleichung (3-51) dargestellte Form an.

$$r_{Arr} = c_{Arr} \cdot \beta_{Krst.} \cdot \beta_{O_2} \cdot e^{\frac{-c_{Akt.} \cdot T_{Akt.}}{T_{Zyl}}} \quad (3-49)$$

r_{Arr} : Reaktionsrate des Arrhenius-Terms zur Zündverzugsberechnung [kg/(m³·s)]

c_{Arr} : Abstimmparameter [m³/(kg·s)]

$\beta_{Krst.}$: Kraftstoffmassenkonzentration [kg/m³]

β_{O_2} : Sauerstoffmassenkonzentration [kg/m³]

$c_{Akt.}$: Abstimmparameter [-]

$$r_{Mag} = c_{Mag} \cdot \beta_{O_2} \cdot \frac{\sqrt{k_{Zyl}}}{\sqrt[3]{V_{Zyl}}} \quad (3-50)$$

r_{Mag} : Reaktionsrate des Magnussen-Terms zur Zündverzugsberechnung [kg/(m³·s)]

c_{Mag} : Abstimmparameter [-]

k_{Zyl} : globale spezifische Turbulenz im Brennraum [m²/s²]

$$R_{ZV} \propto \int_{t_{EB}}^t \frac{1}{\tau_{ZV}} dt = \int_{t_{EB}}^t \frac{1}{\tau_{Arr} + \tau_{Mag}} dt$$

$$R_{ZV} = \int_{t_{EB}}^t \frac{1}{\frac{1}{r_{Arr}} + \frac{1}{r_{Mag}}} dt = \int_{t_{EB}}^t \frac{r_{Arr} \cdot r_{Mag}}{r_{Arr} + r_{Mag}} dt \quad (3-51)$$

R_{ZV} : Zündintegral [kg/m³]

τ_{Arr} : Zündverzugszeit entsprechend dem Arrhenius-Term [s]

τ_{Mag} : Zündverzugszeit entsprechend dem Magnussen-Term [s]

Mit Brennbeginn werden die bereits erzeugten Scheiben dem Premixed-Pool zugeordnet. Alle nachfolgenden Scheiben werden, entsprechend ihrer axialen Position, anteilig den drei verschiedenen Lambdabereichen zugeordnet, vgl. A, B, C in Abbildung 33. Die Berechnung der Premixed-Verbrennung erfolgt ähnlich zum bisherigen Stand, vgl. [117] S. 4⁶⁷. Neben der Tatsache, dass die molare Masse der Luft nicht länger in die Rechnung eingeht, ist die einzige relevante Neuerung die Einführung eines quadratischen Zeiterms, vgl. Gleichungen (3-47) und (3-52).

⁶⁷ In [32] S. 472 und [33] S. 2945 sind Gleichungen angegeben, die auch den Magnussen-Term enthalten. Allerdings ist die Reaktionsrate des Magnussen-Terms – die analog zu Gleichung (3-50) berechnet wird – so groß, dass die Reaktionsrate des Arrhenius-Terms wesentlich geringer ist. Somit ist die Arrhenius-Gleichung der geschwindigkeitsbestimmende Term bei der Premixed-Verbrennung, vgl. [32] S. 470 und [33] S. 2944.

$$\frac{dQ_{b,Pre}}{dt} = c_{Pre,1} \cdot \lambda_{Pre} \cdot L_{min} \cdot e^{\frac{-c_{Pre,2} \cdot T_{Akt.}}{T_{Zyl}}} \cdot \frac{m_{Krst.,Pre,UV}^2}{V_{Pre}} \cdot H_U \cdot (t - t_{BB})^2 \quad (3-52)$$

$c_{Pre,1}$: Abstimmparameter der Premixedverbrennung [$m^3/(kg \cdot s^3)$]

Der Scheiben-Ansatz kommt bei der Berechnung der Diffusionsverbrennung zum Tragen. Anders als beim bisher verwendeten MCC-Ansatz wird nun nicht mehr die globale spezifische Turbulenzenergie zur Berechnung der Brennrates herangezogen, sondern die lokale spezifische Turbulenzenergie der jeweiligen Scheibe, siehe [32] S. 472. Die Geschwindigkeitsverteilung einer Scheibe in radialer Richtung ergibt sich aus folgender Gleichung, vgl. [117] S. 7:

$$u_{x,r} = c_{Geschw.} \cdot v_{Einspr.} \cdot \frac{d_D}{x} \cdot e^{-4,6 \left(\frac{r}{R_{Scheibe}} \right)^2} \quad (3-53)$$

$u_{x,r}$: Geschwindigkeit an der radialen Position r einer Scheibe mit dem Abstand x von der Einspritzdüse [m/s]

$c_{Geschw.}$: Parameter zur Abstimmung der Scheibenausbreitungsgeschwindigkeit [-]

x : Abstand der Scheibe von der Einspritzdüse [m]

r : radiale Position innerhalb der Scheibe [m]

$R_{Scheibe}$: Außenradius der Scheibe [m]

Durch Integration der Geschwindigkeit über alle innerhalb des jeweiligen Lambda-Bereichs vorliegenden Scheibenanteile, ergibt sich die kinetische Energie für einen der zwei Diffusionsbereiche (B und C in [Abbildung 33](#)):

$$E_{kin,turb,Bereich} = \frac{1}{2} \cdot \int_{V_{Bereich}} u_{x,r}^2 \cdot \rho_{Gem.,lok} \cdot dV \quad (3-54)$$

$E_{kin,turb,Bereich}$: Turbulenzenenergie innerhalb des jeweiligen Diffusionsbereichs [J]

$V_{Bereich}$: Volumen des betrachteten Diffusionsbereichs [m^3]

$\rho_{Gem.,lok}$: Dichte des lokal vorliegenden Kraftstoff-Luft Gemisches [kg/m^3]

Die zur Berechnung der Turbulenzenergie erforderliche lokale Dichte des Kraftstoff-Luft Gemisches ergibt sich aus der lokalen Kraftstoffkonzentration, welche anhand der vorgegebenen Lambda-Verteilung berechnet werden kann. Durch Integration der lokalen Dichte über alle Volumenanteile ergibt sich auch die im jeweiligen Bereich vorhandene Ladungsmasse:

$$m_{Bereich} = \int_{V_{Bereich}} \rho_{Gem.,lok} \cdot dV \quad (3-55)$$

$m_{Bereich}$: Masse innerhalb des jeweiligen Diffusionsbereichs [kg]

3 Modellscreening

Für die beiden Diffusionsbereiche ergeben sich somit unterschiedliche spezifische Turbulenzen und somit auch unterschiedliche Brennraten, was den Unterschied zu den beiden Entwicklungsstufen des MCC-Ansatzs ausmacht, vgl. Gleichungen (3-41) und (3-46):

$$\frac{dQ_{B,Diff,Bereich}}{dt} = c_{Diff,Bereich} \cdot m_{Krst,Diff,Bereich,UV} \cdot \frac{\sqrt{k_{Bereich}}}{\sqrt[3]{V_{Zyl}}} \cdot H_u \quad (3-56)$$

- $dQ_{B,Diff,Bereich}/dt$: Brennverlauf der Diffusionsverbrennung des jeweiligen Diffusionsbereichs [J/s]
- $c_{Diff,Bereich}$: Abstimmparameter der Diffusionsverbrennung im betrachteten Bereich [-]
- $m_{Krst.,Diff,Bereich,UV}$: Masse des unverbrannten, gasförmigen, Kraftstoffs im betrachteten Diffusionsbereich [kg]
- $k_{Bereich}$: spezifische Turbulenz des betrachteten Bereichs [m^2/s^2]

Es wird auch ein relativ simples Wandanlagerungsmodell vorgestellt, bei dem die über Gleichung (3-55) berechnete Masse um die Scheiben bzw. Scheibenanteile mit Wandkontakt verringert wird, siehe [117] S. 8. Dadurch wird auch die im jeweiligen Bereich zur Verfügung stehende Kraftstoffmasse verringert, wodurch die Brennrate kleiner wird.

Zur Validierung des Scheiben-Modells wurden unter anderem zwei Lastvariationen bei niedrigen Drehzahlen simuliert und mit den dazugehörigen DVA-Brennverläufen verglichen, siehe [Abbildung 34](#). Die unterschiedlich stark ausgeprägte Premixed-Verbrennung wird dabei sehr schön wiedergegeben.

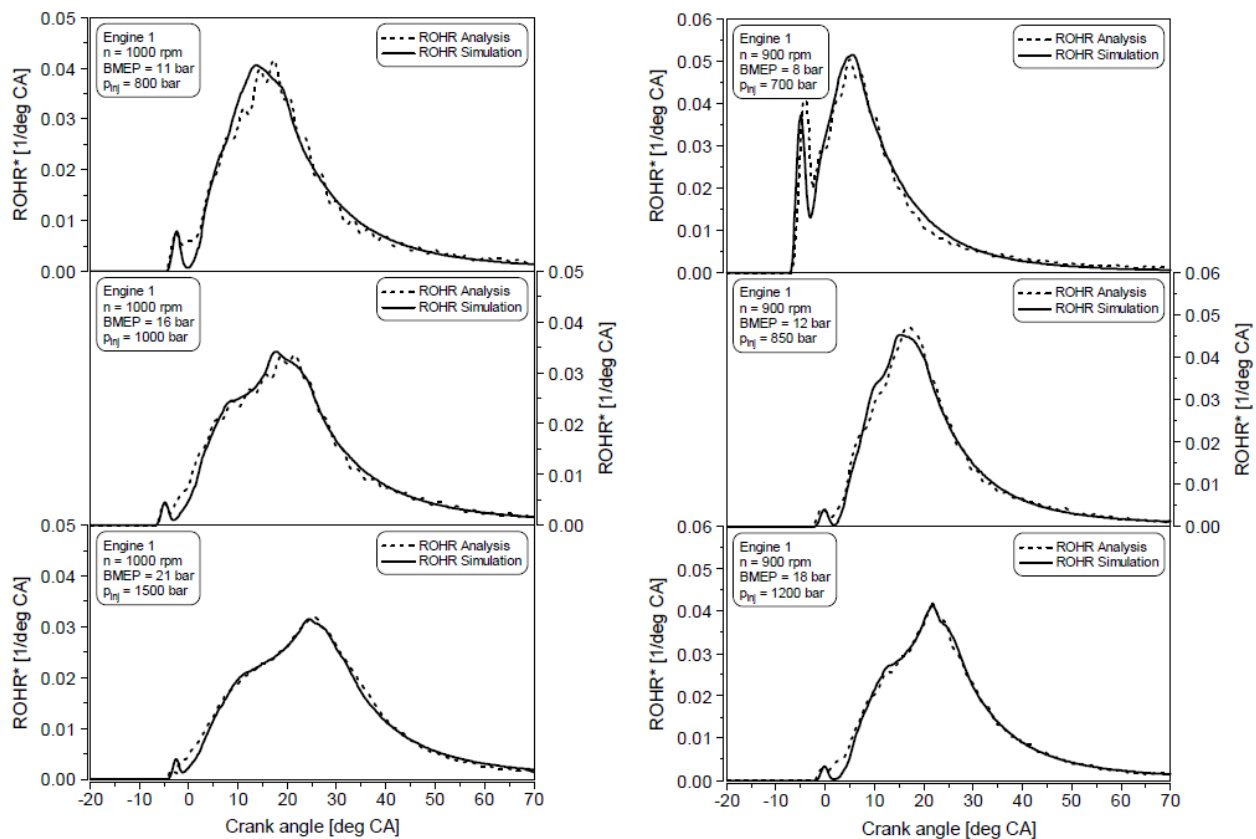


Abbildung 34: Brennverläufe von zwei Lastvariationen an einem Großdieselmotor [117] S. 9 und 10

Am FKFS wurde in den letzten Jahren ebenfalls ein Verbrennungsmodell basierend auf dem Scheiben-Ansatz entwickelt [126], [127], wobei mit diesem auch Betriebspunkte mit Vor- und Nacheinspritzungen simuliert werden können. Dazu werden die Vorverbrennungen über Barbas Ansatz zur Berechnung der Premixed-Verbrennung abgebildet, da dieser, im Gegensatz zum Scheibenmodell, die Ausmagerung von geringen Einspritzmengen darstellen kann. Die Berechnung des Zündverzugs erfolgt wie zuvor beschrieben über einen kombinierten Arrhenius-/Magnussen-Ansatz, wobei der Arrhenius-Term leicht modifiziert wurde. Somit ist es möglich die Zündverzüge der einzelnen Einspritzungen weiterhin über die Massenmitteltemperatur zu bestimmen. Die Berechnung des Premixed- und Diffusionsteils wurde in Details verbessert. Das Modell wurde sowohl an Pkw-, als auch an Nutzfahrzeugmotoren validiert, siehe [126] S. 9 ff, [62] S. 3 f, [127] S. 745 ff, [84]. Bei einer Rechenzeit von einer Sekunde pro Hochdruckteil eines Arbeitsspiels auf einem Desktop-PC ist dabei eine recht hohe Vorhersagegüte erreicht worden, siehe Abbildung 35. Im Vergleich mit den Paket-Modellen, können die Scheiben-Modelle die konventionelle Dieserverbrennung somit bei deutlich geringerer Rechenzeit und wesentlich einfacherer Abstimmung⁶⁸ qualitativ höherwertig darstellen. Dies zeigt, dass eine detailliertere Modellierung nicht zwingend die Vorhersagefähigkeit und somit auch den Nutzen eines phänomenologischen Modells erhöht.

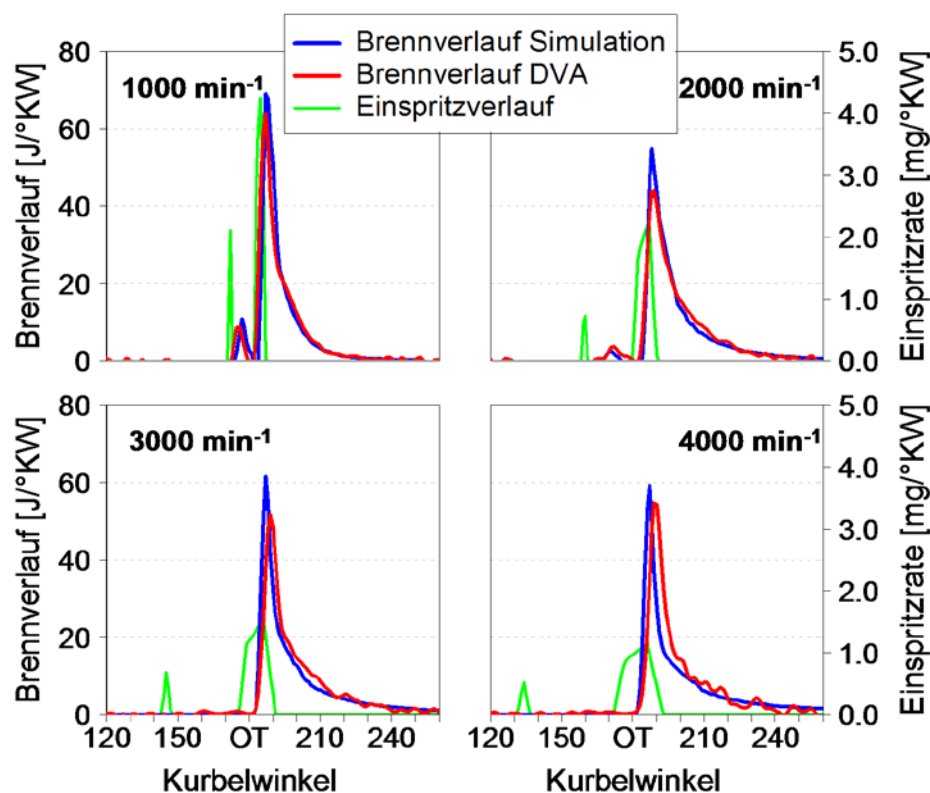


Abbildung 35: Mit einem Scheibenmodell simulierte Drehzahlvariation im Vergleich zur dazugehörigen Messung [127] S. 745

⁶⁸ Bei den Scheiben-Modellen sind die Abstimmparameter – im Gegensatz zu den Paket-Modellen – einzelnen Teilphänomenen (Zündverzug, Verbrennung der Voreinspritzung, Premixed-Verbrennung, Diffusionsverbrennung) zugeordnet, was das Abstimmen für den Anwender spürbar erleichtert. Dagegen wirkt sich bei Paket-Modellen beispielsweise eine Änderung der Abstimmparameter der Strahlausbreitung auf alle Teilphänomene aus, was die Abstimmung insbesondere für unerfahrene Anwender erschwert.

3.3 Phänomenologische Modellierung der homogenen Dieselverbrennung

Zu Beginn der Arbeit gab es einige wenige Veröffentlichungen, die sich bereits mit der phänomenologischen Modellierung der homogenen Dieselverbrennung beschäftigt haben. Dabei kann zwischen Modellen mit Wahrscheinlichkeitsdichte-Ansatz (pdf-Ansatz, probability density function) und denen ohne pdf-Ansatz unterschieden werden. In den nachfolgenden Unterkapiteln werden die verschiedenen Verbrennungsmodelle einzeln vorgestellt.

3.3.1 Diesel-RK Modell

Kuleshov veröffentlicht seit 2005 regelmäßig die Weiterentwicklung seines Verbrennungsmodells Diesel-RK, siehe [87], [88], [89], [90], [91], [92]. Während dies ursprünglich nur die konventionelle Dieselverbrennung bei Mehrfacheinspritzungen simulieren konnte, vgl. [88], [89], [90], wurde es in den letzten Jahren erweitert, um auch die HCCI-Verbrennung darstellen zu können, vgl. [91], [92]. Bei dem Diesel-RK Modell werden die Einspritzstrahlen in Zonen mit charakteristischen Luftverhältnissen aufgeteilt, vgl. [92] S. 7:

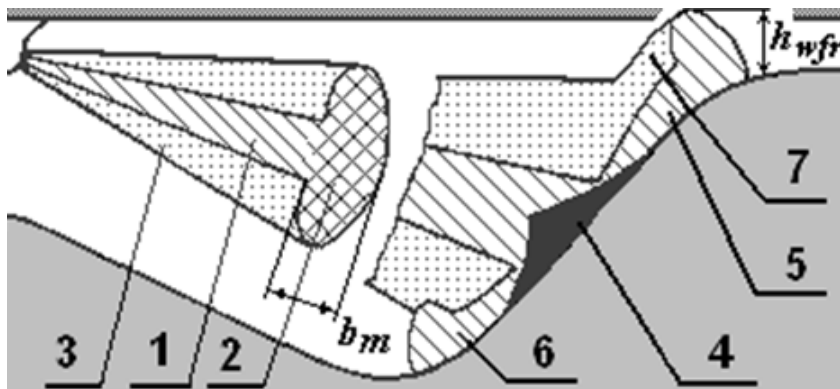


Abbildung 36: Diskretisierung des Einspritzstrahls nach Kuleshov [92] S. 7

Der freie Strahl ohne Wandkontakt wird in die folgenden drei Zonen unterteilt, [92] S. 7:

1. Dichter Strahlkern
2. Dichte, pilzförmige Strahlspitze
3. Verdünnter, seitlicher Strahlaussenbereich

Sobald ein Einspritzstrahl die Wand berührt, werden vier weitere Zonen erzeugt, [92] S. 7:

4. Axialer Kern des Wandfilms
5. Dichter Teil des Wandfilms, der sich auf der Kolbenoberfläche hochbewegt
6. Dichte Strahlfront des Wandfilms, die in Richtung Kolbenmulde wandert
7. Verdünnte Umgebung des Wandfilms

Während der Einspritzung werden in festen Zeitabständen Kraftstoffelemente (EFM, Elementary Fuel Mass) erzeugt, die sich im Brennraum ausbreiten und abhängig von Ihrer Position den verschiedenen Zonen zugeordnet werden, vgl. [92] S. 3. Die Verdampfung wird wie bei Barbas Zeitskalenmodell über einen erweiterten d^2 -Ansatz berechnet, vgl. [92] S. 9, Gleichung (3-14).

Die Zündverzugsberechnung der Hochtemperaturverbrennung jeder einzelnen Einspritzung erfolgt anhand der Massenmitteltemperatur über einen modifizierten Arrhenius-Term in Anlehnung an Tolstov, vgl. [92] S. 10:

$$\tau_{ZV} = 3.8 \cdot 10^{-6} \cdot \left(1 \left[\frac{U}{min} \right] - 1,6 \cdot 10^{-4} \cdot n \right) [min] \cdot \left(\frac{T_{Zyl} \left[\frac{MPa}{K} \right]}{p_{Zyl} \left[\frac{MPa}{K} \right]} \right)^m \cdot e^{\frac{E_{Akt}}{8,312 \cdot T_{Zyl}}} \cdot c_T \cdot c_{AGR} [s] \quad (3-57)$$

- p_{Zyl} : Druck im Brennraum [MPa]
 m : Exponent zur genaueren Abbildung des Druckeinflusses [-]
 c_T : Faktor zur Berücksichtigung von negativen Temperaturgradienten [-]
 c_{AGR} : Faktor zur Abbildung des Restgaseinflusses [-]

Der Exponent m ergibt sich aus nachfolgender Gleichung und soll das veränderte Zündverhalten bei niedrigen Drücken abbilden:

$$m = \max(0,5 [MPa]; 0,64 [MPa] - 0,035 \cdot p_{Zyl}) \left[\frac{1}{MPa} \right] \quad (3-58)$$

Der Faktor c_T wird über ein Polynom dritten Grades berechnet, siehe Gleichung (3-60), welches über eine Messdatenauswertung hergeleitet wurde, vgl. [92] S. 11. Er soll negative Temperaturgradienten berücksichtigen, wie sie bei Einspritzungen nach dem oberen Totpunkt vorliegen. Zunächst wird mit Hilfe von Gleichung (3-59) eine drehzahlgewichtete Temperaturänderungsrate berechnet, deren Grenzwert bei 30 kK/s⁶⁹ liegt. Erst unterhalb dieses Grenzwertes wird der Faktor c_T über Gleichung (3-60) berechnet, ansonsten beträgt er eins⁷⁰, vgl. [92] S. 11. Aus Gleichung (3-60) ergibt sich, dass insbesondere bei negativen Temperaturgradienten der Faktor c_T zunehmend größer wird und damit auch der Zündverzug länger dauert.

$$x_T = \frac{T_{Zyl,i} - T_{Zyl,i-1}}{\Delta\varphi} \cdot \frac{6 \cdot n}{1000} \left[\frac{min \cdot ^\circ KW}{s} \right] \quad (3-59)$$

- x_T : Mittlere Temperaturänderungsrate zwischen dem vorherigen und dem aktuellen Rechenschritt [kK/s]
 $T_{Zyl,i}$: Massenmitteltemperatur im aktuellen Rechenschritt [K]
 $T_{Zyl,i-1}$: Massenmitteltemperatur im vorherigen Rechenschritt [K]

$$c_T = -4 \cdot 10^{-7} \left[\frac{s}{kK} \right]^3 \cdot x_T^3 + 5 \cdot 10^{-5} \left[\frac{s}{kK} \right]^2 \cdot x_T^2 - 3,2 \cdot 10^{-3} \left[\frac{s}{kK} \right] \cdot x_T + 1,0832 \quad (3-60)$$

⁶⁹ Da in Gleichung (3-59) durch 1000 geteilt wird ergibt sich die etwas ungewohnte Einheit Kilokelvin pro Sekunde.

⁷⁰ Bei einer Drehzahl von beispielsweise 2000 U/min entsprechen 30000 K/s einem Temperaturgradienten von 2,5 K/°KW. Der Faktor c_T würde bei dieser Drehzahl somit erst unterhalb dieses Wertes berechnet werden.

Faktor c_{AGR} in Gleichung (3-57) soll den Umstand berücksichtigen, dass der Zündverzug bei höheren Restgasgehalten deutlich zunimmt. Die Berechnung des Faktors ist nicht näher beschrieben, es handelt sich jedoch ebenfalls um einen empirischen Ansatz, siehe [92] S. 11. Bei einem stöchiometrischen Restgasgehalt von 20% beträgt er 1,2 und bei 50% beträgt er ungefähr 1,8.

Über Gleichung (3-57) kann die Zündverzugsdauer mit den Randbedingungen des aktuellen Rechenschritts bestimmt werden. Sobald diese die verstrichene Zeit seit Einspritzbeginn übersteigt und somit erstmalig die in Gleichung (3-61) dargestellte Bedingung erfüllt, kommt es zur Zündung. Bis zu diesem Zeitpunkt ändert sich $\Delta\varphi_{ZV,1}$ mit jedem Rechenschritt.

$$\Delta\varphi_{ZV,I} = \tau_{ZV,I} \cdot 6 \left[\frac{\text{min} \cdot \text{°KW}}{\text{s}} \right] \cdot n \geq \varphi_i - \varphi_{EB} \quad (3-61)$$

$\Delta\varphi_{ZV,I}$: Zündverzugsdauer bei direkter Abschätzung über Gleichung (3-57) [°KW]

$\tau_{ZV,I}$: Zündverzugsdauer bei den Randbedingungen des aktuellen Rechenschritts [s]

Kuleshov et al. stellten fest, dass der auf diese Art berechnete Zündverzug im Vergleich zu vorhandenen Messungen immer höher liegt, siehe [92] S. 11 f. Wenn hingegen in jedem Rechenschritt die über Gleichung (3-57) berechnete Zündverzugszeit in die Berechnung eines Zündintegrals eingeht – Gleichung (3-62) repräsentiert die Situation bei Brennbeginn – wird der Zündverzug immer zu niedrig bestimmt, siehe [92] S. 12.

$$\int_0^{\Delta\varphi_{ZV,II}} \frac{1}{\tau_{ZV}} d\varphi = 1 \quad (3-62)$$

$\Delta\varphi_{ZV,II}$: Zündverzugsdauer bei Berechnung über das Zündintegral [°KW]

Aufgrund der Abweichungen entschlossen sich Kuleshov et al. den arithmetischen Mittelwert der beiden Berechnungsarten zur Bestimmung des Brennbeginns zu verwenden. Die Zündverzugsdauer der Hochtemperaturverbrennung ergibt sich somit aus folgender Gleichung:

$$\Delta\varphi_{ZV,HTC} = \frac{\Delta\varphi_{ZV,I} + \Delta\varphi_{ZV,II}}{2} \quad (3-63)$$

$\Delta\varphi_{ZV,HTC}$: Zündverzugsdauer der Hochtemperaturverbrennung bei Berechnung über den arithmetischen Mittelwert der beiden anderen Berechnungsansätze [°KW]

Kuleshov et al. haben in ihrer neuesten Veröffentlichung auch die Berechnung des Zündverzugs auf Basis tabellierter chemischer Reaktionsraten beschrieben, siehe [92] S. 12 ff. Die Tabelle wurde mit Hilfe von Chemkin erzeugt und benötigt als Eingangsgrößen Massennitteltemperatur, Druck, Luftverhältnis und die Zusammensetzung der Verbrennungsprodukte. Die Einbettung der Tabelle in die Simulation ist jedoch nicht beschrieben. Auch werden keine Brennverläufe präsentiert, die mit Hilfe der Tabelle berechnet wurden. Zu der benötigten Rechenzeit zur Berechnung eines Arbeitsspiels werden ebenfalls keine Angaben gemacht. In erster Linie sollte wohl die grundsätzliche Möglichkeit aufgezeigt werden, den Zündverzug über tabellierte Reaktionsgleichungen zu berechnen, während das kommerzielle Diesel-RK Modell nach wie vor Gleichung (3-63) verwendet. Aus dieser wird die Zündverzugsdauer der

Niedertemperaturverbrennung rückwirkend über folgende empirische Gleichung bestimmt, vgl. [92] S. 14:

$$\Delta\varphi_{ZV,LTC} = 8,281 + 1,0259 \cdot \Delta\varphi_{ZV,HTC} - 4,8822 \cdot \ln(\Delta\varphi_{ZV,HTC}) - \sqrt{31,602 \cdot x_{AGR}} \quad (3-64)$$

$\Delta\varphi_{ZV,LTC}$: Zündverzugsdauer der Niedertemperaturverbrennung [°KW]

Zu einer Niedertemperaturverbrennung kann es somit nur kommen, wenn deren Zündverzugsdauer kürzer ist als die der Hochtemperaturverbrennung. Ohne Restgas ist dies oberhalb einer HTC-Zündverzugsdauer von ca. 9 °KW der Fall, mit 50% Restgas bereits oberhalb von 4 °KW⁷¹. Problematisch ist die Tatsache, dass in Realität die Niedertemperaturverbrennung die Hochtemperaturverbrennung beeinflusst und nicht umgekehrt. Kuleshov et al. haben jedoch aus einer Vielzahl an Messungen die in Gleichung (3-64) dargestellte Korrelation bestimmt, siehe [92] S. 14. Auf den Umstand, dass sie den Zündverzug der Hochtemperaturverbrennung zunächst ohne eine stattfindende Niedertemperaturverbrennung bestimmen und dann die Randbedingungen im Nachhinein ändern, wird in keiner der eingangs genannten Veröffentlichungen eingegangen. Die Niedertemperaturverbrennung wird über eine Vibe-Funktion abgebildet, wobei die insgesamt umgesetzte Wärmemenge über folgende Gleichung berechnet wird:

$$Q_{B,LTC,ges.} = (0,102 - 0,0392 \cdot x_{AGR}) \cdot \left(\frac{81,6}{e^{\Delta\varphi_{LTC,1}}} - \frac{8,88 [°KW]}{\Delta\varphi_{LTC}} + 1,2261 \right) [J] \quad (3-65)$$

$\Delta\varphi_{LTC}$: Kurbelwinkelbereich zur Berechnung der umgesetzten Wärmemenge in der Niedertemperaturverbrennung [°KW]

$Q_{B,LTC,ges.}$: Insgesamt während der Niedertemperaturverbrennung freigesetzte Wärmeenergie [J]

Der in Gleichung (3-65) verwendete Kurbelwinkelbereich entspricht bis zu seinem Maximalwert von 6,7 °KW der Zündverzugsdauer der Niedertemperaturverbrennung, siehe Gleichung (3-66). Der Vibe-Formparameter wird in Abhängigkeit der AGR-Rate berechnet, siehe Gleichung (3-67). Die Brenndauer der Vibe-Funktion beträgt zwischen 6 und 8 °KW, wobei Kuleshov et al. nicht näher beschreiben, wie sie berechnet wird, vgl. [92] S. 15.

$$\Delta\varphi_{LTC} = \max(6,7 [°KW]; \Delta\varphi_{ZV,LTC}) \quad (3-66)$$

$$m_{LTC} = 1,2 + 0,69 \cdot x_{AGR} \quad (3-67)$$

m_{LTC} : Vibe-Formparameter der Niedertemperaturverbrennung [-]

Bezüglich der Modellierung der Hochtemperaturverbrennung und einer genaueren Beschreibung der Gemischbildung sei auf die Originalquellen verwiesen. Mit Hilfe des Diesel-RK Modells sollen HCCI-Betriebspunkte (hier: PCCI - Premixed Charge Compression Ignition) simulierbar sein. Auf Basis der bisherigen Veröffentlichung ist die Vorhersagequalität jedoch nicht überprüfbar, da lediglich die Simulationsergebnisse zweier Betriebspunkte vorgestellt wurden, vgl. [92] S. 16 f. Simuliert wurden zwei verschiedene Einspritzstrategien bei 2600 U/min an einem 4-Zylinder Pkw Mo-

⁷¹ Die exakten Werte liegen bei 5,62 °KW bzw. 2,45 °KW. Allerdings würde dann die Hochtemperaturverbrennung gleichzeitig mit der Niedertemperaturverbrennung beginnen. Bei 9 °KW bzw. 4 °KW beträgt die LTC-Brenndauer ungefähr 2,3 °KW.

tor von Peugeot. In beiden Fällen betrug die AGR-Rate 9,8%. Abbildung 37 zeigt eine dreifache HCCI Einspritzung gefolgt von einer konventionellen Einspritzung kurz vor OT. Bei dem in Abbildung 38 dargestellten Betriebspunkt wurde lediglich eine zweifache HCCI Einspritzung appliziert.

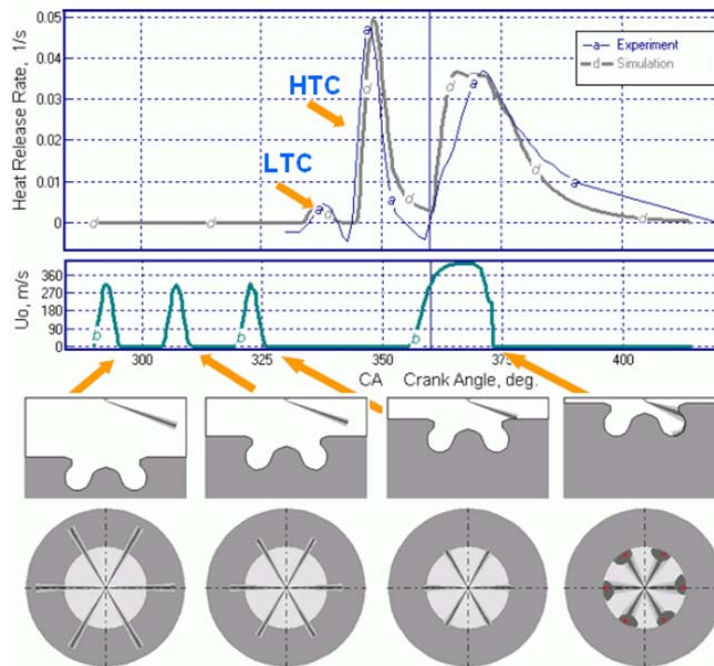


Abbildung 37: Dreifache HCCI-Einspritzung gefolgt von konventioneller Dieselerverbrennung [92] S. 16

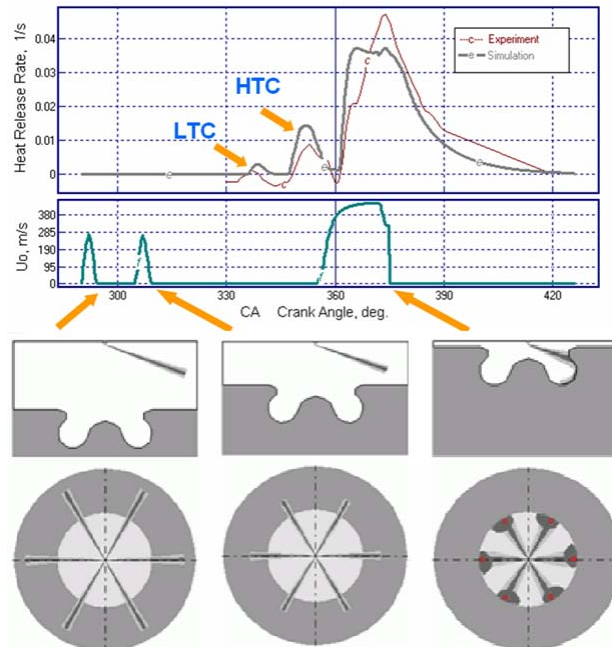


Abbildung 38: Zweifache HCCI-Einspritzung gefolgt von konventioneller Dieselerverbrennung [92] S. 16

Die Simulationsgüte der DI-HCCI Verbrennung ist gut, insbesondere bei der dreifach Einspritzung, wohingegen die konventionelle Dieselerverbrennung in beiden Fällen nur mittelmäßig abgebildet wird. Aufgrund der rein empirischen Berechnung der Nieder-temperaturverbrennung und der Art und Weise ihrer Modellierung sind jedoch Zweifel an der Vorhersagefähigkeit berechtigt.

3.3.2 IFP-Modell

Am Institut Français du Pétrole (IFP) wurde in den letzten Jahren ebenfalls an einem phänomenologischen Modell zur Abbildung homogener Brennverfahren gearbeitet [98], [42]. Innerhalb des IFP-Modells wird die lokale Gemischbildung über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion modelliert, siehe [98] S. 9 f. Der Zündverzug sowie die Niedertemperaturverbrennung werden über chemische Tabellen abgebildet, vgl. [98] S. 5 ff.

Der Einspritzstrahl wird zunächst vereinfacht als Kegelstumpf modelliert, der über die Kegelstumpfhöhe s und den Kegelwinkel ϑ definiert wird:

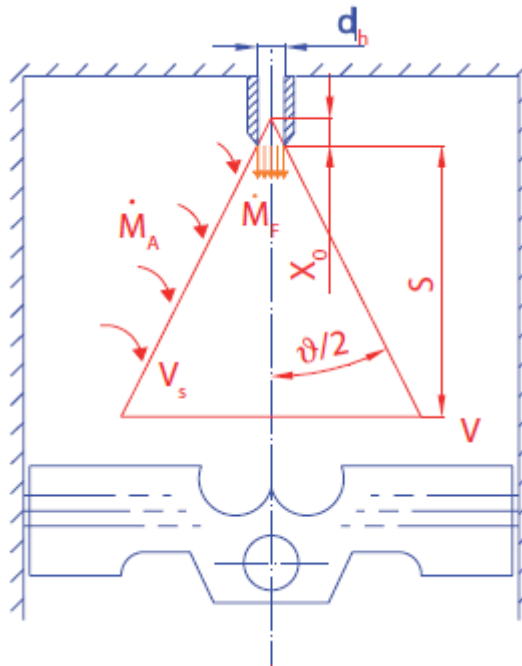


Abbildung 39: Schematische Darstellung des Einspritzstrahls als Kegelstumpf [42] S. 265

Der Kegelwinkel wird nach Naber und Siebers berechnet:

$$\tan\left(\frac{\vartheta}{2}\right) = c_{\text{Kegelwinkel}} \cdot \left[\left(\frac{\rho_{\text{Luft}}}{\rho_{\text{Krst.,fl}}} \right)^{0,19} - 0,0043 \sqrt{\frac{\rho_{\text{Krst.,fl}}}{\rho_{\text{Luft}}}} \right] \quad (3-68)$$

ϑ : Kegelwinkel des Einspritzstrahls [°]

$c_{\text{Kegelwinkel}}$: Parameter zur Abstimmung des Kegelwinkels des Einspritzstrahls [-]

Die Eindringtiefe des Einspritzstrahls (die Kegelstumpfhöhe) wird ebenfalls nach einer Korrelation von Naber und Siebers berechnet, siehe Gleichung (3-69), wobei die Bezugslänge über Gleichung (3-70) berechnet wird, vgl. [42] S. 265.

$$s = x_{\text{Bezug}} \cdot \left[\left(\frac{x_{\text{Bezug}}}{v_{\text{Einspr.}} \cdot t} \right)^{2,2} \cdot \left(\sqrt{\frac{x_{\text{Bezug}}}{v_{\text{Einspr.}} \cdot (t - t_{\text{EB}})}} \right)^{2,2} \right]^{\frac{1}{2,2}} \quad (3-69)$$

s : Eindringtiefe des Einspritzstrahls [m]

x_{Bezug} : Bezugslänge zur Berechnung der Strahlgeometrie [m]

$$x_{\text{Bezug}} = \frac{d_D \cdot \sqrt{\frac{\rho_{\text{Krst.,fl}}}{\rho_{\text{Luft}}}}}{0,66 \cdot \tan\left(\frac{9}{2}\right)} \quad (3-70)$$

Der zeitliche Verlauf des Strahlkegelvolumens ist somit bekannt. Aus der Volumenänderung im aktuellen Rechenschritt kann, unter Berücksichtigung der Luftdichte im Brennraum und bei Vernachlässigung des Kraftstoffs im Strahlkegel, die Ladungsbeimischung in den Einspritzstrahl über Gleichung (3-71) berechnet werden:

$$\frac{dm_{\text{Entr}}}{dt} = \rho_{\text{Luft}} \cdot \frac{dV_{\text{Strahl}}}{dt} \quad (3-71)$$

dm_{Entr}/dt : Aktueller Massenstrom in den Strahlkegel [kg/s]

dV_{Strahl}/dt : Aktuelle Volumenänderungsrate des Strahlkegels [m^3/s]

Die Verdampfungsrate wird über eine charakteristische Zeit berechnet, siehe Gleichung (3-72). Diese Zeit wird anhand der Eindringtiefe des flüssigen Kraftstoffstrahls berechnet, siehe Gleichungen (3-73) und (3-74). Die dimensionslose Größe B in Gleichung (3-74), ist das Verhältnis der Energiedichte des Kraftstoff-Luft Gemisches in Tropfennähe und der Verdampfungsenthalpie des flüssigen Kraftstoffs bei Oberflächentemperatur und wird iterativ bestimmt, vgl. [42] S. 263.

$$\frac{dm_{\text{Verd.}}}{dt} = c_{\text{Verd.}} \cdot \frac{m_{\text{Krst.,fl}}}{\tau_{\text{Verd.}}} \quad (3-72)$$

$$\tau_{\text{Verd.}} = \left(\frac{\tilde{\Gamma}}{2} + \frac{\tilde{\Gamma}}{4} \cdot \sqrt{1 + 16 \cdot \tilde{\Gamma}^2} + \frac{1}{16} \cdot \ln\left(4 \cdot \tilde{\Gamma} + \sqrt{1 + 16 \cdot \tilde{\Gamma}^2}\right) \right) \cdot \frac{x_{\text{Bezug}}}{v_{\text{Einspr.}}} \quad (3-73)$$

$\tau_{\text{Verd.}}$: charakteristische Verdampfungszeit [s]

$\tilde{\Gamma}$: Dimensionslose Eindringtiefe des flüssigen Kraftstoffstrahls [-]

$$\tilde{\Gamma} = \left(b \cdot \sqrt{\left(\frac{2}{B} + 1\right)^2} - 1 \right) \quad (3-74)$$

b: Abstimmparameter [-]

B: Dimensionslose Größe zur Beschreibung des Verdampfungs Zustands [-]

Da die Wärmefreisetzung in dem Modell über einen tabellierten Reaktionsmechanismus abgebildet wird, müssen die lokale Temperatur- und Gemischzusammensetzung im Brennraum bekannt sein, da diese Eingangsgrößen für die Tabelle mit den Reaktionsraten sind, vgl. [42] S. 267 und 272. Der Verlauf dieser beiden Größen wird über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (probability density function - pdf) abgebildet.

Zum Verständnis soll die Vermischung von Kraftstoff und Luft in einem abgeschlossenen System mit konstantem Volumen betrachtet werden. Abbildung 40 zeigt die anhand einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion berechnete Verteilung der Zustandsgröße Z in dem System zu verschiedenen Zeitpunkten. Geht man von einem nicht reaktiven Gemisch aus entspricht die Zustandsgröße dem lokalen Kraftstoffmassenanteil, vgl. [42] S. 268.

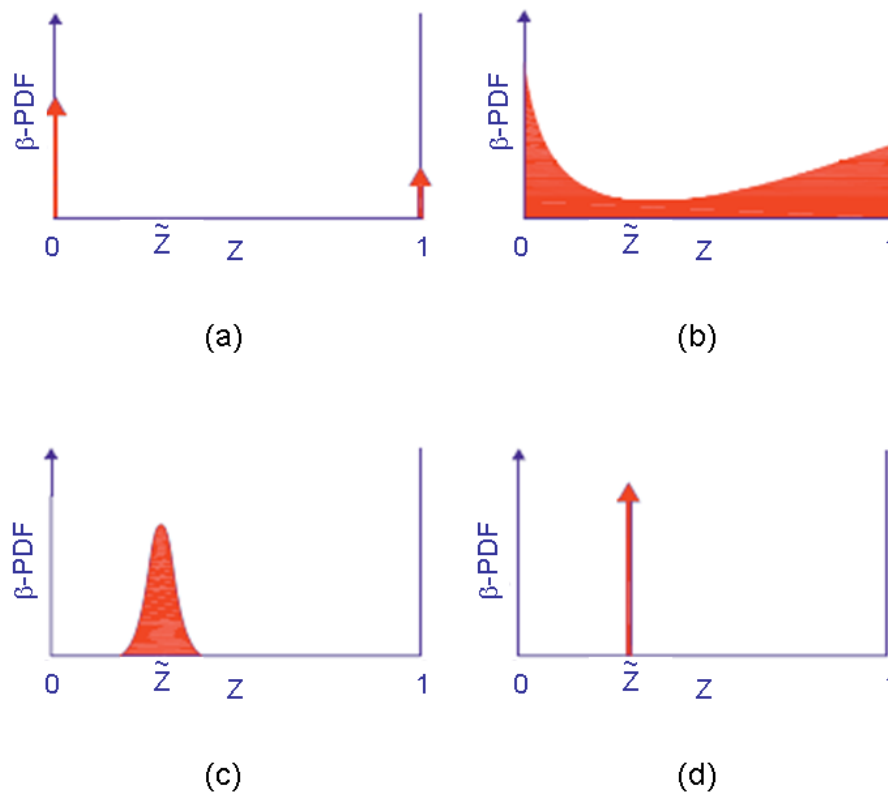


Abbildung 40: Zeitlicher Verlauf (a-d) der Gemischverteilung bei Vermischung von Kraftstoff und Luft in einem abgeschlossenem System [42] S. 268

Zu Beginn seien Kraftstoff ($Z=1$) und Luft ($Z=0$) vollständig getrennt (a). Ausgehend davon werden sich lokal Bereiche bilden, in denen entweder viel Kraftstoff mit wenig Luft vorliegt, oder umgekehrt. Bereiche in denen lokal bereits der globale Kraftstoffmassenanteil⁷² \tilde{z} vorliegt, werden eher selten sein (b). Ab einem gewissen Zeitpunkt gibt es schließlich keine Stelle mehr, an der reine Luft oder reiner Kraftstoff vorhanden ist. Stattdessen bildet sich um den globalen Kraftstoffmassenanteil eine Art Gauss-Verteilung (c). Bei vollständiger Homogenisierung liegt in allen Punkten des Systems das globale Luftverhältnis vor (d). Diese Berechnungen lassen sich auf den Einspritzstrahl als Bilanzraum übertragen, wobei unter anderem folgende Aspekte berücksichtigt werden müssen, siehe [42] S. 269:

- Das Volumen und die Gesamtmasse des Einspritzstrahls verändern sich mit der Zeit
- Das globale Luftverhältnis ist erst ab Einspritzende konstant

Bezüglich der mathematischen Beschreibung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion sei auf die Original-Literatur verwiesen, siehe [98] S.9 und [42] S. 268 f.

Das zweistufige Zündverhalten von Dieselkraftstoff soll über einen detaillierten Reaktionsmechanismus mit 544 Spezies und 2446 Reaktionen abgebildet werden, siehe [42] S. 270. Da dies den vertretbaren Rechenaufwand für ein phänomenologisches Modell bei weitem übersteigt, wurde mit Hilfe des Reaktionsmechanismus eine Tabelle erstellt, welche die Massenänderungsraten der wichtigsten Spezies enthält.

⁷² Dieser lässt sich in das globale Luftverhältnis überführen.

Dabei handelt es sich um die vier Spezies O_2 , CO_2 , CO und H die im weiteren Verlauf als Prozessspezies bezeichnet werden. Aus diesen lassen sich über Bilanzgleichungen die Massen von vier weiteren Spezies C_7H_{16} , N_2 , H_2O und H_2 berechnen, vgl. [42] S. 271. Um die Tabelle zu erstellen wurde ein homogener Reaktor modelliert, in dem die Wärmefreisetzung über den detaillierten Reaktionsmechanismus berechnet wird. Im Anschluss wurden die Eingangsgrößen Druck, Temperatur, Äquivalenzverhältnis (Kehrwert des Luftverhältnisses) und AGR-Rate nach einem festgelegten Schema variiert. Die dabei auftretenden Massenänderungsraten der Prozessspezies wurden in Abhängigkeit einer Fortschrittsvariable, deren Definition aus Gleichung (3-75) ersichtlich ist, in der Tabelle abgelegt. Die Variable beschreibt den Prozessfortschritt anhand von drei der vier Prozessspezies, siehe Gleichung (3-76). Ausgehend von dem Zustand vor Verbrennung ($\chi=0$) steigt die Fortschrittsvariable während der Verbrennung monoton an, bis der Zustand der vollständigen Verbrennung ($\chi=1$) erreicht ist, siehe Abbildung 41.

$$\chi = \frac{\xi_c - \xi_{c,0}}{\xi_{c,Ggw.} - \xi_{c,0}} \quad (3-75)$$

- χ : Fortschrittsvariable [-]
 ξ_c : Massenanteil der prozeßvarianten Spezies [-]
 $\xi_{c,0}$: Massenanteil der prozeßvarianten Spezies bei Rechenbeginn [-]
 $\xi_{c,Ggw.}$: Massenanteil der prozeßvarianten Spezies im Gleichgewichtszustand [-]

$$\xi_c = -\xi_{O_2} + \xi_{CO} + \xi_{CO_2} \quad (3-76)$$

- ξ_{O_2} : Sauerstoffmassenanteil [-]
 ξ_{CO} : Kohlenstoffmonoxidmassenanteil [-]
 ξ_{CO_2} : Kohlenstoffdioxidmassenanteil [-]

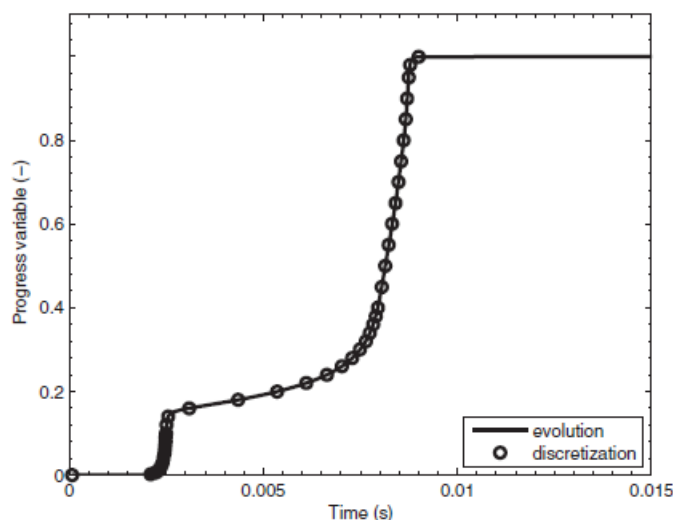


Abbildung 41: Beispielhafte Darstellung der Fortschrittsvariable mit den in der Tabelle abgelegten Werten [42] S. 271

Die über die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion berechnete Verteilung des lokalen Kraftstoffmassenanteils im Einspritzkegel lässt sich in eine Verteilung des Äquivalenzverhältnisses überführen, siehe [42] S. 272. Die Temperaturverteilung im Einspritzkegel wird daraus ebenfalls abgeleitet, vgl. [42] S. 273. Druck, AGR-Rate

und Fortschrittsvariable sind im gesamten Einspritzkegel jeweils einheitliche Funktionen der Zeit, die örtlich nicht weiter diskretisiert sind.

Während der Hochdruckrechnung kann mit Hilfe der Tabelle für jedes Diskretisierungsvolumen des Einspritzkegels – anhand der dort vorliegenden Randbedingungen – die Massenänderungsraten der einzelnen Spezies bestimmt werden. Wenn die vorliegenden Randbedingungen innerhalb der tabellierten Randbedingungen liegen, wird über ein spezielles Verfahren interpoliert, das die Nichtlinearität der Chemie berücksichtigt, siehe [42] S. 274. Da eine Extrapolation mit großen Unsicherheiten behaftet wäre, werden in solchen Fällen die Massenänderungsraten auf Null gesetzt, siehe [42] S. 273. Aus den Massenänderungsraten kann die Wärmefreisetzung innerhalb des Diskretisierungsvolumens und in Folge innerhalb des gesamten Brennraums berechnet werden.

Das Modell wurde an einem Referenzpunkt mit konventionellen Brennverfahren abgestimmt, siehe [42] S. 276. Im Anschluss wurden mit diesem Parametersatz sieben weitere Betriebspunkte simuliert. Dabei handelt es sich um eine AGR-Variation bei HCLI-Betrieb⁷³, eine Lastvariation (konventionelle Dieselerbrennung) und eine Einspritzbeginnvariation (HCLI). Anhand der veröffentlichten Druckverläufe kann man nachvollziehen, dass das Modell das Auftreten eines zweistufigen Zündverhaltens vorhersagen kann, vgl. [42] S. 277 f. Der Brennbeginn wird sehr gut vorhergesagt, vgl. [42] S. 279. Die Lage des 50% Umsatzpunktes weicht zwischen Simulation und Messung etwas stärker ab, kann jedoch ebenfalls als gut bezeichnet werden. Die Lage der 90% Umsatzpunkte wird nicht dargestellt, allerdings merken Dulbecco et al. an, dass dort größere Abweichungen vorliegen. Auf die Darstellung von Brennverläufen verzichteten sie, dafür wurden die Zylinderdruckverläufe aller Betriebspunkte dargestellt. Die Rechenzeit für ein vollständiges Arbeitsspiel wird mit dem 100-fachen der realen Verbrennung angegeben, siehe [42] S. 280. Bei 2000 U/min entspricht dies sechs Sekunden. Damit hat das Modell akzeptable Rechenzeiten.

3.3.3 Toyota-Modell

Nakayama et al. von Toyota haben 2007 ein Verbrennungsmodell vorgestellt, bei dem die Gemischbildung ebenfalls über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion abgebildet wird [111]. Im Gegensatz zum IFP-Modell wird die Wärmefreisetzung jedoch nicht anhand einer tabellierten Reaktionskinetik bestimmt, sondern direkt während der Simulation über einen vereinfachten Reaktionsmechanismus berechnet. Das Modell wurde so ausgelegt, dass es neben der homogenen Dieselerbrennung auch konventionelle Dieselerbrennverfahren mit bis zu zwei Voreinspritzungen abbilden kann.

Bei Einlass-Schließt besteht der Brennraum zunächst aus einer einzigen Zone (#2), siehe Abbildung 42. Die Haupteinspritzung wird über zwei separate Zonen für die Premixed- (#1) und Diffusionsverbrennung (#3) abgebildet, Voreinspritzungen jeweils nur über eine eigenständige Zone (#4 und #5).

⁷³ In der Veröffentlichung wird die Bezeichnung HCCI verwendet. Der Einspritzbeginn variiert zwischen 10 und 6 °KW v. OT, siehe [42] S. 274. Es handelt sich also um HCLI-Betriebspunkte.

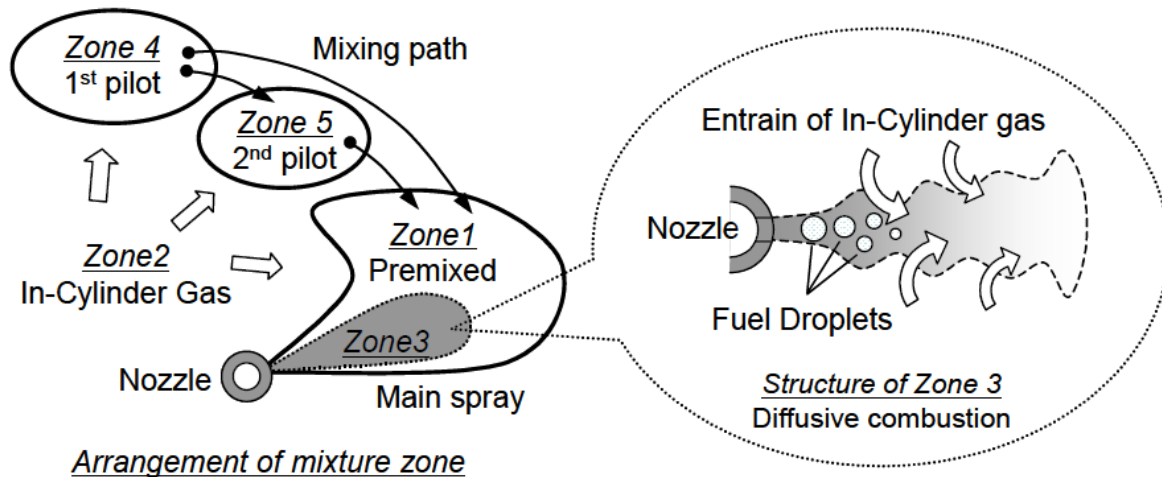


Abbildung 42: Aufteilung des Brennraums in verschiedene Zonen [111] S. 3

Vor Ablauf des Zündverzugs wird der Kraftstoff der Haupteinspritzung der Premixed-Zone zugeordnet, danach der Diffusions-Zone. Die Luftbeimischung findet zunächst aus der Ladungszone (#2) in die Zonen der einzelnen Einspritzungen statt. Bei Mehrfacheinspritzungen kommt es zusätzlich zu einer Beimischung aus den Zonen der vorherigen Einspritzungen, in diejenigen der nachfolgenden Einspritzungen, wodurch das geänderte Zündverhalten abgebildet werden soll. Die Beimischrate ergibt sich wie beim IFP-Modell anhand der Volumenzunahme eines Einspritzkegels, wobei sich die Formeln zur Berechnung des Kegelwinkels und der Strahllänge (Gleichungen (3-68) bis (3-70)) unterscheiden, vgl. [111] S. 3. Die Lambda-Verteilung innerhalb der Zonen wird über die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion modelliert.

Die Wärmefreisetzung bis 1000 K wird über das Shell-Modell abgebildet. Dieses wurde 1975 von Halstead et al. vorgestellt [65] und ist ein Modell zur Berechnung des Zündverzugs von Alkanen wie beispielsweise n-Heptan, vgl. Kapitel 2.2. Das Modell kann somit die Niedertemperaturverbrennung darstellen. Es besteht aus zwölf Reaktionsgleichungen, elf Spezies und theoretisch 24 Abstimmparametern⁷⁴, vgl. [65] S. 530. Halstead et al. vereinfachten die chemischen Reaktionsraten weiter, so dass zur Berechnung letztlich nur vier Differentialgleichungen gelöst werden mussten⁷⁵, siehe [65] S. 529 und 531. Ob Nakayama et al. die ursprünglichen zwölf Reaktionsgleichungen oder das vereinfachte Modell implementiert haben, geht aus [111] nicht hervor.

⁷⁴ Von jeder Reaktion kann der präexponentielle Faktor und die Aktivierungsenergie angepasst werden, somit ergeben sich in Summe 24 Abstimmparameter. Halstead et al. verwenden bei einigen Reaktionen die gleichen Werte, siehe [65] S. 532.

⁷⁵ Thoma untersuchte eine Variante des Shell-Modells, die aus acht Reaktionsgleichungen und fünf Spezies besteht, siehe [151] S. 27 f.

Oberhalb von 1000 K wird die Verbrennung über einen gekoppelten Arrhenius & k-ε Ansatz berechnet, siehe Gleichungen (3-77) bis (3-79).

$$\frac{d\xi_{\text{Krst.,UV}}}{dt} = -\frac{\xi_{\text{Krst.,UV}}}{\tau_{\text{char,lam}} + f \cdot \tau_{\text{char,turb}}} \quad (3-77)$$

$d\xi_{\text{Krst.,UV}}$: Änderungsrate des Massenanteils des unverbrannten Kraftstoffs [1/s]

$\xi_{\text{Krst.,UV}}$: Massenanteils des unverbrannten Kraftstoffs [-]

$\tau_{\text{char,lam}}$: Charakteristische Zeit des laminaren Verbrennungsanteils [s]

f : Eine in Quelle [111] nicht näher beschriebene Funktion [-]

$\tau_{\text{char,turb}}$: Charakteristische Zeit des turbulenten Verbrennungsanteils [s]

$$\tau_{\text{char,lam}} = \frac{1 \left[\left(\frac{\text{mol}}{\text{m}^3} \right)^2 \text{s} \right]}{[\text{Krst.,UV}] \cdot [\text{O}_2] \cdot e^{\frac{-E_{\text{Akt.}}}{R \cdot T_{\text{Zone}}}}} \quad (3-78)$$

$[\text{Krst.,UV}]$: Stoffmengenkonzentration des unverbrannten Kraftstoffs [mol/m³]

$[\text{O}_2]$: Stoffmengenkonzentration des Sauerstoffs [mol/m³]

$$\tau_{\text{char,turb}} = C_{\text{turb}} \cdot \frac{k}{\varepsilon} \quad (3-79)$$

C_{turb} : Abstimmparameter für den turbulenten Verbrennungsanteil [-]

Nakayama et al. präsentierten einige Simulationsergebnisse, wobei hier nur diejenigen mit Bezug zur homogenen Dieselerverbrennung vorgestellt werden. Versuchsträger war ein Einzylindermotor mit 750 cm³, siehe [111] S. 7. Abbildung 43 zeigt eine AGR-Variation bei nicht näher beschriebenen Randbedingungen. In der Messung tritt, insbesondere bei niedriger AGR-Rate, eine Niedertemperaturverbrennung auf. Mit zunehmender AGR-Rate nimmt die maximale Brennrate ab und die Brenndauer dafür zu. In der Simulation werden diese Aspekte sowohl qualitativ als auch quantitativ sehr gut wiedergegeben.

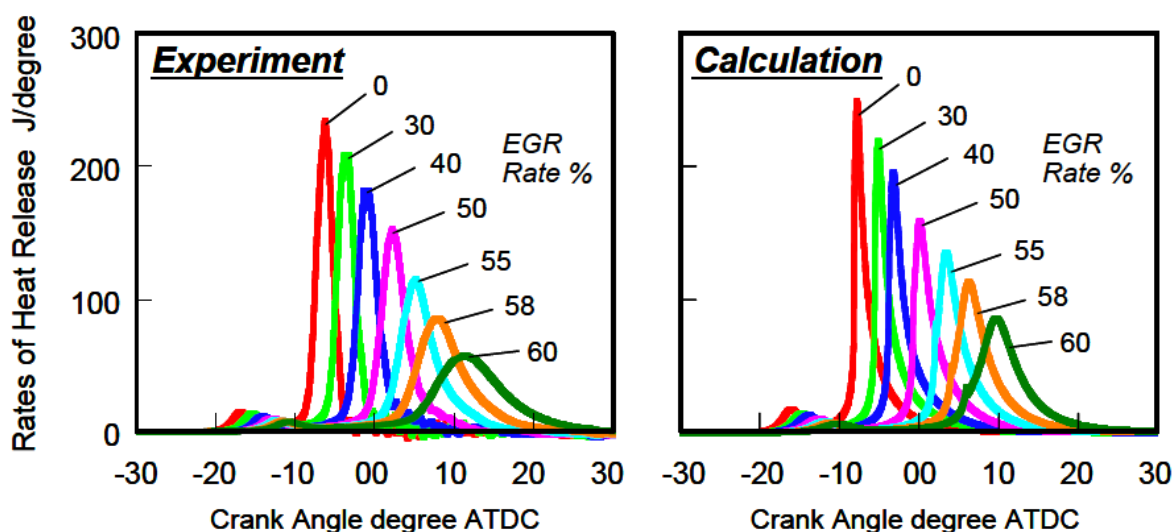


Abbildung 43: Vergleich zwischen Simulation und DVA-Brennverlauf [111] S. 12

Nakayama et al. heben hervor, dass sie auch den transienten Übergang zwischen konventioneller und homogener⁷⁶ Dieselerbrennung mit ihrem Modell abbilden können, siehe [111] S. 13 f. In Punkt B wurde das Einspritztiming übergangslos auf homogenen Betrieb umgestellt, siehe Abbildung 44. Dies führt zu einer sehr schnellen Verbrennung, vgl. Abbildung 45. Die Restgasrate wird in Folge deutlich erhöht, was zu einer Dämpfung der Verbrennung führt. Eine Messung dieses Übergangs wurde nicht veröffentlicht.

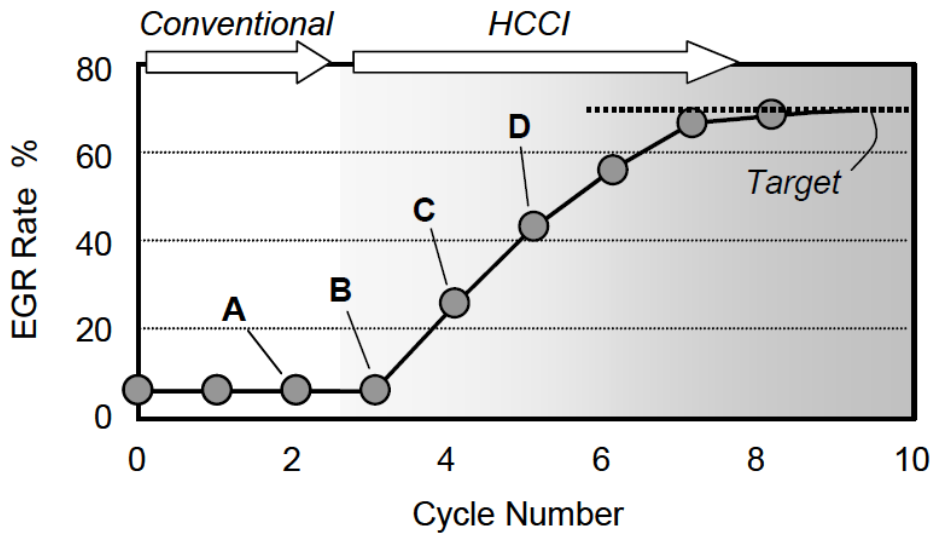


Abbildung 44: Schematischer Ablauf des Übergangs zwischen konventioneller und homogener Dieselerbrennung [111] S. 13

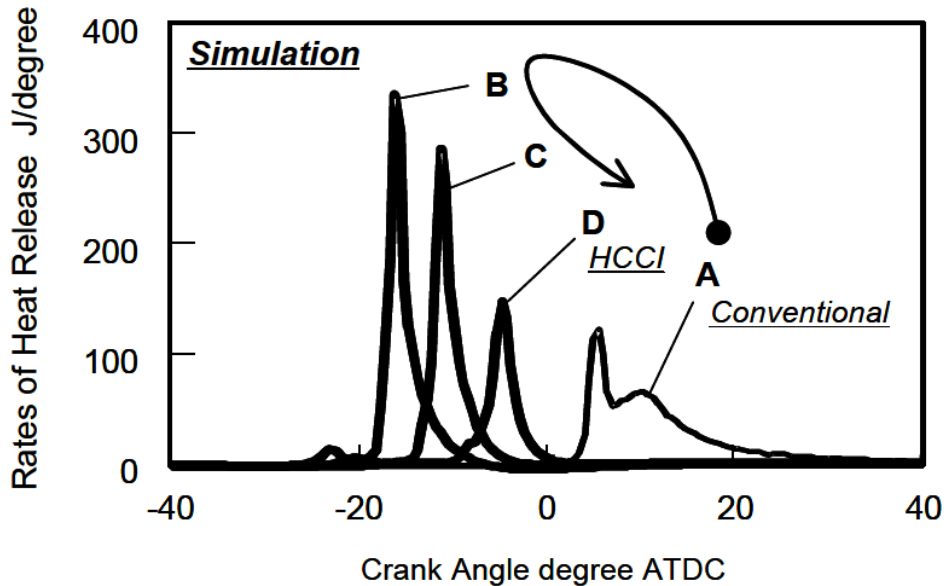


Abbildung 45: Simulierte Brennverläufe des Übergangs zwischen konventioneller und homogener Dieselerbrennung [111] S. 14

⁷⁶ Nakayama et al. verwenden die Bezeichnung HCCI. Über die Einspritztimings ist nichts bekannt. Aufgrund der Schwerpunktlagen der Brennverläufe ist es jedoch nicht auszuschließen, dass es sich auch um ein HCLI-Brennverfahren handelt.

Eine abschließende Beurteilung der Vorhersagefähigkeit des Modells ist jedoch nicht möglich, da die Randbedingungen der Betriebspunkte nicht bekannt sind. Hinsichtlich der verwendeten Abstimmparameter werden keine Angaben gemacht. Die Rechenzeit wird mit einigen Minuten pro Arbeitsspiel angegeben, siehe [111] S. 14. Für ein phänomenologisches Modell ist dies zu hoch.

4 Beschreibung des neuen Modellansatzes

4.1 Gesamtaufbau

Das in dieser Arbeit entwickelte Modell wurde in das FVV-Zylindermodul [60] in Form des neuen Moduls „HomBrennrateFVV“ integriert. HomBrennrateFVV enthält alle in diesem Kapitel beschriebenen Untermodelle. Aufgrund des modularen Aufbaus des Zylindermoduls kann das Verbrennungsmodell mit gängigen Kalorik-, Verdampfungs- und Wandwärme-Ansätzen kombiniert werden, weshalb auf eine nähere Beschreibung dieser Komponenten verzichtet wird. Das Zylindermodul bilanziert die Massen- und Energieströme innerhalb und ggf. auch zwischen Zonen. Die numerische Integration erfolgt mit Hilfe des Runge-Kutta 4-Schritt Verfahrens mit fester Rechen-schrittweite. Der im Verlauf der Arbeit entstandene Programmcode wurde an dieses Integrationsverfahren angepasst, insbesondere die in Kapitel 4.3 dargestellten Berechnungen mit vereinfachter Reaktionskinetik. Die zur Validierung herangezogenen Messdaten von Haas stammen von einem Pkw-Einzyliermotor der Baureihe OM611 von Daimler-Chrysler, siehe Kapitel 5.1.

Unabhängig von der Art der Gemischbildung (Extern oder Direkteinspritzung) befindet sich bei Rechenbeginn (Einlass-Schließt) die gesamte Gasmasse des Zylinders in der Frischladungszone:

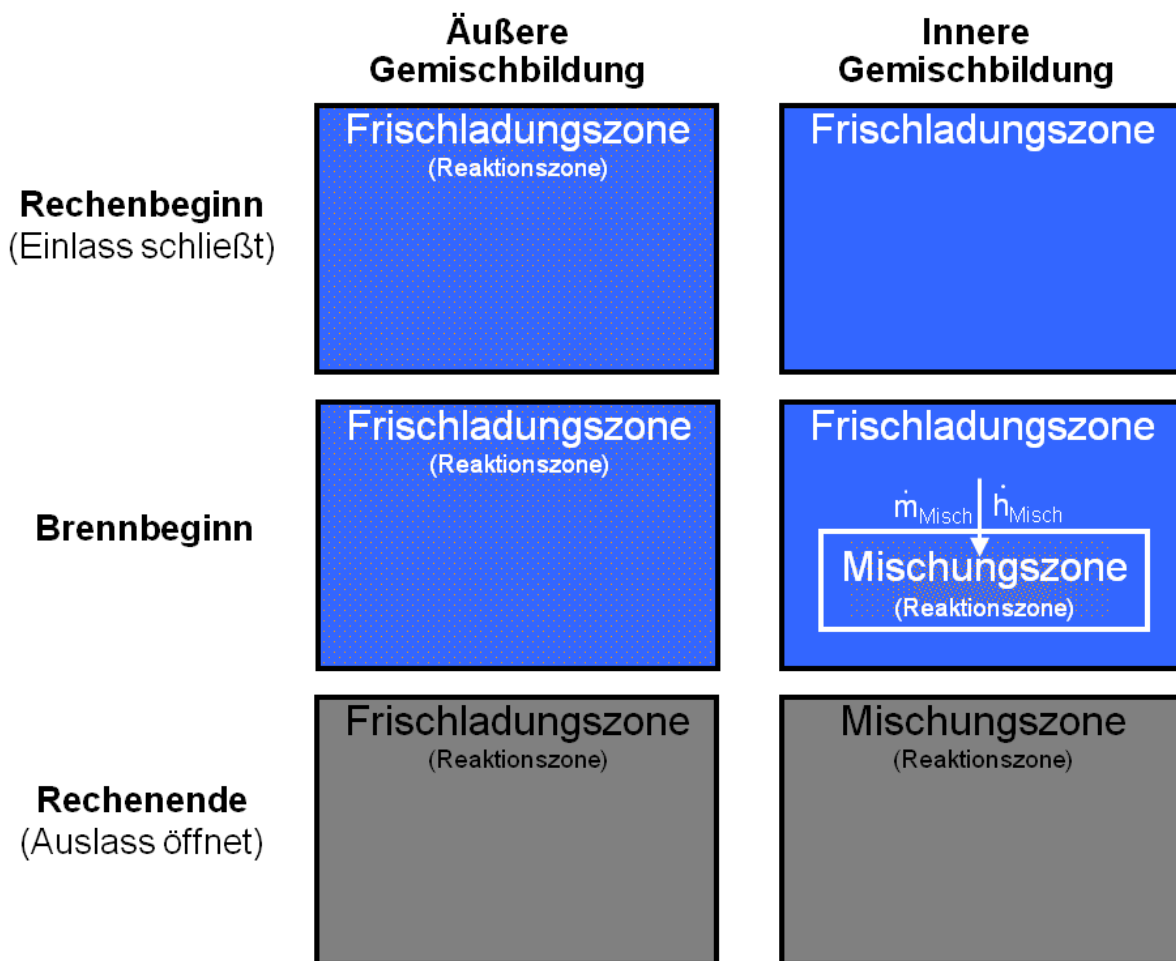


Abbildung 46: Schematische Darstellung der Zonenaufteilung im Verlauf des Hochdruckteils

Bei äußerer Gemischbildung findet die gesamte Berechnung innerhalb der Frischladungszone statt. Wie die von Haas durchgeführten Untersuchungen gezeigt haben,

kann mit Hilfe eines Atomizers im Brennraum ein sehr homogenes Gemisch erzeugt werden, bei dessen Verbrennung so gut wie keine Ruß- oder Stickoxidemissionen entstehen, siehe [63] S. VII f. Von daher erscheint es bei äußerer Gemischbildung nicht notwendig Gemischinhomogenitäten über verschiedene Zonen darzustellen. Die von Lämmle am LAV in Zürich durchgeführte 3D-CFD Simulation eines Atomizer-Betriebspunktes zeigt allerdings, dass sich aufgrund der Wandwärmeverluste bereits im Verlauf der Kompression eine inhomogene Temperaturverteilung im Brennraum ausbildet, vgl. [128] S. 91-93:

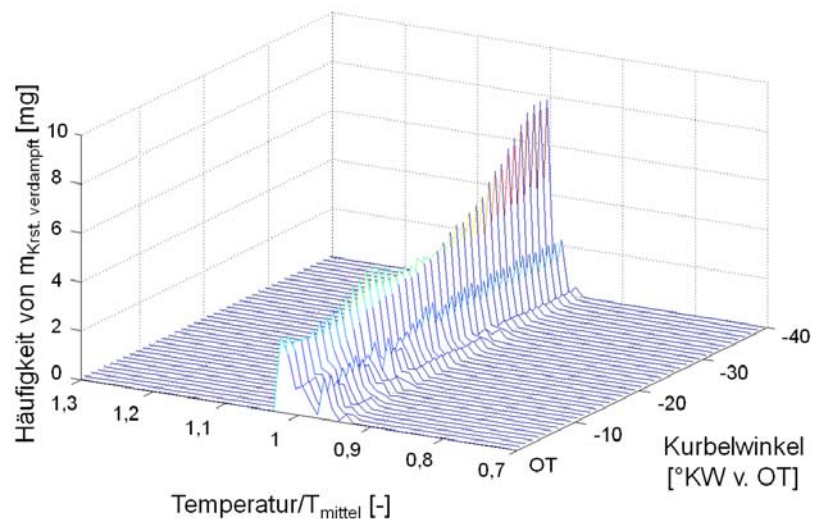


Abbildung 47: Relative Häufigkeitsverteilung der Temperatur des gasförmigen Kraftstoffs als Funktion des Kurbelwinkels bei Simulation eines Atomizer-Betriebspunktes ohne Abbildung der Verbrennung [128] S. 92

Dass diese Temperaturinhomogenitäten in Hinblick auf die Hochtemperaturverbrennung nicht vernachlässigbar sind, zeigt die Simulation eines Atomizer-Betriebspunktes, bei dem die Wärmefreisetzung innerhalb der Frischladungszone während der gesamten Hochdruckphase mit dem in [Kapitel 4.3](#) beschriebenen Zheng-Mechanismus berechnet wird:

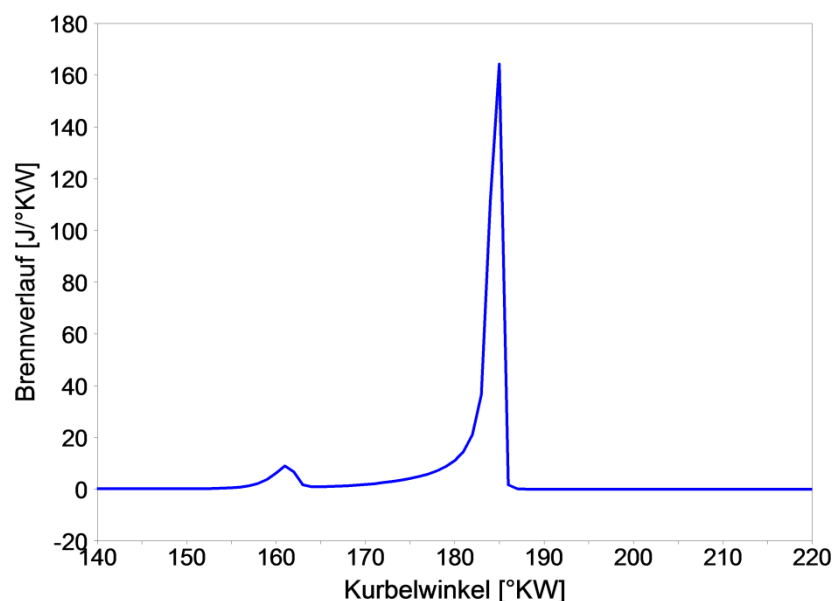


Abbildung 48: Simulation eines Atomizer-Betriebspunktes (Einzonig, Zheng-Mechanismus)

Während sich für die Niedertemperaturverbrennung ein charakteristischer Brennverlauf ergibt, siehe [Abbildung 48](#), kommt es zu einem viel zu schnellen Durchbrennen der Hochtemperaturverbrennung. Lämmle untersuchte sowohl unterschiedliche Reaktionsmechanismen, als auch den Einfluss der Zonenanzahl auf die Vorhersagefähigkeit eines Mechanismus, siehe [128] S. 84-89. Dies brachte zwei Erkenntnisse hervor:

1.) Wenn der gesamte Brennraum als einzelne Zone modelliert wird (homogener Reaktor), kann die Wärmefreisetzung der Hochtemperaturverbrennung selbst mit vergleichsweise detaillierten Reaktionsmechanismen nicht zufriedenstellend abgebildet werden, siehe [Abbildung 49](#). Diese Thematik wird in [Kapitel 4.3](#) eingehend erörtert.

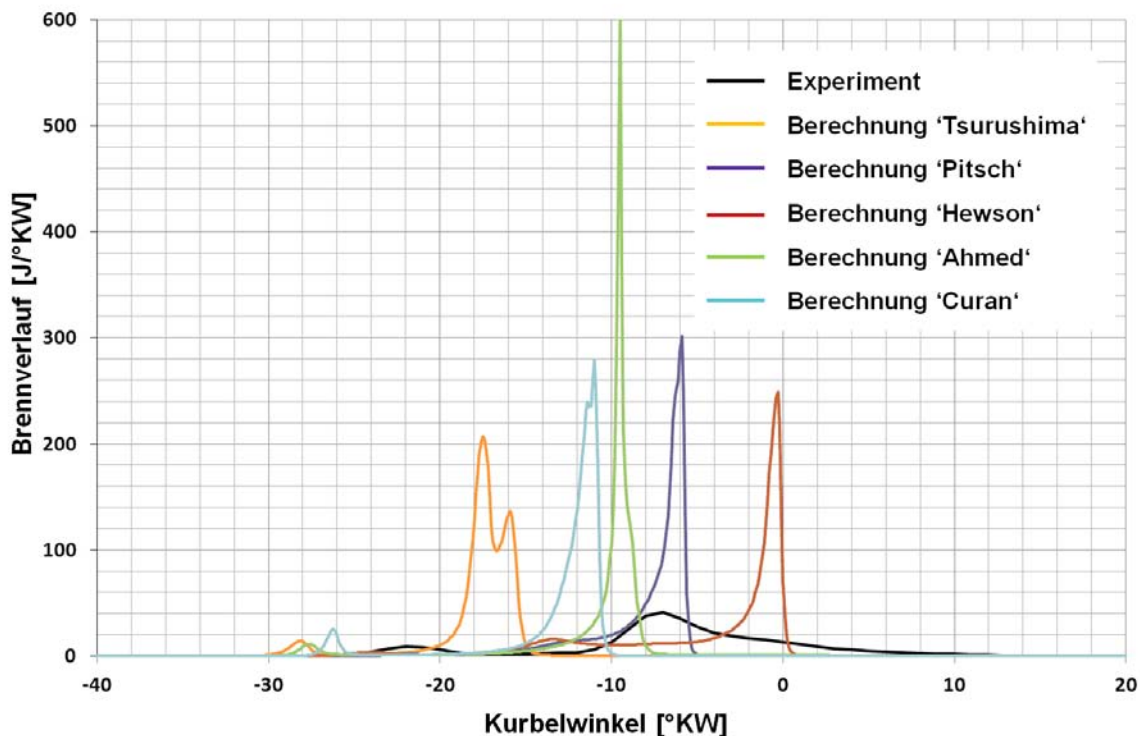


Abbildung 49: Vergleich verschiedener Reaktionsmechanismen mittels homogenem Reaktor bei einem Atomizer-HCCI Betriebspunkt [128] S. 85

2.) An dieser Stelle ist jedoch die Feststellung wichtiger, dass auch die Verwendung von mehr Zonen nicht zu besseren Ergebnissen führt. Bei Modellierung mit 20 Zonen tritt in der Simulation so gut wie keine Niedertemperaturverbrennung mehr auf, siehe [Abbildung 50](#). Die Hochtemperaturverbrennung beginnt zu früh und besteht aus einem relativ symmetrischen, parabelförmigen Brennverlauf. Der ebenfalls dargestellte DVA-Brennverlauf der Prüfstandsmessung verläuft jedoch im Bereich der Hochtemperaturverbrennung keineswegs parabelförmig, sondern ist gekennzeichnet von einer längeren Ausbrandphase. Offensichtlich können die vorliegenden Temperaturinhomogenitäten somit nicht über eine Erhöhung der Zonenanzahl abgebildet werden, sondern müssen über ein angepasstes Wärmefreisetzungsmodell modelliert werden.

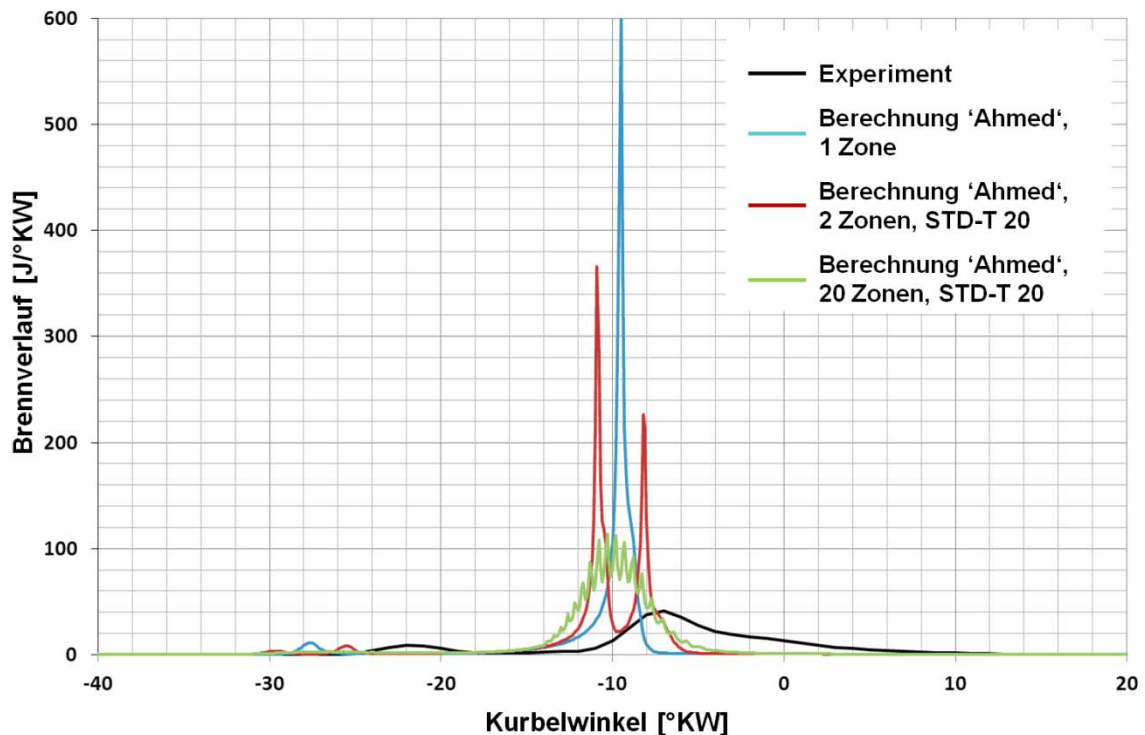


Abbildung 50: Vergleich zwischen Experiment und Simulation mit unterschiedlicher Zonenanzahl bei einem Atomizer-HCCI Betriebspunkt [128] S. 88

Die Wärmefreisetzung wird daher nur zu Beginn über den in [Kapitel 4.3](#) beschriebenen Reaktionsmechanismus nach Zheng berechnet, um die Niedertemperaturverbrennung darzustellen. Gleichzeitig dient der stoffmengenbasierte Reaktionsmechanismus zur Berechnung eines Zündintegrals mit dessen Hilfe der Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung bestimmt wird. Zu Beginn der Hochtemperaturverbrennung wird der Reaktionsmechanismus abgeschaltet und die Wärmefreisetzung wird im weiteren Verlauf über die in [Kapitel 4.4](#) vorgestellten phänomenologischen und auch massebasierten Ansätze abgebildet.

Anders als bei der externen Gemischbildung, liegt bei der Direkteinspritzung auch hinsichtlich des Luftverhältnisses ein vergleichsweise inhomogenes Gemisch vor. Je nach Einspritzbeginn ergeben sich unterschiedliche Homogenisierungsgrade, deren Auswirkung auf die Verbrennung sich bei experimentellen Untersuchungen bestätigt hat, vgl. [64] S. 32 ff. Zur Abbildung dieser Gemischinhomogenitäten dient eine zweite Zone. Dieser Mischungszone wird der in den Brennraum eingespritzte Kraftstoff nach seiner Verdampfung direkt zugeführt, siehe [Abbildung 46](#). Mit Hilfe des in [Kapitel 4.2](#) beschriebenen Gemischbildungsmodells erfolgt ab dem Einspritzbeginn außerdem eine Beimischung von Frischladung – sowie der zum Massenstrom zugehörigen Enthalpie – in die Mischungszone, in der auch die Verbrennung stattfindet. Ein Wärmeaustausch zwischen den beiden Zonen findet nicht statt.

4.2 Berechnung der Gemischbildung bei Direkteinspritzung

Da die von Lämmle durchgeführten 3D-CFD Simulationen von HCCI-Betriebspunkten, siehe [128] S. 93-100, hinsichtlich der Historie der Lambda-Verteilung im Brennraum einen charakteristischen Verlauf gezeigt haben, war es naheliegend diesen mit dem Gemischbildungsmodell abzubilden. Eine Möglichkeit, die zu Beginn der Arbeit in Erwägung gezogen wurde, war die Verwendung eines Paket-Ansatzes. Wie später noch dargestellt wird, werden auch beim teilhomogenen Be-

trieb Durchmischungsgrade von über 90% erreicht. Möchte man diese mit einem Paket-Modell darstellen, müsste man jedoch unrealistisch lange Paketeindringtiefen parametrieren. Damit in einzelnen Paketzonen kein Luftmangel auftritt, wären außerdem Ausgleichsmassenströme zwischen den Paketen zu modellieren. Dadurch würde jedoch die Inhomogenität zwischen den einzelnen Paketen abnehmen. Letztlich hätte man ein schwer abzustimmendes, rechenintensives Modell, dessen einzelne Pakete sich jedoch nicht so stark voneinander unterscheiden.

Eine andere Herangehensweise ist den Brennraum als einzelne Zone zu modellieren und diese in zwei Massebilanzräume⁷⁷ zu teilen. Nachteilig daran ist, dass die Verdampfungsenthalpie somit dem gesamten Brennraum entzogen wird. Die Zonentemperatur entspricht der Massenmitteltemperatur und wird dadurch nur marginal beeinflusst.

Aus diesen Gründen wurde ein zweizoniger Modellierungsansatz gewählt, bei dem die Verdampfungsenthalpie der Mischungszone entzogen wird⁷⁸. Dieser Ansatz ist im Vergleich zu einem Paketansatz wesentlich leichter abzustimmen und führt, wie im Verlauf dieses Kapitels noch gezeigt wird, zu plausiblen Ergebnissen.

Als charakteristische Größe zur Beurteilung der Gemischbildung wurde die 95%-Gemischwolke eingeführt. Dabei handelt es sich um einen definierten Bilanzraum innerhalb des 3D-Netzes. Die Zuordnung zu diesem Bilanzraum hängt vom Luftverhältnis innerhalb der Zellen statt. Bei der Datenauswertung werden für jeden Kurbelwinkel alle Zellen anhand ihres Luftverhältnisses sortiert. Ausgehend von der Zelle mit dem niedrigsten Luftverhältnis, werden die sortierten Zellen sukzessive dem Bilanzraum zugeordnet, wobei die Kraftstoffmasse der im Bilanzraum enthaltenen Zellen aufsummiert wird. Sobald sich 95% des insgesamt im Brennraum vorhandenen Kraftstoffs innerhalb des Bilanzraums befinden, werden keine weiteren Zellen hinzugefügt. Als Vergleichsgröße dient nun das Verhältnis aus Gesamtmasse der 95%-Gemischwolke zur Gesamtladungsmasse im Zylinder, welches mit dem Massenanteil der Mischungszone verglichen wird:

$$\xi_{95\%-Gw.} = \frac{m_{95\%-Gw.}}{m_{Zyl}} \quad (4-1)$$

$\xi_{95\%-Gw.}$: Massenanteil der 95%-Gemischwolke [-]

$m_{95\%-Gw.}$: Gesamtmasse der 95%-Gemischwolke [kg]

m_{Zyl} : Gesamtmasse im Brennraum [kg]

$$\xi_{M-Zone} = \frac{m_{M-Zone}}{m_{Zyl}} \quad (4-2)$$

ξ_{M-Zone} : Massenanteil der Mischungszone [-]

m_{M-Zone} : Masse der Mischungszone [kg]

⁷⁷ Eine Zone ist eine Masse- und Energiebilanzraum, siehe [Kapitel 2.5](#). Die Masse innerhalb der Zone kann theoretisch auf beliebig viele Unterbilanzräume aufgeteilt werden, was jedoch keine Auswirkungen auf die Energiebilanz der Zone und damit auch nicht auf die Zonentemperatur hat.

⁷⁸ Da die Mischungszone zu diesem Zeitpunkt nur einen Bruchteil der insgesamt im Brennraum vorliegenden Gasmasse enthält, findet eine Abkühlung der Mischungszonentemperatur statt.

Bei grober Betrachtungsweise breitet sich ein Einspritzstrahl im Brennraum aus, vermischt sich lokal mit Luft und bildet dadurch eine Gemischwolke. Je länger der Zündverzug dauert, umso stärker breiteten sich die Gemischwolken der einzelnen Einspritzstrahlen im Zylinder aus und vermischen sich unter Umständen auch untereinander. Im hier beschriebenen Modell werden die einzelnen Gemischwolken über die Mischungszone zusammenfassend dargestellt. Der eingespritzte Kraftstoff verdampft daher innerhalb der Mischungszone, was bedeutet der Mischungszone wird die Verdampfungsenthalpie entnommen und die Kraftstoffmasse hinzugefügt. Um die Beimischung von Frischladung in die Mischungszone abzubilden wird eine Kombination aus vereinfachtem Turbulenz- und Dichtedifferenzansatz verwendet:

$$\frac{dm_{\text{Beimisch,M-Zone}}}{dt} = C_{\text{Beimisch,1}} \cdot \frac{dm_{\text{Beimisch,turb}}}{dt} + C_{\text{Beimisch,2}} \cdot \frac{dm_{\text{Beimisch,\Delta\rho}}}{dt} \quad (4-3)$$

$dm_{\text{Beimisch,M-Zone}}/dt$:	Massenänderungsrate der Mischungszone aufgrund Ladungsbeimischung [kg/s]
$C_{\text{Beimisch,1}}$:	Parameter zur Abstimmung der turbulenzbasierten Beimischung [-]
$dm_{\text{Beimisch,turb}}/dt$:	Massenänderungsrate aufgrund turbulenzbasierter Beimischung [kg/s]
$C_{\text{Beimisch,2}}$:	Parameter zur Abstimmung der Beimischung aufgrund der Dichtedifferenz [-]
$dm_{\text{Beimisch,\Delta\rho}}/dt$:	Massenänderungsrate aufgrund der Dichtedifferenz zwischen den Zonen [kg/s]

Der vordere Term in Gleichung (4-3) wird über den in Gleichung (4-4) dargestellten Ansatz auf Basis der spezifischen Turbulenz im Brennraum berechnet. Dieser Ansatz wurde von Chmela et al. und in modifizierter Form auch von Barba zur Darstellung der Diffusionsverbrennung verwendet, siehe [31] S. 9, [10] S. 122.

$$\frac{dm_{\text{Beimisch,turb}}}{dt} = m_{\text{Fl-Zone}} \cdot \frac{\sqrt{k}}{l_{\text{char,Gw.}}} \quad (4-4)$$

$m_{\text{Fl-Zone}}$:	Masse der Frischladungszone [kg]
k :	spezifische Turbulenz [m^2/s^2]
$l_{\text{char,Gw.}}$:	charakteristische Länge der Gemischwolke [m]

Die charakteristische Länge entspricht dem Kugelradius einer einzelnen Gemischwolke:

$$l_{\text{char,Gw.}} = \left(\frac{3}{4 \cdot \pi} \cdot V_{\text{Gw.}} \right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{3}{4 \cdot \pi} \cdot \frac{V_{\text{M-Zone}}}{n_{\text{D}}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4-5)$$

$V_{\text{Gw.}}$:	Volumen der Gemischwolke [m^3]
$V_{\text{M-Zone}}$:	Volumen der Mischungszone [m^3]
n_{D} :	Anzahl der Düsenlöcher [-]

Die spezifische Turbulenz wird über ein einfaches k-ε Modell abgebildet, das in unterschiedlich detaillierten Varianten bereits in mehreren phänomenologischen Modellen Verwendung fand, vgl. Kapitel 3.2 und 3.3, [11] S. 96 ff, [83] S. 98 ff. Grundlegende Herleitungen können auch [21] S. 4 f und [119] S. 51 f & S. 264 ff entnommen

werden. Globale Strömungsvorgänge, wie die Luftbewegung oder die Einspritzung, führen zunächst zu keiner Vermischung. Erst wenn sich aufgrund des Wirbelzerfalls kleinere Wirbel gebildet haben, kommt es zu einer Vermischung von Kraftstoff und Luft. Zerfallen diese Wirbel weiter kommt es zur Dissipation, d. h. die turbulente kinetische Energie des Wirbels geht in Wärmeenergie über, siehe Abbildung 51. Mit dem k-ε Modell soll die Turbulenz der für die Vermischung von Kraftstoff und Luft relevanten Turbulenzwirbel dargestellt und bilanziert werden.

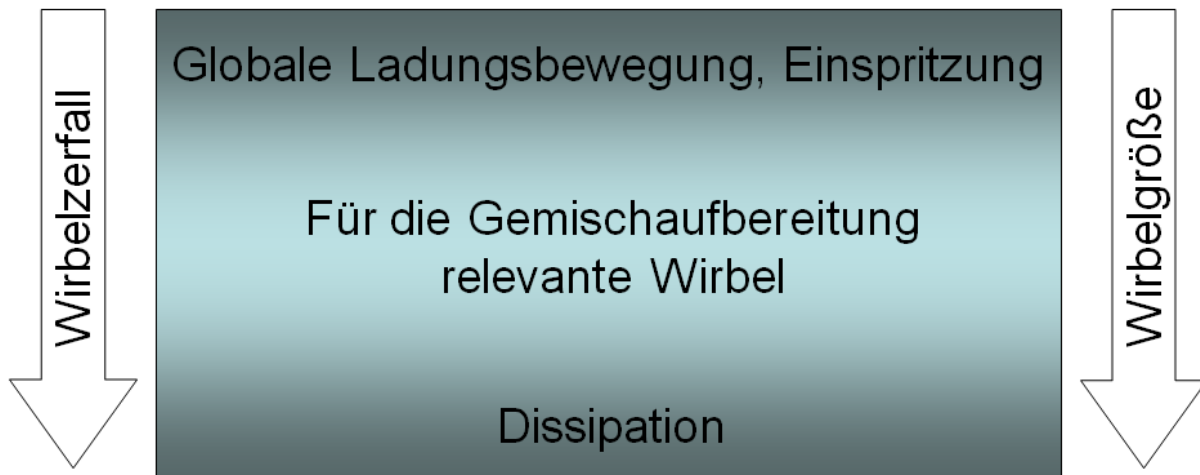


Abbildung 51: Schematische Darstellung des Gültigkeitsbereichs des k-ε Modells

Die spezifische Turbulenz bei Einlass-Schließ berechnet sich über Gleichung (4-6) aus Geometriegrößen und der mittleren Kolbengeschwindigkeit, siehe [83] S. 101.

$$k_{ES} = \frac{1}{8} \cdot \left(c_m \cdot \frac{d_{Zyl}^2}{d_{EV} \cdot h_{EV}} \right)^2 \quad (4-6)$$

- k_{ES} : Spezifische Turbulenz bei Einlassventil-Schließ [m²/s²]
- c_m : Mittlere Kolbengeschwindigkeit [m/s]
- d_{Zyl} : Bohrung [m]
- d_{EV} : Durchmesser des Einlassventils [m]
- h_{EV} : Maximaler Ventilhub des Einlassventils [m]

Laut Borgnakke et al. lässt sich der Wirbelzerfall durch die in Gleichung (4-7) dargestellte Proportionalität beschreiben, die auch als Taylor-Annahme bezeichnet wird, siehe [21] S. 4.

$$\frac{dk}{dt} \sim \frac{k^{1,5}}{l_{char}} \quad (4-7)$$

- dk/dt : Änderungsrate der spezifischen Turbulenz [m²/s³]
- l_{char} : Charakteristische Länge [m]

In dem Gemischbildungsmodell wird die Änderungsrate der spezifischen Turbulenz über folgende Gleichung berechnet:

$$\frac{dk}{dt} = \underbrace{-\frac{2}{3} \cdot \frac{k}{V_{\text{Zyl}}} \cdot \frac{dV_{\text{Zyl}}}{dt}}_{\text{Kolbenbewegung}} + \underbrace{\varepsilon_{\text{Drall}} \cdot \frac{(Z_{\text{Drall}} \cdot c_m)^3}{l_{\text{char,Zyl}}}}_{\text{Drall}} + \underbrace{\varepsilon_{\text{Einspr.}} \cdot \frac{dk_{\text{Einspr.}}}{dt}}_{\text{Einspritzung}} - \underbrace{\varepsilon_{\text{Diss}} \cdot \frac{k^{1,5}}{l_{\text{char,Z}}}}_{\text{Dissipation}} \quad (4-8)$$

V_{Zyl} :	Aktuelles Zylindervolumen [m ³]
$\varepsilon_{\text{Drall}}$:	Parameter zur Gewichtung der Drallturbulenz [-]
Z_{Drall} :	Drallzahl [-]
$l_{\text{char,Zyl}}$:	Charakteristische Länge des Zylinders [m]
$\varepsilon_{\text{Einspr.}}$:	Parameter zur Gewichtung des Einspritzturbulenz [-]
$dk_{\text{Einspr.}}/dt$:	Änderungsrate der spezifischen Einspritzturbulenz [m ² /s ³]
$\varepsilon_{\text{Diss}}$:	Parameter zur Gewichtung der Dissipation [-]

Der erste Term in Gleichung (4-8) ist die gängige Formulierung zur Beschreibung des Einflusses der Kolbenbewegung auf die spezifische Turbulenz, vgl. [119] S. 264, [83] S. 99.

In der Modellvorstellung führt die Dissipation der globalen Drallbewegung zu einer Erhöhung der für die Gemischbildung relevanten spezifischen Turbulenz. Die spezifische Turbulenz der unzerfallenen Drallbewegung kann anhand ihrer Umfangsgeschwindigkeit bestimmt werden:

$$k_{\text{Drall}} = \frac{1}{2} \cdot c_u^2 \quad (4-9)$$

k_{Drall} :	Spezifische Turbulenz der noch nicht zerfallenen Drallbewegung [m ² /s ²]
c_u :	Umfangsgeschwindigkeit [m/s]

Die Drallzahl ist definiert als Quotient aus Umfangsgeschwindigkeit und axialer Anströmungsgeschwindigkeit, siehe Gleichung (4-10). Da bei der Drallzahlmessung die Anströmgeschwindigkeit auf das Flügelrad so gewählt wird, dass sie der mittleren Kolbengeschwindigkeit entspricht, siehe [103] S. 153, kann die Umfangsgeschwindigkeit schließlich über Gleichung (4-11) dargestellt werden.

$$Z_{\text{Drall}} = \frac{c_u}{c_a} \quad (4-10)$$

c_a :	Axiale Anströmgeschwindigkeit [m/s]
---------	-------------------------------------

$$c_u = Z_{\text{Drall}} \cdot c_m \quad (4-11)$$

Setzt man Gleichung (4-11) in (4-9) ein erhält man folgenden Term zur Berechnung der spezifischen Turbulenz der unzerfallenen Drallströmung:

$$k_{\text{Drall}} = \frac{1}{2} \cdot (Z_{\text{Drall}} \cdot c_m)^2 \quad (4-12)$$

Wird Gleichung (4-12) in die Taylor-Annahme (4-7) eingesetzt, ergibt sich der in Gleichung (4-8) enthaltenen Term zur Beschreibung des Dralleinflusses. Passend zur Größenordnung der unzerfallenen Drallbewegung, wird dabei der Durchmesser einer

4 Beschreibung des neuen Modellansatzes

Kugel mit dem aktuellen Zylindervolumen als charakteristische Länge verwendet, siehe Gleichung (4-13). Der Vorfaktor 0,5 in Gleichung (4-12) ist im Abstimmparameter $\varepsilon_{\text{Drall}}$ enthalten⁷⁹.

$$l_{\text{char,Zyl}} = \left(\frac{6}{\pi} \cdot V_{\text{Zyl}} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (4-13)$$

Die durch die Einspritzung hervorgerufene Turbulenzerhöhung wird analog zu [10] S. 123 und [83] S. 101 über folgende Gleichung berechnet:

$$\frac{dk_{\text{Einspr.}}}{dt} = \frac{1}{2} \cdot \frac{dm_{\text{Einspr.}}}{dt} \cdot u_{\text{Einspr.,0}}^2 \cdot \frac{1}{m_{\text{Zyl}}} \quad (4-14)$$

$dm_{\text{Einspr.}}/dt$: Einspritzrate [kg/s]

$u_{\text{Einspr.,0}}$: Aktuelle Düsenaustrittsgeschwindigkeit [m/s]

Die zur Berechnung von Gleichung (4-14) notwendige aktuelle Düsenaustrittsgeschwindigkeit kann über die Massenbilanz bestimmt werden:

$$u_{\text{Einspr.,0}} = \frac{dm_{\text{Einspr.}}}{dt} \cdot \frac{1}{\rho_{\text{Krst.,fl}}} \cdot \frac{1}{n_{\text{D}}} \cdot \frac{1}{\frac{\pi}{4} \cdot d_{\text{D}}^2} \quad (4-15)$$

$\rho_{\text{Krst.,fl}}$: Dichte des flüssigen Kraftstoffs [kg/m³]

$dV_{\text{Einspr.}}/dt$: Einspritzvolumenstrom [m³/s]

Über den letzten Term in Gleichung (4-8) wird die Dissipation, der für die Gemischbildung relevanten Turbulenz, anhand der Taylor-Annahme berechnet, vgl. [11] S. 97, [10] S. 121 & 123, [83] S. 99 & 101. Zur Abstimmung ist der Parameter $\varepsilon_{\text{Diss}}$ vorhanden.

Durch die Verwendung des bis hierhin beschriebenen k- ε Ansatzes, wurde bewusst ein bewährter Ansatz zur Abbildung von globalen Vermischungsvorgängen im Brennraum gewählt. Falls man einen Motor berechnen möchte, an dem bereits Simulationen mit dem von Kožuch entwickelten Ruß-NO_x Modell durchgeführt wurden, können die zur Gewichtung der separaten Einflüsse:

- Ladungsdrall
- Einspritzung
- Dissipation

notwendigen Parameter $\varepsilon_{\text{Drall}}$, ε_{E} und $\varepsilon_{\text{Diss}}$ übernommen werden, sofern die Drallzahl Z_{Drall} bekannt ist. Dies zeigte sich auch bei der nachfolgend dargestellten Validierung, bei der die von Kožuch für den OM611 bestimmten Parameterwerte, siehe [83] S. 189 – unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Implementierungen hin-

⁷⁹ Während bei Kožuch die Drallzahl Z_{Drall} ebenfalls im Abstimmparameter $\varepsilon_{\text{Drall}}$ enthalten ist, stellt sie hier einen eigenständigen Parameter dar, vgl. [83] S.100. Dies hat den Vorteil, dass Veränderungen der globalen Drallintensität – Beispielsweise verursacht durch eine Verstellung der Drallklappe – durch das Gemischbildungsmodell richtig abbildet werden, sofern es vorher bei bekannter Drallzahl abgestimmt wurde.

sichtlich der Drallzahl – übernommen werden konnten. Mit dem Abstimmparameter c_1 in Gleichung (4-3), kann die Beimischrate unabhängig von den einzelnen Einflüssen global abgestimmt werden.

Während der Einspritzung steigt die spezifische Turbulenz stark an, fällt aber nach dem Einspritzende auch wieder recht schnell ab. Ohne den zusätzlichen Dichtedifferenzterm⁸⁰ ergibt sich somit der in Abbildung 52 dargestellte degressiver Zumischverlauf. Dieser deckt sich qualitativ sehr schön mit dem Massenanteil der 95%-Gemischwolke bei einer 3D-CFD Rechnung ohne Verbrennung.

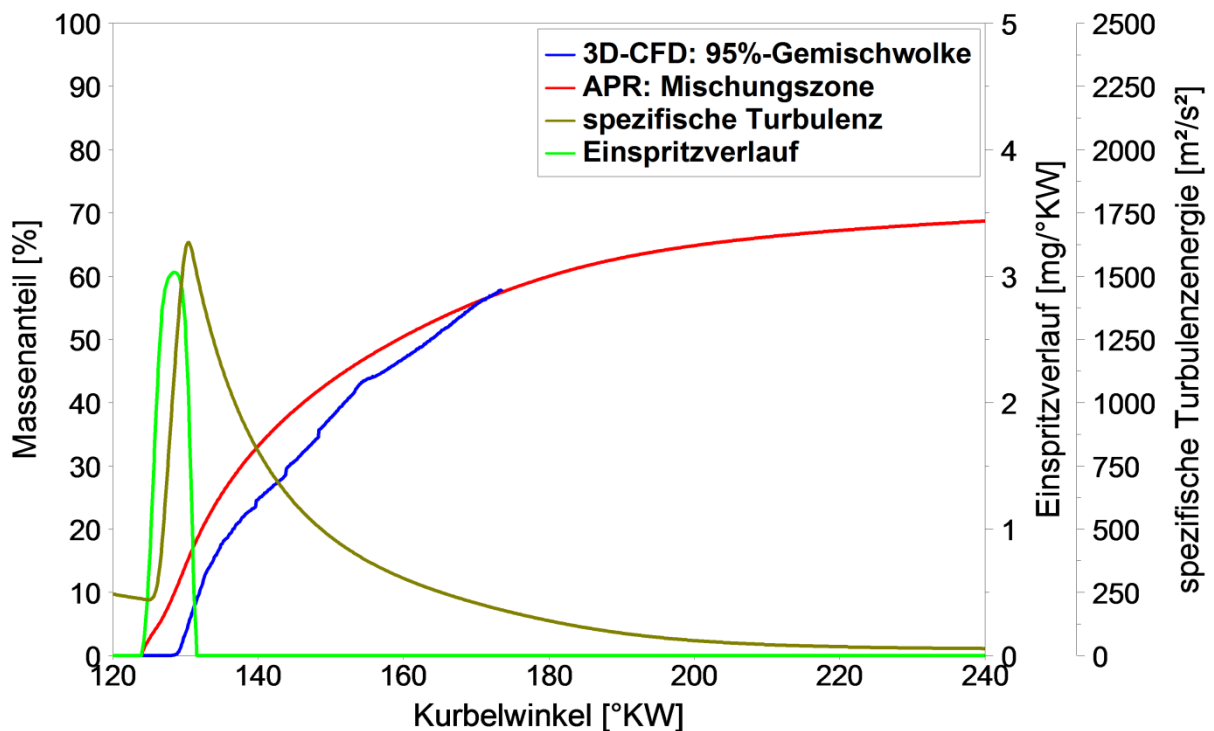


Abbildung 52: Vergleich der Gemischbildung zwischen 95%-Gemischwolke (3D-CFD) und Mischungszone (APR) bei Simulation ohne Dichtedifferenzterm

Eine Analyse des Betriebspunkts ergab jedoch, dass der Massenanteil der Mischungszone im Verlauf der Verbrennung mindestens auf 90% ansteigen muss, da sonst nicht genügend Luft in der Mischungszone vorhanden wäre, um die Kraftstoffmenge umzusetzen, die auch im Prüfstandsversuch umgesetzt wurde. Dies deckt sich mit den Erkenntnissen von Kožuch, der zur korrekten Wiedergabe der Kraftstoff-Luft Vermischung im Brennraum seine Vermischungsgleichung um einen brennverlaufabhängigen Term erweitert hat, siehe [83] S. 109. Die Idee wurde für das hier vorgestellte Gemischbildungsmodell aufgegriffen, allerdings erfolgt die Abbildung der verbrennungsinduzierten Vermischung über die Dichtedifferenz zwischen der Frischladungs- und der Mischungszone, siehe Gleichung (4-16).

⁸⁰ $c_2 = 0$ in Gleichung (4-3).

4 Beschreibung des neuen Modellansatzes

$$\frac{dm_{\text{Beimisch},\Delta\rho}}{dt} = V_{\text{M-Zone}} \cdot \Delta\rho \cdot 1 \left[\frac{1}{s} \right] = V_{\text{M-Zone}} \cdot (\rho_{\text{FI-Zone}} - \rho_{\text{M-Zone}}) \cdot 1 \left[\frac{1}{s} \right] \quad (4-16)$$

- $\Delta\rho$: Dichtedifferenz zwischen Frischladungs- und Mischungszone [kg/m^3]
 $\rho_{\text{FI-Zone}}$: Dichte der Frischladungszone [kg/m^3]
 $\rho_{\text{M-Zone}}$: Dichte der Mischungszone [kg/m^3]

Die Beimischung ist neben der Dichtedifferenz auch von der Kontaktfläche zwischen den beiden Zonen abhängig. Grundsätzlich hängt diese von der Oberfläche der Mischungszone ab. Würde man von einer kugelförmigen Ausbreitung der Mischungszone ausgehen, wäre die Oberfläche proportional zu $V^{2/3}$. Da die Mischungszone aber aus mehreren zunächst kegelförmigen Einspritzstrahlen besteht, deren Form nach Einspritzende zunehmend zerklüftet und undefiniert ist, erschien es sinnvoll die Oberflächenzunahme proportional zur Volumenzunahme der Mischungszone zu modellieren.

Durch die Multiplikation der Dichtedifferenz mit dem Volumen der Mischungszone ergeben sich zwei Eigenschaften. Zum einen nimmt der Einfluss der Dichtedifferenz mit fortschreitender Durchmischung zu, so dass sich schließlich die gesamte Zylindermasse in der Mischungszone befindet, siehe [Abbildung 53](#). Dies deckt sich sowohl mit den von Lämmle durchgeführten 3D-CFD Simulationen, siehe [Abbildung 54](#) und [Abbildung 55](#), als auch mit den veröffentlichten Berechnungsergebnissen des in [Kapitel 3.3.2](#) vorgestellten IFP-Modells, siehe [Abbildung 56](#). Das Sprayvolumen des IFP-Modells (0D spray model) ist quasi das Äquivalent zur Mischungszone. Bei einer Drehzahl von 1497 U/min und einem Einspritzbeginn von 6 °KW vor OT benötigt die Durchmischung im IFP-Modell etwa 8 °KW. Die vom IFP zur Validierung durchgeführten 3D-CFD Berechnungen (3D spray model) zeigen bis zu einer Durchmischung von ungefähr 90% einen vergleichbaren Verlauf. Die zweite Eigenschaft ist, dass der Abstimmparameter c_2 nicht hubraumabhängig abgestimmt werden muss.

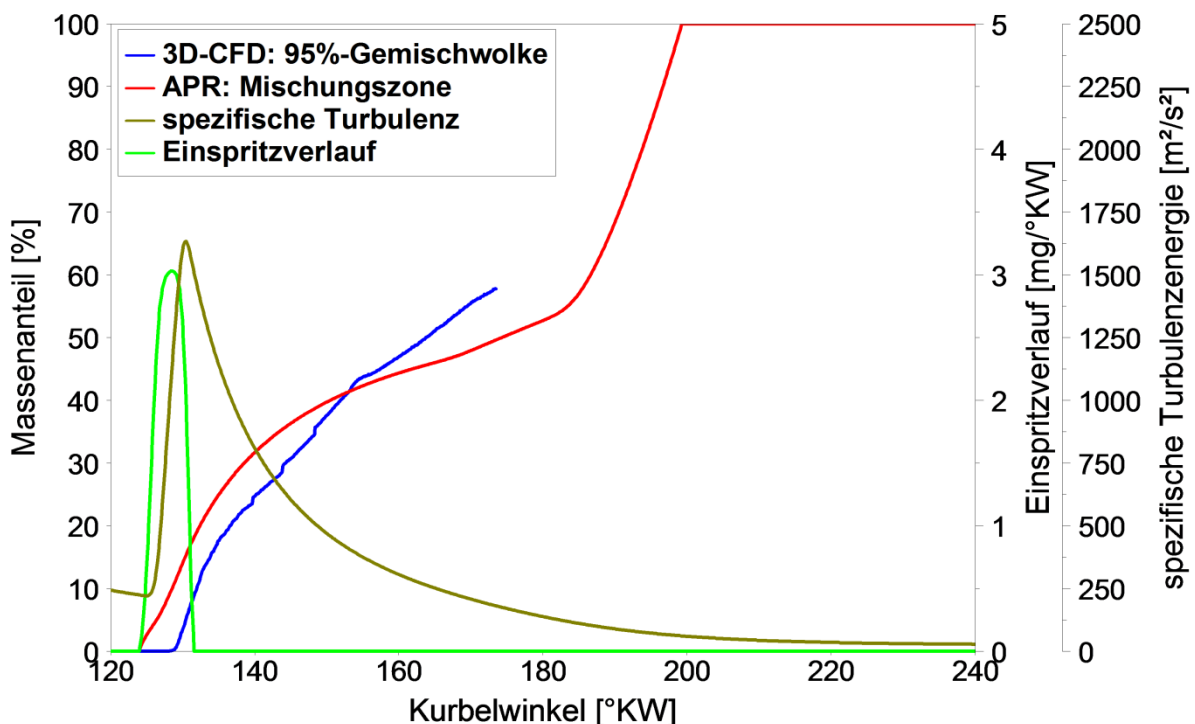


Abbildung 53: Vergleich der Gemischbildung zwischen 95%-Gemischwolke (3D-CFD) und Mischungszone (APR) bei Simulation mit Dichtedifferenzterm

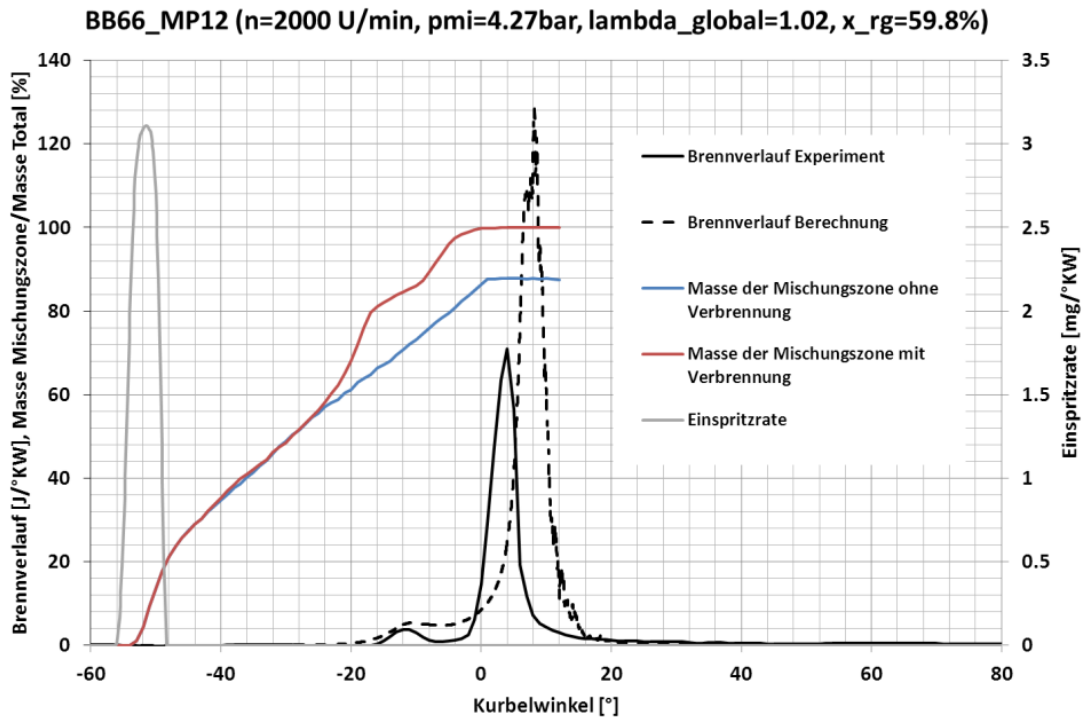


Abbildung 54: Darstellung der Masse der Mischungzone bei 3D-CFD Simulationen eines HCLI-Betriebspunktes mit und ohne Verbrennung [128] S. 101

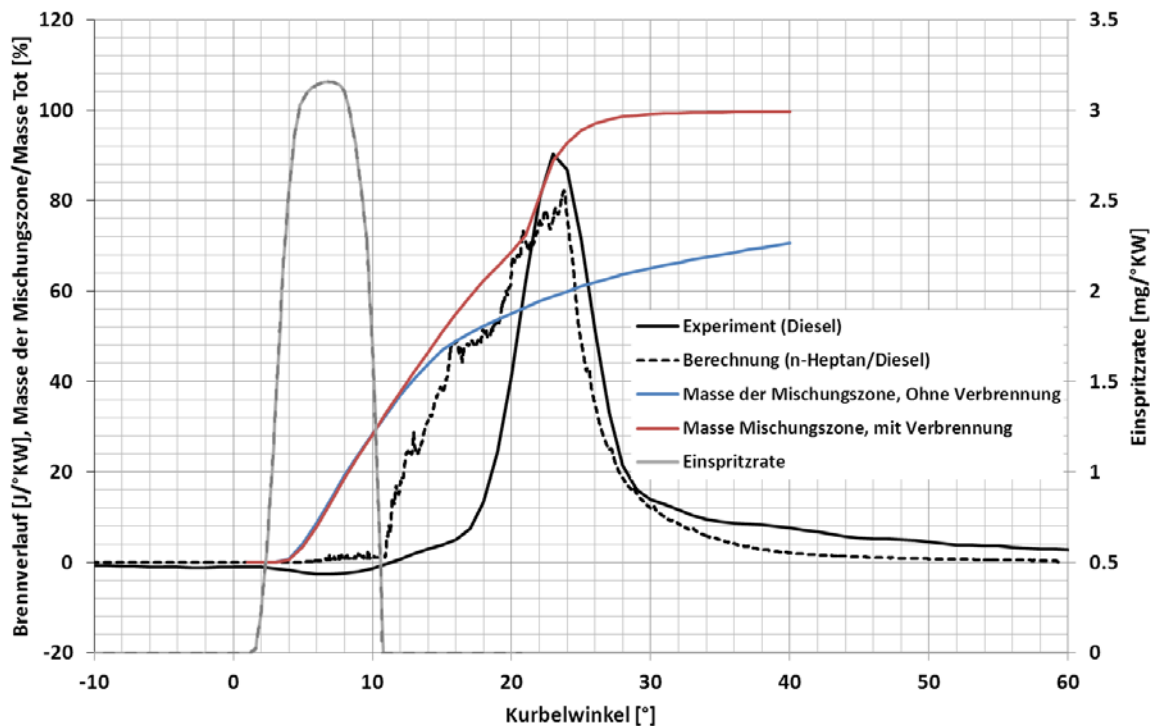


Abbildung 55: Darstellung der Masse der Mischungzone bei 3D-CFD Simulationen eines HPLI-Betriebspunktes mit und ohne Verbrennung [128] S. 107

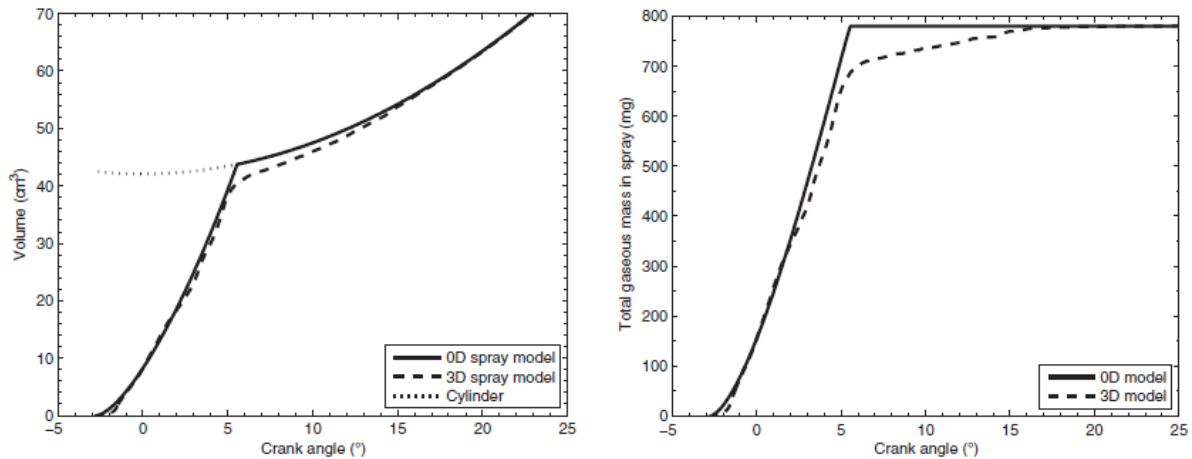


Abbildung 56: Darstellung der Gemischbildung im IFP-Modell [42] S. 275 & 276

Mit dem aus phänomenologischen Überlegungen entstandenen Gemischbildungsmodell werden die globalen Durchmischungsphänomene somit qualitativ richtig dargestellt. Neben dem Vergleich anhand der von Lämmle durchgeführten 3D-CFD Simulationen konnte es auch indirekt durch Auswertung der Messdatenbasis validiert werden.

Auf die Modellierung des Wandauftrags wurde aus mehreren Gründen verzichtet. Da man in realen Anwendungen, aufgrund der damit verbundenen Nachteile, einen Kraftstoffauftrag an die Zylinderwand vermeidet, wird man eher selten Betriebspunkte mit deutlichem Wandauftrag simulieren wollen. Entsprechend ist ein Wandauftragsmodell in den meisten Fällen unnötig. Grundsätzlich ist eine belastbare Abschätzung des Wandauftrags innerhalb eines phänomenologischen Modells auch nur sehr eingeschränkt möglich, da beispielsweise die Strahleindringtiefe berechnet werden muss. Da die Strahlausbreitung im Bereich der quasidimensionalen Modelle jedoch nur über empirische Gleichungen abgebildet werden kann, vgl. [Kapitel 3.2.3](#), wird eine solche Berechnung mit zunehmender Eindringtiefe in den Brennraum ungenauer. Die Abstimmung eines Wandauftragsmodells wäre außerdem kaum möglich, da sich der Wandauftrag anhand von regulären Messungen nicht eindeutig quantifizieren lässt. Zudem erfordert ein Wandauftragsmodell eine ausführliche Beschreibung der Zylindergeometrie, was die Anzahl der Abstimmparameter zusätzlich erhöht. Bei der Interaktion mit der Pleuelmulde handelt es sich wiederum um komplexe Strömungsphänomene, die sich im Rahmen einer phänomenologischen Modellierung ebenfalls nur schwer darstellen lassen. Der Modellansatz von Kuleshov et al. hat gezeigt, dass eine detaillierte Modellierung der Interaktion zwischen Kraftstoffstrahlen oder zwischen Strahl und Pleuelmulde zu keinem sinnvollen Zugewinn hinsichtlich der Brennverlaufsrechnung führt, siehe [Kapitel 3.3.1](#).

4.3 Berechnungen anhand eines vereinfachten Reaktionsmechanismus

Während man bei der Simulation der konventionellen Dieselerbrennung, aufgrund der bereits hohen Brennraumtemperaturen bei Einspritzbeginn, auf eine Modellierung der Niedertemperaturreaktionen verzichten kann, ist dies bei der voll- oder teilhomogenen Dieselerbrennung nicht zulässig. Zur detaillierten Abbildung von chemischen Prozessen verwendet man üblicherweise Reaktionsmechanismen. Im Rahmen der phänomenologischen Modellierung ist dies zur Berechnung des Brennver-

laufs eher unüblich⁸¹. Einzige dem Autor bekannte Ausnahme bildet das in Kapitel 3.3.3 beschriebene Toyota-Modell. Verbreiteter ist die Nutzung einer tabellierten Reaktionskinetik, beispielsweise in [124] oder auch in dem IFP-Modell, siehe Kapitel 3.3.2.

Grundsätzlich können in einem Reaktionsmechanismus der präexponentielle Faktor und die Aktivierungsenergie jeder Reaktion zur Abstimmung genutzt werden, siehe Gleichung (4-17). Theoretisch besitzt ein Reaktionsmechanismus somit doppelt so viele Abstimmparameter, wie er Reaktionsgleichungen enthält.

$$k = A \cdot e^{\frac{-E_{\text{Akt.}}}{R \cdot T}} \quad (4-17)$$

k:	Geschwindigkeitskoeffizient der Reaktion [1/s]
A:	Präexponentieller Faktor der Reaktion [1/s]
$E_{\text{Akt.}}$:	Aktivierungsenergie der Reaktion [J/mol]
R:	Universelle Gaskonstante [J/(mol·K)]
T:	Zur Berechnung der Reaktion verwendete Temperatur [K]

Reaktionsmechanismen werden typischerweise anhand von Stoßrohrversuchen abgestimmt bzw. validiert, vgl. [4] S. 1116 ff, [35] S. 167f, [153] S. 2838 f. Der von Lämmle durchgeführte Vergleich verschiedener Reaktionsmechanismen, siehe [128] S. 85ff, in einem einzonigen homogenen Reaktor zeigte jedoch, dass kein Mechanismus mit seiner Originalparametrierung die Wärmefreisetzung eines Atomizer-Betriebspunkts richtig berechnen kann, vgl. Abbildung 49. Im Falle des Ahmed-Mechanismus deckt sich dies auch mit der Originalveröffentlichung, bei der ebenfalls ein simulierter HCCI-Betriebspunkt veröffentlicht wurde, vgl. [4] S. 1122. Dort konnte zwar gezeigt werden, dass der Mechanismus nach Ahmed fast den gleichen Brennverlauf wie ein detaillierterer Mechanismus (2309 Reaktionsgleichungen) vorhersagt, beide weichen jedoch deutlich vom DVA-Brennverlauf ab. Lämmles Untersuchungen haben somit gezeigt, dass mit detaillierten Mechanismen keineswegs automatisch bessere Simulationsergebnisse erzielt werden können. Zum anderen können Reaktionsparameter, die anhand von Stoßrohrversuchen ermittelt wurden, offensichtlich nicht unverändert auf motorische Simulationen übertragen werden. Anders als bei Stoßrohrversuchen, bei denen die Randbedingungen konstant sind, ändern sich die Randbedingungen im Brennraum aufgrund der Kolbenbewegung ständig. Da sich außerdem die im Brennraum vorliegende Temperaturverteilung, abhängig von der Gemischbildung und der Motorgeometrie (Oberflächen zu Volumenverhältnis), unterschiedlich stark von der Massenmitteltemperatur unterscheidet, ist es im Rahmen eines phänomenologischen Modells nicht möglich einen Reaktionsmechanismus einmalig abzustimmen und damit die Niedertemperaturverbrennung in jedem Motor zufriedenstellend zu berechnen.

Da detailliertere Mechanismen in einem phänomenologischen Modell keine besseren Ergebnisse liefern, ist es auch nicht zielführend einen solchen Mechanismus in tabellierter Form in das Modell zu integrieren. Damit das neue Modell sinnvoll eingesetzt

⁸¹ Simulationen mit sogenannten „homogenen Reaktoren“, bei denen der Brennraum als einzelne Zone modelliert wird und bei dem die komplette Verbrennung inklusive Hochtemperaturverbrennung über entsprechend detaillierte Reaktionsmechanismen abgebildet wird, sind – wie von Lämmle in [128] S. 85ff gezeigt – nicht zielführend und werden daher auch nicht als phänomenologische Modelle gewertet.

werden kann, sollte der Rechenaufwand jedoch so gering sein, dass die Berechnung eines Arbeitsspiels weniger als zehn Sekunden dauert. Aus dem in [Tabelle 4-1](#) dargestellten Vergleich verschiedener Reaktionsmechanismen ist ersichtlich, dass bezüglich des Rechenaufwands der Pitsch-Mechanismus die absolute Obergrenze darstellt.

Mechanismus nach	Anzahl Spezies/Reaktionsgleichungen	Rechendauer [s]
Tsurushima [153]	33 / 38	2.8
Pitsch [94]	44 / 112	5.6
Hewson [68]	67 / 265	14
Ahmed [4]	246 / 1284	251 (ca. 4min)
Curran [35]	561 / 2539	1655 (ca. 28min)

Tabelle 4-1: Benötigte Rechendauer bei Anwendung der verschiedenen Reaktionsmechanismen in einem homogenen Reaktor [128] S. 87

Aufgrund der Tatsache, dass der in das neue Verbrennungsmodell integrierte Reaktionsmechanismus bei jedem Motor neu abgestimmt werden muss, darf auch die Anzahl an Abstimmparametern nicht zu groß sein. Dies schließt die Verwendung aller in [Tabelle 4-1](#) dargestellten Reaktionsmechanismen aus. Das in [Kapitel 3.3.3](#) beschriebene Shell-Modell ist aufgrund seiner 26 Abstimmparameter ebenfalls zu detailliert. Ein von Zheng et al. vorgestellter Mechanismus [170] enthält theoretisch 19 Abstimmparameter und stellt somit den detailliertesten Mechanismus dar, der die Anforderungen hinsichtlich Rechenaufwand und Anzahl der Abstimmparameter erfüllt. Detailliertere Mechanismen benötigen mehr Rechenzeit und sind schwieriger abzustimmen, führen aber in einem phänomenologischen Modell nicht zu besseren Ergebnissen.

Innerhalb einer einzonigen Modellumgebung ist es allerdings nicht möglich, die komplette Wärmefreisetzung über einen Reaktionsmechanismus abzubilden, siehe [Abbildung 48](#). Unter Abänderung einiger weniger Parameter des Zheng-Mechanismus konnte jedoch eine befriedigende Simulationsgüte hinsichtlich der Niedertemperaturverbrennung und der Berechnung des Brennbeginns der Hochtemperaturverbrennung erreicht werden kann. Den Nachweis liefern die in [Kapitel 5](#) vorgestellten Validierungsergebnisse, nachfolgend sollen zunächst die Berechnungsgleichungen vorgestellt werden.

4.3.1 Niedertemperaturverbrennung

Der Zheng-Mechanismus besteht aus den in [Tabelle 4-2](#) dargestellten Reaktionsgleichungen. Die Angaben in den eckigen Klammern stehen stellvertretend für die Stoffmengenkonzentration⁸² der jeweiligen Spezies, die nach Gleichung (4-18) berechnet wird. Die Berechnung erfolgt bei äußerer Gemischbildung anhand dem Volumen der Frischladungszone (entspricht dem Zylindervolumen), bei Direkteinspritzung anhand dem Volumen der Mischungszone. Zur einfacheren Darstellung wird im

⁸² Eine weitere zulässige Bezeichnung ist „molare Konzentration“, während die Bezeichnung „Molarität“ veraltet und unzulässig ist, da sie inzwischen für eine andere Definition verwendet wird, vgl. [6] S. 232 und [160] S. 4.

weiteren Verlauf der Begriff Reaktionszone (R-Zone) für diejenige Zone verwendet, in der die Wärmefreisetzung stattfindet.

$$[i] = \frac{n_i}{V_{R\text{-Zone}}} \quad (4-18)$$

[i]: Stoffmengenkonzentration der Spezies i [mol/m³]

n_i: Stoffmenge der Spezies i [mol]

V_{R-Zone}: Volumen der Zone in der die Reaktion stattfindet [m³]

1. $F + 7,5O_2 \rightarrow 8H_2O + 7CO$
2. $CO + 0,5O_2 \leftrightarrow CO_2$
3. $F + 2O_2 \leftrightarrow I_1$
4. $I_1 \rightarrow 2Y$
5. $Y + 0,5F + 6,5O_2 \rightarrow 8H_2O + 7CO$
6. $I_1 \rightarrow I_2$
7. $I_2 \rightarrow 2Y$

Nr.	v _R [mol/(m ³ ·s)]	A [#]	E [J/mol]
1	$k \cdot [F]^{0.25} \cdot [O_2]^{1.5}$	7.2E+07	166216
2+	$k \cdot [CO] \cdot [H_2O]^{0.5} \cdot [O_2]^{0.25}$	3.2E+09	167472
2-	$k \cdot [CO_2]$	1.2E+07	167472
3+	$k \cdot [F] \cdot [O_2] \cdot [M] \cdot (p/10 \text{ bar})^{-2.2} \cdot C_{3+}$	1.5E+08	157507
3-	$k \cdot [I_1] \cdot (p/10 \text{ bar})^{-3.5}$	4.4E+31	368899
4	$k \cdot [I_1]$	2.4E+06	16580
5	$k \cdot [F] \cdot [Y]$	1.0E+12	136783
6	$k \cdot [I_1]$	2.8E+10	58029
7	$k \cdot [I_2] \cdot [M]$	1.5E+13	223826

$$C_{3+} = (110\text{-PRF})/10$$

$$\text{PRF: Primary Reference Fuel (Oktanzahl)} \quad [\#] = \left(\frac{\text{m}^3}{\text{mol}} \right)^{(n_{R,\text{ges}}-1)} \cdot \frac{1}{\text{s}}$$

Tabelle 4-2: Reaktionsgleichungen und Original-Parametrierung⁸³ des Zheng-Mechanismus

Die in Tabelle 4-2 aufgeführte Reaktionsgeschwindigkeit v_R ist definiert als die Änderungsrate der Stoffmengenkonzentration der an der Reaktion beteiligten Spezies, wobei die, in der Elementargleichung für die jeweilige Spezies angegebene, Stoffmenge berücksichtigt werden muss⁸⁴.

⁸³ Entnommen aus [170] S. 3, umgerechnet auf SI-Einheiten.

⁸⁴ Beträgt die Reaktionsgeschwindigkeit der fünften Reaktion beispielsweise 1 mol/(m³·s), ergibt sich für Spezies Y eine Änderungsrate der Stoffmengenkonzentration von -1 mol/(m³·s), bei Spezies F beträgt sie -0,5 mol/(m³·s) und bei Sauerstoff -6,5 mol/(m³·s), siehe auch Gleichung (4-29).

4 Beschreibung des neuen Modellansatzes

Der zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit erforderliche Geschwindigkeitskoeffizient k berechnet sich über die Arrhenius-Gleichung, vgl. [160] S. 81:

$$k_j = A_j \cdot e^{\frac{-E_{\text{Akt.,}j}}{R \cdot T_j}} \quad (4-19)$$

k_j :	Geschwindigkeitskoeffizient der Reaktion j [(m ³ /mol) ^(n_{R,ges.}-1) /s]
A_j :	Präexponentieller Faktor der Reaktion j [(m ³ /mol) ^(n_{R,ges.}-1) /s]
$E_{\text{Akt.,}j}$:	Aktivierungsenergie der Reaktion j [J/mol]
T_j :	Zur Berechnung der Reaktion j verwendete Temperatur [K]

Die Gesamtreaktionsordnung $n_{\text{R,ges.}}$ ergibt sich aus der Summe der Exponenten aller Stoffmengenkonzentrationen, die in die Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit eingehen⁸⁵, siehe [160] S. 71. Die Einheit des präexponentiellen Faktors und damit auch des Geschwindigkeitskoeffizienten ist entsprechend abhängig von der Gesamtreaktionsordnung der jeweiligen Reaktion, vgl. Gleichung (4-19) und Tabelle 4-2 unten.

Reaktion 1 und 2 dienen im Normalfall der Abbildung der Hochtemperaturverbrennung, siehe [170] S. 3. In diesem Modell wird über die beiden Reaktionen lediglich der Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung bestimmt. Eine detaillierte Beschreibung dazu folgt in Kapitel 4.3.2. Mit Hilfe der Reaktionen 3 bis 7 wird die Niedertemperaturverbrennung abgebildet, vgl. [170] S. 3 f. Anders als bei den ersten beiden Reaktionen wird die Reaktionsgeschwindigkeit hier anhand der Massenmitteltemperatur bestimmt. Die Zuordnung zu den in Kapitel 2.2 beschriebenen Reaktionspfaden ist in Abbildung 57 grafisch dargestellt. Reaktion 3 stellt den Prozesseinstieg dar, bei dem beispielsweise das bei der zweiten Sauerstoffaddition entstehende •OOROOH Molekül gebildet wird. Das bei Reaktion gebildete I_1 muss jedoch als virtuelle Spezies aufgefasst werden, welche beispielsweise auch ein Brennstoffradikal (R^\bullet) oder ein Alkylperoxyl-Radikal (RO_2^\bullet) darstellen kann, siehe [170] S. 2 f. Die Reaktionsrate von Reaktion 3 ist als einzige druckabhängig, die der Hin-Reaktion (3+) ist außerdem abhängig von der Stoffmengenkonzentration der Stoßpartner M . Diese bestehen aus den Spezies F , O_2 , N_2 , H_2O , CO und CO_2 . Reaktion 4 fasst die weiteren Reaktionen in Pfad A zusammen, bei denen letztlich zwei Hydroxylradikale (OH^\bullet) gebildet werden, die durch die virtuelle Spezies Y repräsentiert werden. Diese wird wiederum in Reaktion 5 umgesetzt, wobei es zu einer im Brennverlauf sichtbaren Wärmefreisetzung kommt. Der Umstand, dass bei Reaktion 5 auch Kohlenstoffmonoxid gebildet wird, was in Gleichung (3-15) nicht der Fall ist, erklärt sich erst anhand der nachfolgenden Erläuterungen. Reaktion 6 repräsentiert zum einen die Wasserstoffperoxidbildung (H_2O_2) zum anderen aber auch den hier nicht dargestellten Zerfall von Alkylradikalen hin zu Methyl- (CH_3^\bullet) und Ethylradikalen ($C_2H_5^\bullet$), siehe (3-17) bis (3-19). Wie man an der im Vergleich zu Reaktion 6 deutlich höheren Aktivierungsenergie von Reaktion 7 sieht, vgl. Tabelle 4-2, wird dadurch unter anderem die Bildung von OH^\bullet -Radikalen dargestellt, die erst ab Temperaturen um 800 K einsetzt, siehe Abbildung 57. Reaktion 7 bildet aber auch den β -Zerfall ab, siehe [170] S. 4, bei dem die Methyl- und Ethylradikale unter Bildung von Formaldehyd (CH_2O) zerlegt werden, siehe Kapitel 2.2. Da bei der sogenannten blue-flame Verbrennung auch CO entsteht, wird dies auch in Reaktion 5 gebildet, siehe Tabelle 4-2.

⁸⁵ Reaktion 1 hat beispielsweise die Gesamtreaktionsordnung $n_{\text{R,ges.}} = 0,25 + 1,5 = 1,75$.

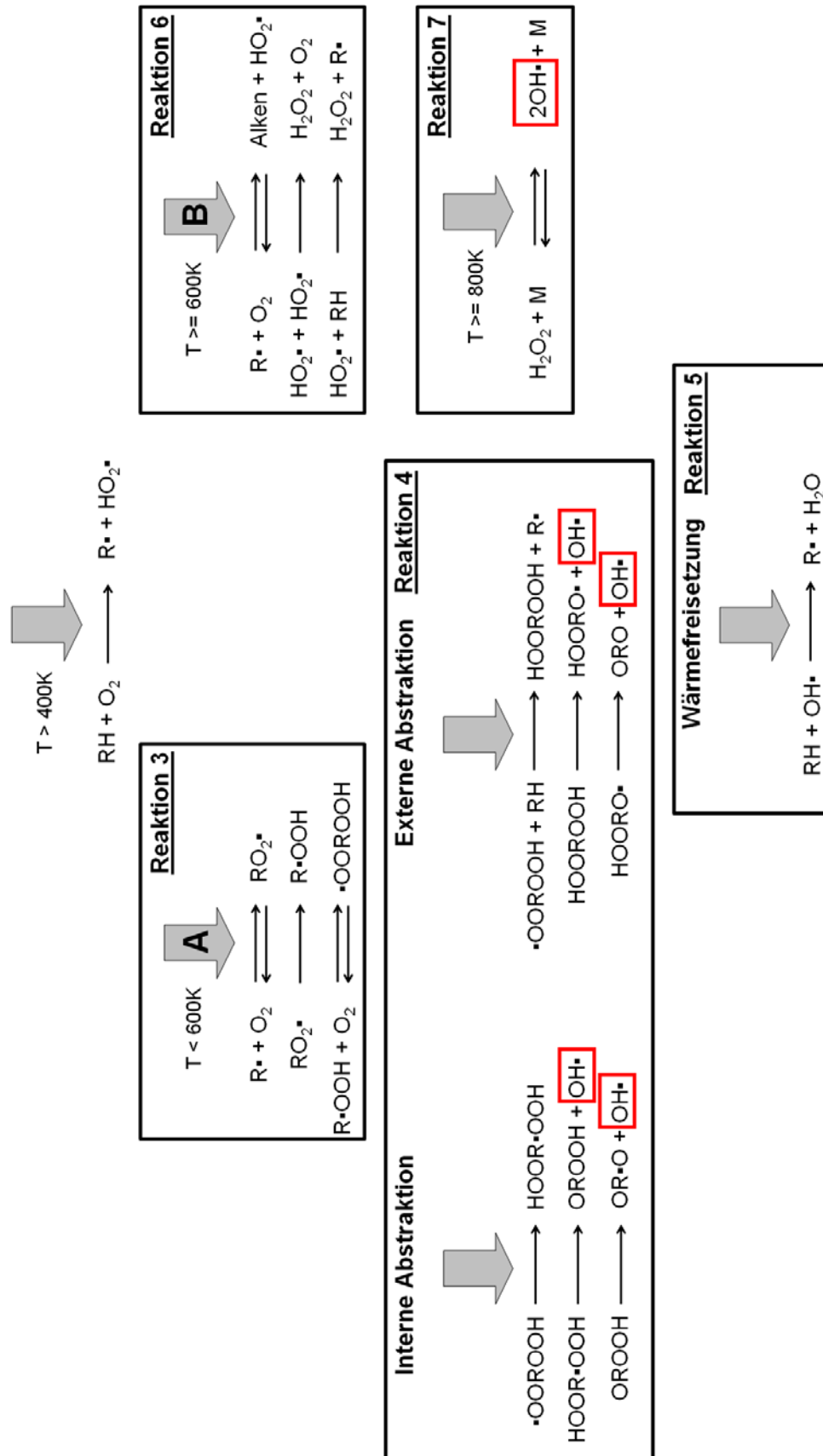


Abbildung 57: Reaktionspfade während der Niedertemperaturverbrennung mit zugeordneten Reaktionen des Zheng-Mechanismus

4 Beschreibung des neuen Modellansatzes

Insgesamt werden im Zheng-Mechanismus drei virtuelle (I_1 , I_2 und Y), fünf „normale“ (O_2 , N_2 , CO , CO_2 und H_2O) und als Sonderform die Kraftstoffspezies⁸⁶ (F) bilanziert. Das Zylindermodul bilanziert dagegen im Normalfall innerhalb jeder Zone die folgenden Speziesmassen:

- Unverbrannte Luft
- Unverbrannter Kraftstoff
- Verbrannte Luft
- Verbrannter Kraftstoff

Bei Rechenbeginn müssen daher die vier Massenspezies in die neun Spezies des Zheng-Mechanismus transformiert und gleichzeitig von Massen auf Stoffmengen umgerechnet werden, siehe Abbildung 58.

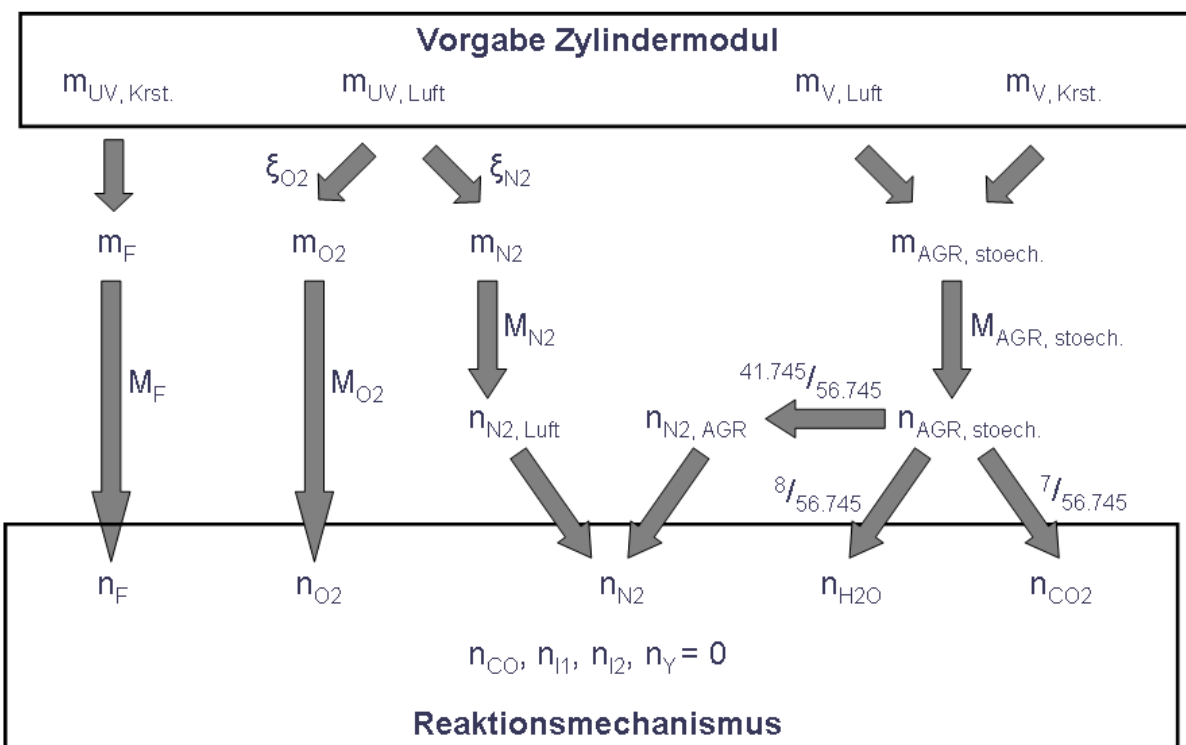


Abbildung 58: Initialisierung der Stoffmengen des Reaktionsmechanismus

Bei Rechenbeginn liegen die verbrannte Luft und der verbrannte Kraftstoff stöchiometrisch vor. Die bei global magerem Betrieb im Restgas enthaltene „unverbrauchte“ Luft wird mit der neu angesaugten Frischluft zur unverbrannten Luft zusammengefasst. Von dieser wird vereinfachend angenommen, dass sie aus Sauerstoff und Stickstoff besteht, d. h. sonstige in Luft vorhandene Spezies werden vernachlässigt. Der Massenanteil von Sauerstoff in Luft ξ_{O_2} beträgt 23,14% [8] S. 272, ξ_{N_2} ist somit aufgrund der eben beschriebenen Annahmen 76,86%.

⁸⁶ Zheng et al. haben den Mechanismus überwiegend an Stoßrohrversuchen mit n-Heptan und iso-Oktan validiert, siehe [170] S. 5 ff. Über den Parameter PRF ist es jedoch möglich beliebige Gemische aus den beiden Referenzkraftstoffen abzubilden, wobei ein lineares Verhalten angenommen wurde, siehe [170] S. 4. Daher kann die Spezies F theoretisch auch für ein Gemisch aus verschiedenen Kraftstoffen stehen.

Die Umrechnung von Massen in Stoffmengen erfolgt anhand der folgenden Formel, vgl. [8] S. 238:

$$n_i = \frac{m_i}{M_i} \quad (4-20)$$

m_i : Masse der Spezies i [kg]

M_i : Molare Masse der Spezies i [kg/mol]

Die Atommassen einzelner Atome können der Standardliteratur entnommen werden, bspw. [24] S. 228 ff. Mit Hilfe der Atommassen können, unter Berücksichtigung der im jeweiligen Molekül enthaltenen Atome und ihrer Anzahl, die molaren Massen der einzelnen Spezies berechnet werden, siehe Tabelle 4-3.

Atom/Spezies	Atommasse / molare Masse [g/mol]
H	1.0079
C	12.011
N	14.0067
N ₂	28.0134
O	15.9994
O ₂	31.9988
CO	28.0104
CO ₂	44.0098
H ₂ O	18.0152
C ₇ H ₁₆	100.2034
Luft (idealisiert)	28.845
AGR _{stöchiometrisch}	28.577

Tabelle 4-3: Atom- bzw. molare Massen der relevanten Spezies (Grau hinterlegte Spezies wurden [24] S. 228 ff entnommen)

Die molare Masse der Luft berechnet sich anhand folgender Überlegung:

$$M_{\text{Luft}} = \frac{m_{\text{Luft}}}{n_{\text{Luft}}} = \frac{m_{\text{Luft}}}{n_{\text{O}_2} + n_{\text{N}_2}} = \frac{m_{\text{Luft}}}{\frac{m_{\text{O}_2}}{M_{\text{O}_2}} + \frac{m_{\text{N}_2}}{M_{\text{N}_2}}} = \frac{m_{\text{Luft}} \cdot M_{\text{O}_2} \cdot M_{\text{N}_2}}{m_{\text{O}_2} \cdot M_{\text{N}_2} + m_{\text{N}_2} \cdot M_{\text{O}}} \quad (4-21)$$

M_{Luft} : Molare Masse der Luft [kg/mol]

m_{Luft} : Luftmasse [kg]

n_{Luft} : Luftstoffmenge [mol]

n_{O_2} : Sauerstoffstoffmenge [mol]

n_{N_2} : Stickstoffstoffmenge [mol]

M_{O_2} : Molare Masse von Sauerstoff [mol]

M_{N_2} : Molare Masse von Stickstoff [mol]

Unter Berücksichtigung der Massenanteile von Sauerstoff und Stickstoff ergibt sich:

$$M_{\text{Luft}} = \frac{m_{\text{Luft}} \cdot M_{\text{O}_2} \cdot M_{\text{N}_2}}{m_{\text{Luft}} \cdot \xi_{\text{O}_2} \cdot M_{\text{N}_2} + m_{\text{Luft}} \cdot \xi_{\text{N}_2} \cdot M_{\text{O}_2}} = \frac{M_{\text{O}_2} \cdot M_{\text{N}_2}}{\xi_{\text{O}_2} \cdot M_{\text{N}_2} + (1 - \xi_{\text{O}_2}) \cdot M_{\text{O}}} \quad (4-22)$$

Die molare Masse von stöchiometrischem Abgas hängt von der Luft- und Kraftstoffzusammensetzung ab. Fasst man Reaktion 1 und 2 des Zheng-Mechanismus zusammen erhält man die globale Reaktionsgleichung der vollständigen n-Heptan Verbrennung⁸⁷, siehe Gleichung (4-23).



Da die Verbrennung jedoch nicht mit reinem Sauerstoff sondern mit Luft stattfindet, muss die Reaktionsgleichung noch – entsprechend dem N_2/O_2 Stoffmengenverhältnis in der Luft – um die entsprechende Stoffmenge an Stickstoff erweitert werden. Während in Gleichung (4-21) die Berechnung der molaren Masse von Luft anhand der Speziesmassen dargestellt ist, folgt nun die Darstellung anhand der Speziesstoffmengen:

$$M_{\text{Luft}} = \frac{m_{\text{Luft}}}{n_{\text{Luft}}} = \frac{m_{\text{O}_2} + m_{\text{N}_2}}{n_{\text{O}_2} + n_{\text{N}_2}} = \frac{M_{\text{O}_2} \cdot n_{\text{O}_2} + M_{\text{N}_2} \cdot n_{\text{N}_2}}{n_{\text{O}_2} + n_{\text{N}_2}} \quad (4-24)$$

Durch Umformen erhält man schließlich das Stoffmengenverhältnis zwischen Stickstoff und Sauerstoff in Luft, siehe Gleichung (4-25). Setzt man die Werte aus Tabelle 4-3 ein, ergibt sich ein Verhältnis von 3,792. Die globale Reaktionsgleichung kann entsprechend erweitert werden, was in Gleichung (4-26) dargestellt ist.

$$\frac{n_{\text{N}_2}}{n_{\text{O}_2}} = \frac{M_{\text{Luft}} - M_{\text{O}_2}}{M_{\text{N}_2} - M_{\text{Luft}}} \quad (4-25)$$



Mit der nun bekannten Zusammensetzung des stöchiometrischen Restgases der n-Heptan Verbrennung kann deren molare Masse über Gleichung (4-27) bestimmt werden. Außerdem erklärt sich darüber die in Abbildung 58 dargestellte Aufteilung der Restgas-Stoffmenge.

$$M_{\text{AGR,stö.}} = \frac{8}{56,712} \cdot M_{\text{H}_2\text{O}} + \frac{7}{56,712} \cdot M_{\text{CO}_2} + \frac{41,712}{56,712} \cdot M_{\text{N}_2} \quad (4-27)$$

$M_{\text{AGR,stö.}}$: Molare Masse von stöchiometrischem Abgas [kg/mol]

$M_{\text{H}_2\text{O}}$: Molare Masse von Wasser [kg/mol]

M_{CO_2} : Molare Masse von Kohlenstoffdioxid [kg/mol]

Die zur Initialisierung notwendigen Größen sind somit bekannt. Innerhalb des Moduls HomBrennratesFVV, erfolgt nun in jedem Rechenschritt zunächst die Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeiten entsprechend Tabelle 4-2. Multipliziert man diese je nach Betriebsart mit dem Volumen der Frischladungs- oder der Mischungszone, erhält man die Reaktionsrate, siehe Gleichung (4-28). Aus den Reaktionsraten werden anschließend die Änderungsraten der verschiedenen Stoffmengen berechnet, siehe Gleichungen (4-29).

⁸⁷ Alternativ können auch Reaktion 3, 4 und 5 oder Reaktion 3, 6, 7 und 5 zusammengefasst werden. In beiden Fällen erhält man ebenfalls Gleichung (4-23) als Ergebnis.

$$r_j = v_{R,j} \cdot V_{R\text{-Zone}} \quad (4-28)$$

r_j : Reaktionsrate der Reaktion j [mol/s]

$v_{R,j}$: Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion j [mol/(m³·s)]

$$\frac{dn_F}{dt} = -r_1 - r_{3+} + r_{3-} - 0,5 \cdot r_5$$

$$\frac{dn_{O_2}}{dt} = -7,5r_1 - 0,5 \cdot r_{2+} + 0,5 \cdot r_{2-} - 2 \cdot r_{3+} + 2 \cdot r_{3-} - 6,5 \cdot r_5$$

$$\frac{dn_{I_1}}{dt} = r_{3+} - r_{3-} - r_4 - r_6$$

$$\frac{dn_{I_2}}{dt} = r_6 - r_7$$

$$\frac{dn_Y}{dt} = 2 \cdot r_4 - r_5 + 2 \cdot r_7$$

$$\frac{dn_{H_2O}}{dt} = 8 \cdot r_1 + 8 \cdot r_5$$

$$\frac{dn_{CO_2}}{dt} = r_{2+} - r_{2-}$$

$$\frac{dn_{CO}}{dt} = 7 \cdot r_1 - r_{2+} + r_{2-} + 7 \cdot r_5$$

dn_F/dt : Stoffmengenänderungsrate des Kraftstoffs [mol/s]

dn_{O_2}/dt : Stoffmengenänderungsrate des Sauerstoffs [mol/s]

dn_{I_1}/dt : Stoffmengenänderungsrate der Spezies I₁ [mol/s]

dn_{I_2}/dt : Stoffmengenänderungsrate der Spezies I₂ [mol/s]

dn_Y/dt : Stoffmengenänderungsrate der Spezies Y [mol/s]

dn_{H_2O}/dt : Stoffmengenänderungsrate von Wasser [mol/s]

dn_{CO_2}/dt : Stoffmengenänderungsrate von Kohlenstoffdioxid [mol/s]

dn_{CO}/dt : Stoffmengenänderungsrate von Kohlenstoffmonoxid [mol/s]

Multipliziert man die Reaktionsrate mit der Standardreaktionsenthalpie ergibt sich die Enthalpieänderungsrate durch die jeweilige Reaktion:

$$\frac{dH_j}{dt} = r_j \cdot \Delta H_{R,j}^0 \quad (4-30)$$

dH_j/dt : Enthalpieänderungsrate der Reaktion j [J/s]

$\Delta H_{R,j}^0$: Standardreaktionsenthalpie der Reaktion j [J/mol]

Die Standardreaktionsenthalpie einer Reaktion kann aus den Standardbildungsenthalpien der Produkte und Edukte über Gleichung (4-31) berechnet werden. Da somit die in den einzelnen Spezies chemisch gebundene Energie bilanziert wird, sind die Standardreaktionsenthalpien bei exothermen Reaktionen negativ. Tabelle 4-4 zeigt die für den Zheng-Mechanismus relevanten Standardbildungsenthalpien, Tabelle 4-5 die daraus resultierenden Standardreaktionsenthalpien, wenn als Kraftstoff n-Heptan verwendet wird.

4 Beschreibung des neuen Modellansatzes

$$\Delta H_{R,j}^0 = \sum \Delta H_{f,Produkte}^0 - \sum \Delta H_{f,Edukte}^0 \quad (4-31)$$

$\Delta H_{f,Produkte}^0$: Standardbildungsenthalpie eines Produktes der Reaktion j [J/mol]

$\Delta H_{f,Edukte}^0$: Standardbildungsenthalpie eines Eduktes der Reaktion j [J/mol]

Spezies	Standardbildungsenthalpie [J/mol]
C ₇ H ₁₆ (n-Heptan)	-188322.3
C ₈ H ₁₈ (iso-Oktan)	-224370.6
F	(1-PRF)·ΔH _{f,n-Heptan} ⁰ + PRF·ΔH _{f,iso-Oktan} ⁰
I ₁	-53967.9 + ΔH _{f,F} ⁰
I ₂	-83736 + ΔH _{f,F} ⁰
Y	-30040.3 + ΔH _{f,I1} ⁰ /2
O ₂	0
CO	-111201.4
CO ₂	-394605.9
H ₂ O	-242373.9

Tabelle 4-4: Standardbildungsenthalpien der im Zheng-Mechanismus enthaltenen Spezies ([170] S. 4 entnommen und in SI-Einheiten umgerechnet)

Reaktion	Standardreaktionsenthalpie [J/mol]
1	-2529078.7
2	-283404.5
3	-53967.9
4	-60080.6
5	-2472054.5
6	-29768.1
7	-30312.5

Tabelle 4-5: Standardreaktionsenthalpien der Reaktionen des Zheng-Mechanismus mit n-Heptan als Kraftstoff

Bevor abschließend auf Basis der Standardreaktionsenthalpien der Brennverlauf berechnet werden kann, muss noch ein Ausgleichsfaktor bestimmt werden. Dazu wird zunächst die Standardreaktionsenthalpie der in Gleichung (4-23) dargestellten vollständigen Verbrennung über Gleichung (4-32) berechnet.

$$\Delta H_{R,vv}^0 = \Delta H_{R,1}^0 + 7 \cdot \Delta H_{R,2}^0 \quad (4-32)$$

$\Delta H_{R,vv}^0$: Standardreaktionsenthalpie der vollständigen Verbrennung [J/mol]

Bei vollständiger Verbrennung muss unter Beachtung der Vorzeichenkonvention folgende Bedingung gelten:

$$n_{\text{Krst.,UV},1} \cdot \Delta H_{\text{R,vV}}^0 = -m_{\text{Krst.,UV},1} \cdot H_u \quad (4-33)$$

$n_{\text{Krst.,UV},1}$: Stoffmenge an unverbranntem Kraftstoff [mol]

$m_{\text{Krst.,UV},1}$: Äquivalente Masse an unverbranntem Kraftstoff [kg]

H_u : Unterer Heizwert [J/kg]

Da Dieselkraftstoff aus einer Vielzahl von Kohlenwasserstoffen besteht, entsprechen die Standardreaktionsenthalpien des Zheng-Mechanismus nicht dessen Energiegehalt. Um dies auszugleichen werden die Standardreaktionsenthalpien auf den, vom Benutzer vorgegebenen, unteren Heizwert normiert, siehe Gleichung (4-34), der über eine einfache Standardkraftstoffanalyse bestimmt oder ansonsten gut abgeschätzt werden kann.

$$f_{\Delta H_R^0} = \frac{m_{\text{Krst.,UV},1}}{n_{\text{Krst.,UV},1}} \cdot \frac{H_u}{\Delta H_{\text{R,vV}}^0} = M_F \cdot \frac{H_u}{\Delta H_{\text{R,vV}}^0} \quad (4-34)$$

$f_{\Delta H_R^0}$: Ausgleichsfaktor zur Normierung der Reaktionsenthalpien auf den unteren Heizwert [-]

Da in Gleichung (4-34) im Vergleich zu (4-33) das Minuszeichen weggelassen wurde, ist der Ausgleichsfaktor negativ. Multipliziert man ihn mit den aufsummierten Enthalpieänderungsraten aller Reaktionen, erhält man den Brennverlauf basierend auf den Reaktionsraten des Zheng-Mechanismus:

$$\frac{dQ_{\text{B,Zheng}}}{dt} = f_{\Delta H_R^0} \cdot \sum_{j=1}^7 \frac{dH_j}{dt} \quad (4-35)$$

$dQ_{\text{B,Zheng}}/dt$: Der über den Reaktionsmechanismus berechnete Brennverlauf [J/s]

Das Zylindermodul stellt eine unvollständige Verbrennung aufgrund von Sauerstoffmangel über die Kalorik dar, während eine durch zu niedrige Temperaturen verursachte unvollkommene Verbrennung über das Verbrennungsmodell darzustellen ist, siehe [59] S. 93. Da sich die massenbasierte Bilanzierung im Rahmen der Arbeitsprozessrechnung jedoch bewährt hat und auch alle bisherigen Module des Zylindermoduls massebasiert sind, ist eine „Umstellung“ des Zylindermoduls auf Stoffmengenbilanzierung nicht zielführend. Die während der Niedertemperaturverbrennung überwiegend stattfindende Teil-Oxidation bis CO muss im massebasierten Zylindermodul somit durch eine energetisch äquivalente vollständige Verbrennung modelliert werden. Der über Gleichung (4-35) berechnete Brennverlauf wird daher durch den unteren Heizwert geteilt, siehe Gleichung (4-36). Die so bestimmte Änderungsrate der verbrannten Kraftstoffmasse ist energetisch äquivalent zu der durch den Reaktionsmechanismus freigesetzten Wärmeänderungsrate. Mit Beginn der ersten Wärme-freisetzung ist jedoch die massenbasierte Bilanzierung des Zylindermoduls hinsichtlich der Ladungszusammensetzung nicht mehr äquivalent zur stoffmengenbasierten Bilanzierung innerhalb von HomBrennrateFVV. Für die energetische Bilanzierung und somit auch für die Berechnung des Brennverlaufs ist dieser Aspekt unerheblich.

$$\frac{dm_{B,Zheng}}{dt} = \frac{\frac{dQ_{B,Zheng}}{dt}}{H_u} \quad (4-36)$$

$dm_{B,Zheng}/dt$: Massenänderungsrate des Brennstoffs auf Basis des Brennverlaufs, der über den Zheng-Mechanismus berechnet wird [kg/s]

Die in Tabelle 4-2 angegebenen Werte für den präexponentiellen Faktor und die Aktivierungsenergie der jeweiligen Reaktionen wurden von Zheng et al. anhand von Stoßrohrversuchen bestimmt. Damit der Anwender das Verbrennungsmodell an die unterschiedlichen Motoren anpassen kann, wurde Gleichung (4-19) folgendermaßen modifiziert:

$$k_j = 10^{\left(\lg(A_j \cdot 10^{6 \cdot (n_{R,ges})}) + c_{A,j}\right)} \cdot \left(\frac{1}{10^6} \left[\frac{m^3}{mol}\right]\right)^{n_{R,ges}-1} \left[\frac{1}{s}\right] \cdot e^{\frac{-E_j \cdot c_{E,j}}{R \cdot T_j}} \quad (4-37)$$

$c_{A,j}$: Parameter zur Abstimmung des präexponentiellen Faktors von Reaktion j [-]

$c_{E,j}$: Parameter zur Abstimmung der Aktivierungsenergie von Reaktion j [-]

Während die Aktivierungsenergie über einen multiplikativen Faktor abgestimmt wird, erfolgt die Anpassung des präexponentiellen Faktors über einen Parameter, der zum dekadischen Logarithmus des ursprünglichen Wertes hinzuaddiert wird. Im Verlauf der Validierung zeigte sich, dass die Niedertemperaturverbrennung letztlich über zwei Parameter abgestimmt werden kann. Dies ist zum einen der präexponentielle Faktor von Reaktion 3+, über den das Brennverlaufmaximum der Niedertemperaturverbrennung festgelegt werden kann. Der zweite Parameter ist die Aktivierungsenergie von Reaktion 7, über die der Brennbeginn der Niedertemperaturverbrennung beeinflusst wird. Alle anderen Reaktionen blieben im Vergleich zur Veröffentlichung von Zheng et al. unverändert⁸⁸.

4.3.2 Zündverzug der Hochtemperaturverbrennung

Im vorherigen Kapitel wurde beschrieben wie die Wärmefreisetzung während der Niedertemperaturverbrennung über den Zheng-Mechanismus abgebildet wird. Gleichzeitig gehen die Enthalpieänderungsraten der Reaktionen 1 und 2 in die Berechnung des Zündintegrals ein:

$$R_{ZV} = \frac{-\int_{t_0}^t \left(\frac{dH_1}{dt} + \frac{dH_2}{dt}\right) \cdot dt}{m_{R-Zone}} \quad (4-38)$$

R_{ZV} : Zündintegral [J/kg]

t_0 : Rechenbeginn (externe Gemischbildung) bzw. Einspritzbeginn (DI) [s]

Der Zähler enthält die bisher über die Reaktionen 1 und 2 freigesetzte Energie, die bedingt durch den Vorzeichenwechsel bei exothermer Reaktion positiv ist. Die Energie wird abhängig von der Betriebsart auf die Frischladungs- oder die Mischungszone verteilt und bildet so die Energiedichte. Das Zündintegral unterscheidet sich somit

⁸⁸ Entspricht $c_A = 0$ und $c_E = 1$.

in zwei Punkten von den Zündintegralen in den meisten bisherigen Verbrennungsmodellen, vgl. Kapitel 3. Zum einen werden zwei (bzw. wenn man Hin- und Rückreaktion getrennt betrachtet sogar drei) Reaktionen zur Berechnung des Zündintegrals herangezogen. Zum anderen werden zur Berechnung Reaktionsraten genutzt, die auch für die Berechnung der Wärmefreisetzung bis zum Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung verwendet werden.

Um den Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung zu bestimmen wird der Wert des Zündintegrals mit der Höhe der Zündgrenze verglichen. Diese stellt die Energiedichte dar, die erreicht werden muss, damit sich das Kraftstoff-Luft Gemisch entzündet. Bei bisherigen Verbrennungsmodellen wird eine konstante Zündgrenze vorgegeben, vgl. Kapitel 3. Bei äußerer Gemischbildung ist dies bei dem hier vorgestellten Modell ebenfalls der Fall, während die Zündgrenze bei DI-Betrieb veränderlich ist. Durch das Zündintegral soll die Auswirkung der sich ändernden Randbedingungen Temperatur, Druck und Gemischzusammensetzungen auf den Zündverzug abgebildet werden. Bei homogener bzw. teilhomogener Dieselvebrennung unterscheidet sich die Inhomogenität von Temperatur und Gemischzusammensetzung zwischen den verschiedenen Betriebsarten (Atomizer-HCCI, HCLI und HPLI) deutlich. Je homogener ein Gemisch ist, desto geringer ist die Wahrscheinlichkeit, dass es beispielsweise aufgrund von lokalen Temperaturspitzen zu einer früheren Zündung kommt. Folglich ist die Zündgrenze umso höher, je homogener das Gemisch im Brennraum ist:

$$R_{Zg.} = c_{Zg.} \cdot f_x \quad (4-39)$$

$R_{Zg.}$: Zündgrenze (Energiedichte im ZZP) [J/kg]

$c_{Zg.}$: Zündgrenze bei äußerer Gemischbildung (Abstimmparameter) [J/kg]

f_x : Funktion zur Veränderung der Zündgrenze [-]

Die in Gleichung (4-40) dargestellte Funktion bildet den Einfluss der Homogenisierung auf die Zündgrenze ab. Da es bei äußerer Gemischbildung hinsichtlich der Zündverzugsberechnung nicht notwendig ist den Homogenisierungsvorgang zu beschreiben gilt in diesen Fällen $\xi_{M-Zone,HB}=0$. Da nur die Frischluftzone existiert ist $\xi_{R-Zone}=1$ und somit $f_x=1$. Der Abstimmparameter $c_{Zg.}$ stellt somit die obere Zündgrenze dar, die bei äußerer Gemischbildung immer gilt, siehe Gleichung (4-41). Bei DI-Betrieb gilt zum Homogenisierungsbeginn $\xi_{M-Zone,HB}=\xi_{R-Zone}$ und somit $f_x=f_{x,HB}$. Das Produkt aus $f_{x,HB}$ und $c_{Zg.}$ ergibt somit die untere Zündgrenze, die bei DI-Betrieb bis zum Homogenisierungsbeginn gültig ist, siehe Gleichung (4-41). Nach dem Homogenisierungsbeginn verhält sich die Zündgrenze proportional zum Massenanteil der Mischungszone, wobei sie bei vollständiger Durchmischung den Wert der oberen Zündgrenze annimmt.

$$f_x = \left(\frac{1 - f_{x,HB}}{1 - \xi_{M-Zone,HB}} \right) \cdot \max(\xi_{M-Zone,HB}; \xi_{R-Zone}) + f_{x,HB} - \left(\frac{1 - f_{x,HB}}{1 - \xi_{M-Zone,HB}} \right) \cdot \xi_{M-Zone,HB} \quad (4-40)$$

$f_{x,HB}$: Vorfaktor der Zündgrenze bei innerer Gemischbildung (Abstimmparameter) [-]

$\xi_{M-Zone,HB}$: Massenanteil der Mischungszone zum Homogenisierungsbeginn [-]

ξ_{R-Zone} : Massenanteil der Reaktionszone im aktuellen Rechenschritt [-]

$$R_{o.Zg.} = c_{Zg.} \tag{4-41}$$

$$R_{u.Zg.} = c_{Zg.} \cdot f_{X,HB}$$

$R_{o.Zg.}$: Obere Zündgrenze [J/kg]

$R_{u.Zg.}$: Untere Zündgrenze [J/kg]

Um den Homogenisierungsbeginn festzulegen, wird zunächst die spezifische Turbulenz bei Einspritzbeginn erfasst. Im weiteren Verlauf steigt die Turbulenz während der Einspritzung an und nimmt dann nach dem Einspritzende wieder deutlich ab. Der Zeitpunkt in dem die spezifische Turbulenz erstmals den Wert bei Einspritzbeginn unterschreitet, wird als Homogenisierungsbeginn bezeichnet. Diese Homogenisierung ist von der in Kapitel 4.2 beschriebenen Beimischung zu unterscheiden, da sie den Homogenisierungsgrad der Mischungszone wiedergeben soll. In Abbildung 59 ist der Verlauf der variablen Zündgrenze beispielhaft dargestellt. Man sieht, dass die untere Zündgrenze bis ca. 168 °KW gültig ist. Erst zu diesem Zeitpunkt ist die spezifische Turbulenz auf das Niveau zum Einspritzbeginn abgefallen. Ab diesem Zeitpunkt kommt es zu einem Anstieg der Zündgrenze, entsprechend Gleichung (4-40). Sobald der Wert des Zündintegrals erstmals den Wert der Zündgrenze übersteigt, kommt es zur Zündung der Hochtemperaturverbrennung, was in dem dargestellten Betriebspunkt bei ca. 179 °KW der Fall ist. Die Zündverzugsberechnung ist damit abgeschlossen, zum besseren Verständnis ist in Abbildung 59 jedoch noch der weitere Verlauf der Zündgrenze dargestellt. Da die Beimischung von Frischladung durch die Hochtemperaturverbrennung beschleunigt wird, steigen sowohl der Massenanteil der Mischungszone, als auch die Zündgrenze, stark an. Bei ca. 199 °KW ist die Vermischung abgeschlossen (Massenanteil der Mischungszone erreicht 100%) und die Zündgrenze ist ab diesem Zeitpunkt auf dem gleichen Niveau wie bei äußerer Gemischbildung. Da bei physikalisch korrekter Parametrierung die Beimischung von Frischladung vor Brennbeginn rein auf Basis des $k-\epsilon$ Terms erfolgt, wird das Erreichen der oberen Zündgrenze bei DI-Betriebspunkten jedoch sehr lange dauern und somit nur bei DI-HCCI Betrieb auftreten.

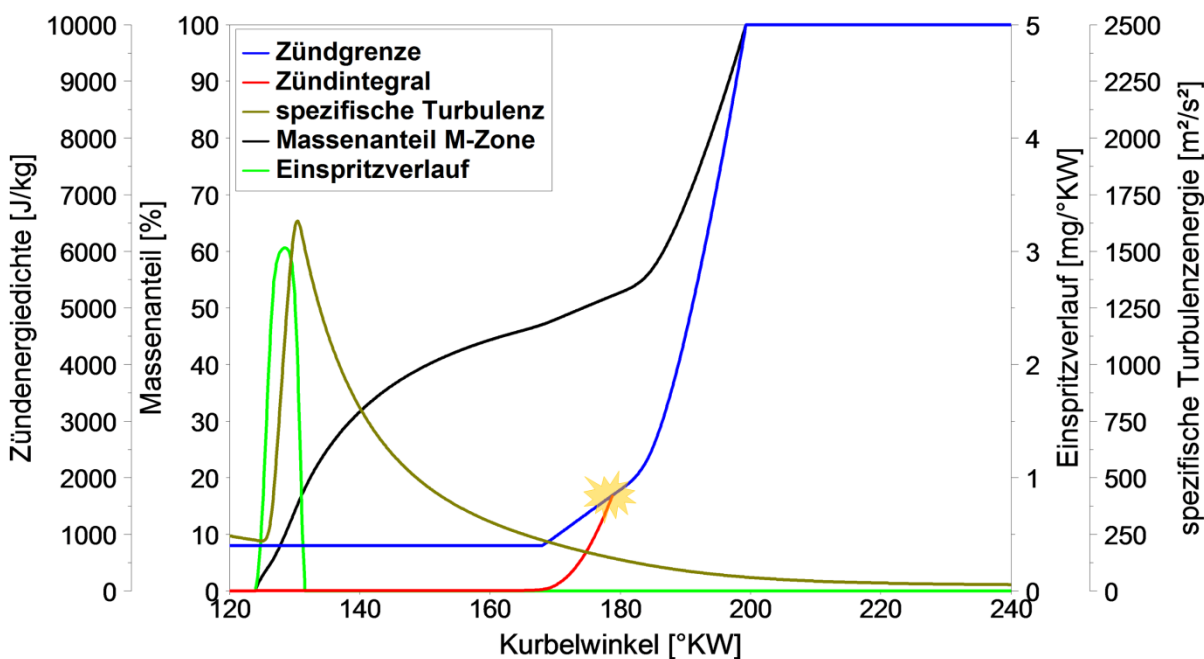


Abbildung 59: Darstellung des Zündintegrals und der veränderlichen Zündgrenze

4.4 Berechnung der Hochtemperaturverbrennung

Damit das Modell die Hochtemperaturverbrennung der unterschiedlichen Betriebsarten abbilden kann, wird die Verbrennung abhängig vom Homogenisierungszustand über verschiedene Untermodelle abgebildet. Bei sehr langen Zündverzügen, wie sie beispielsweise bei äußerer Gemischbildung vorliegen, ist davon auszugehen, dass ein vergleichsweise homogenes Gemisch im Brennraum vorliegt. Anders ist die Situation, wenn die Verbrennung bereits kurz nach Einspritzende beginnt. Die Verbrennung findet dann in einem teilhomogenen Umfeld statt, wodurch andere Effekte die Umsatzrate begrenzen. Aus diesen Überlegungen heraus findet bei Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung zunächst eine Aufteilung des Kraftstoffs in folgende Massebilanzräume statt:

- Homogener Pool 1
 - Nicht umsetzbarer Anteil
 - Umsetzbarer Anteil
- Homogener Pool 2
- Teilhomogener Pool
- Diffusions Pool

Kraftstoff der bei Brennbeginn bereits verdampft ist, wird dem homogenen Pool 1 zugeordnet. Kraftstoff der zwar schon eingespritzt, aber noch nicht verdampft ist wird unterschiedlich behandelt. Verdampft er in einem vom Benutzer festgelegten Zeitfenster nach Brennbeginn, wird er dem homogenen Pool 2 zugeordnet. Verdampft er erst später, wird er dem teilhomogenen Pool zugeordnet. Kraftstoff der erst nach Brennbeginn eingespritzt wird, kann nur diffusiv verbrennen und wird dementsprechend dem Diffusions Pool zugeordnet.

Die Umsetzung innerhalb der beiden homogenen Pools wird in [Abschnitt 4.4.2](#) beschrieben, die des teilhomogenen Pools in [Abschnitt 4.4.3](#). Eine Umsetzung des Diffusions Pools wurde in Rahmen diese Arbeit nicht implementiert, da Diffusionsverbrennung nur bei konventionellen Dieselmotoren auftritt. Allerdings wurde so eine Schnittstelle geschaffen, an die ein Modellansatz zur Abbildung der Diffusionsverbrennung angekoppelt werden kann, beispielsweise das Barba-Zeitskalenmodell ([Kapitel 3.2.2](#)) oder eines der Scheibenmodelle ([Kapitel 3.2.4](#)).

4.4.1 Abschätzung der unvollkommenen Verbrennung

Bei der homogenen Dieselmotorenverbrennung kommt es aufgrund unterschiedlicher Effekte zu einer unvollkommenen Verbrennung, siehe [Kapitel 2.4](#). In [Abbildung 60](#) ist für eine größere Anzahl an Messpunkten dargestellt, wie sich die über den Kraftstoff eingebrachte Energiemenge auf die Verbrennung und die HC- und CO-Emissionen verteilt. Obwohl bei Atomizer-HCCI eine Wandanlagerung im Brennraum ausgeschlossen werden kann, werden teilweise nur 50 % des eingebrachten Kraftstoffs verbrannt. In diesen Extremfällen befindet sich etwas mehr als 30% der Energie in den CO-Emissionen und der Rest in den HC-Emissionen. Der hohe Anteil an gebundener Energie in Form von Kohlenstoffmonoxid legt nahe, dass in größeren Teilen des Brennraums die Temperaturen nicht ausreichend hoch sind, um die letzte Oxidationsstufe von CO zu CO₂ zu ermöglichen. Bei den HCCI-Betriebspunkten, die aus zwei Einspritzbeginnvariationen bei unterschiedlicher Last bestehen, nehmen die HC-Emissionen mit Verschiebung des Einspritzbeginns nach früh deutlich zu. Die

4 Beschreibung des neuen Modellansatzes

Ursache hierfür ist sehr wahrscheinlich Wandanlagerung. Bei den HPLI-Betriebspunkten kommt es zu vergleichsweise wenig HC- und CO-Emissionen.

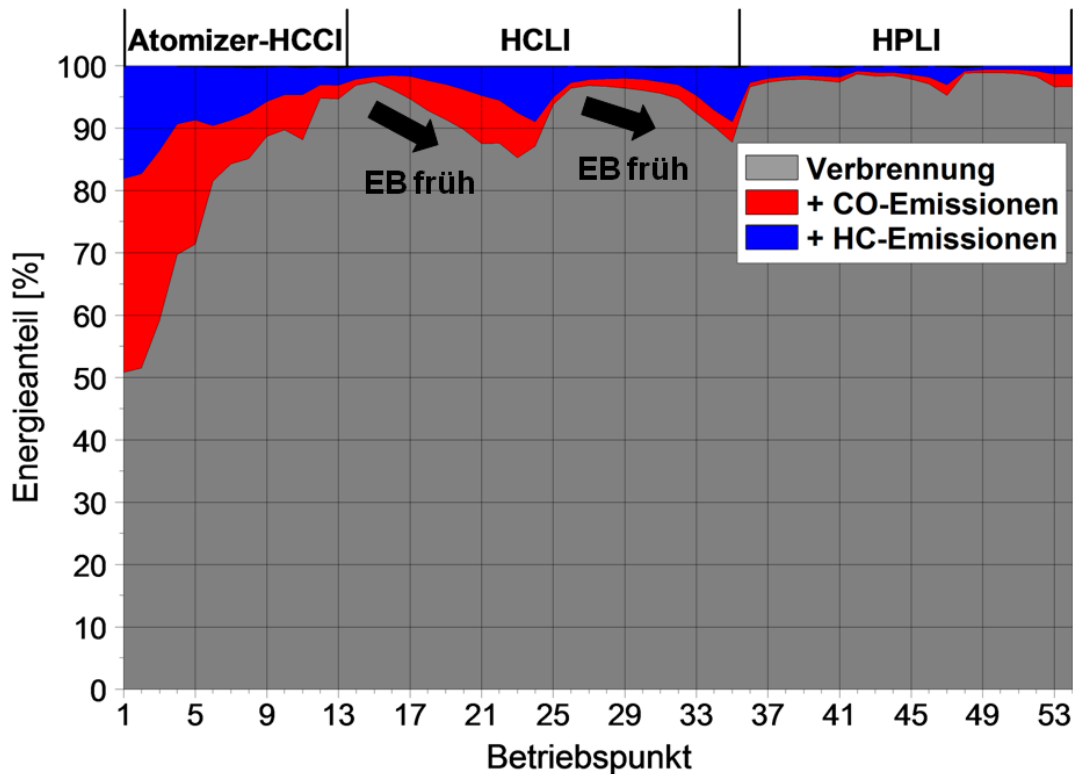


Abbildung 60: Grad der vollkommenen Verbrennung bei Prüfstandsmessungen von verschiedenen Betriebsarten

Es ist offensichtlich, dass nicht nur stöchiometrisches Restgas (Wasser, Kohlenstoffdioxid) die Verbrennungstemperatur senkt, sondern auch ein deutlicher Luftüberschuss. Zunächst wird daher die überschüssige Luftmasse abgeschätzt, siehe Gleichung (4-42), um damit die Inertgasmasse der Reaktionszone zu berechnen, siehe Gleichung (4-43).

$$m_{\text{Luft,Überschuss,R-Zone}} = \max(0 [\text{kg}]; m_{\text{Luft,R-Zone,BB}} - m_{\text{Krst.,R-Zone,BB}} \cdot L_{\text{min}} \cdot 1,5) \quad (4-42)$$

$m_{\text{Luft,Überschuss,R-Zone}}$: Überschüssige Luftmasse in der Reaktionszone [kg]

$m_{\text{Luft,R-Zone,BB}}$: Masse der Luft in der Reaktionszone bei Brennbeginn [kg]

$m_{\text{Krst.,R-Zone,BB}}$: Kraftstoffmasse (gasförmig) in der Reaktionszone bei Brennbeginn [kg]

$$m_{\text{Inert,R-Zone,BB}} = m_{\text{Luft,Überschuss,R-Zone}} + m_{\text{Rg.,R-Zone,BB}} \quad (4-43)$$

$m_{\text{Inert,R-Zone,BB}}$: Inertgasmasse der Reaktionszone bei Brennbeginn [kg]

$m_{\text{Rg.,R-Zone,BB}}$: Restgasmasse in der Reaktionszone bei Brennbeginn [kg]

Der Umsetzungswirkungsgrad des homogenen Pools wird abhängig von der Gemischbildung über folgende Formeln berechnet:

$$\eta_{\text{hom.Pool,ä.Gb.}} = 1 - \frac{m_{\text{Inert,R-Zone,BB}}}{V_{\text{Zyl,BB}}} \cdot \frac{c_m^2}{k_{\text{BB}}} \cdot \frac{1}{m_{\text{hom.Pool1,BB}}^2} \cdot c_{\text{Eff,ä.Gb.}} \quad (4-44)$$

$\eta_{\text{hom.Pool,ä.Gb.}}$: Umsetzungswirkungsgrad des homogenen Pools bei äußerer Gemischbildung [-]

$V_{\text{Zyl,BB}}$: Brennraumvolumen bei Brennbeginn [m³]

k_{BB} : spezifische Turbulenz bei Brennbeginn [m²/s²]

$m_{\text{hom.Pool 1,BB}}$: Kraftstoff im homogenen Pool 1 bei Brennbeginn [kg]

$c_{\text{Eff,ä.Gb.}}$: Abstimmparameter bei äußerer Gemischbildung [m³·kg]

$$\eta_{\text{hom.Pool,DI}} = 1 - \frac{m_{\text{Inert,R-Zone,BB}}}{V_{\text{Zyl,BB}}} \cdot \frac{c_m^2}{k_{\text{BB}}} \cdot c_{\text{Eff,DI}} \quad (4-45)$$

$\eta_{\text{hom.Pool,DI}}$: Umsetzungswirkungsgrad des homogenen Pools bei innerer Gemischbildung [-]

$c_{\text{Eff,DI}}$: Abstimmparameter bei DI-Betrieb [m³/kg]

Sowohl bei innerer, als auch bei äußerer Gemischbildung ist der Umsetzungswirkungsgrad des homogenen Pools abhängig von der Inertgasmasse in der Reaktionszone. Diese wird auf das Zylindervolumen bei Brennbeginn bezogen und bildet somit die Inertgasdichte. Je höher die Inertgasdichte ist, umso schlechter ist der Umsetzungswirkungsgrad. Durch die Turbulenz im Brennraum wird die Verbrennung gefördert. Um diesen Effekt möglichst drehzahlunabhängig abzubilden, wird das Quadrat der mittleren Kolbengeschwindigkeit durch die spezifische Turbulenz im Brennraum geteilt⁸⁹. Bei der äußeren Gemischbildung muss, im Gegensatz zum DI-Betrieb, zusätzlich noch die Kraftstoffmasse im ersten homogenen Pool berücksichtigt werden. Je höher diese ist, umso besser ist der Verbrennungswirkungsgrad, siehe Gleichung (4-44).

Auf Basis des bei Brennbeginn abgeschätzten Verbrennungswirkungsgrads, erfolgt die Aufteilung des homogenen Pools 1 in den umsetzbaren und nicht umsetzbaren Anteil:

$$m_{\text{hom.Pool1,ums.,BB}} = m_{\text{hom.Pool1,BB}} \cdot \eta_{\text{hom.Pool}} \quad (4-46)$$

$$m_{\text{hom.Pool1,n.ums.}} = m_{\text{hom.Pool1,BB}} - m_{\text{hom.Pool1,ums.,BB}}$$

$m_{\text{hom.Pool 1,ums.,BB}}$: Umsetzbare Masse des homogenen Pools 1 im Brennbeginn [kg]

$m_{\text{hom.Pool 1,n.ums.}}$: Nicht umsetzbare Masse des homogenen Pools 1 [kg]

Lediglich der umsetzbare Anteil wird über die im nächsten Abschnitt beschriebenen Terme verbrannt. Die Vorhersagegüte dieses Untermodells wird in 5.4.4 dargestellt.

⁸⁹ Die Drehzahl wirkt sich auf die Höhe der spezifischen Turbulenz bei Einlass-Schließt aus, siehe Gleichung (4-6). Der Dralleinfluss auf die spezifische Turbulenz ist ebenfalls drehzahlabhängig, siehe Gleichung (4-8), was bei der Berechnung des Umsetzungswirkungsgrades nicht berücksichtigt wird.

4.4.2 Der homogene Anteil

Der in den beiden homogenen Pools vorhandene Kraftstoff befindet sich bereits eine gewisse Zeit im Brennraum und hat sich daher auch mit der Ladung in der Reaktionszone am besten vermischt. Bei DI-Betriebspunkten ist es dennoch so, dass diese Vermischung nicht abgeschlossen sein wird. In Extremfällen ist sogar möglich, dass in der Mischungszone noch ein leicht fettes Gemisch vorliegt. Trotz dieser Unterschiede zwischen äußerer Gemischbildung (vollständige Vermischung mit der Ladung) und DI-Betrieb (recht weit fortgeschrittene, aber noch nicht vollständige Vermischung) wird die Umsetzung der beiden homogenen Pools als homogene Verbrennung aufgefasst und modelliert. Entsprechend wird die Massenumsatzrate beider Pools über einen gemeinsamen Ansatz berechnet. Inspiriert von der Modellierung der Premixed-Verbrennung im phänomenologischen Barba-Modell, wurde dabei das Konzept der steigenden und fallenden Flanke übernommen, siehe [10] S. 114 f, Kapitel 3.2.2. In der steigenden Flanke werden Effekte zusammengefasst, die im Verlauf der Zeit zu einer Zunahme der Massenumsatzrate führen:

$$r_{\text{HTC, hom, st.}} = \left(c_{\text{HTC, hom, a}} \cdot (t - t_{\text{BB}})^2 \cdot f_{\text{AGR}} + c_{\text{HTC, hom, b}} \cdot \frac{e^{-\frac{E_{\text{Akt., HTC}}}{R \cdot T_{\text{Zyl}}}}}{e^{-\frac{E_{\text{Akt., HTC}}}{R \cdot T_{\text{Zyl, BB}}}}} \right) \cdot m_{\text{hom. Pool 1, umsetzbar, BB}} \quad (4-47)$$

- $r_{\text{HTC, hom, st.}}$: Steigende Flanke der Massenumsatzrate der homogenen Hochtemperaturverbrennung [kg/s]
- $c_{\text{HTC, hom, a}}$: Parameter zur Abstimmung des Zeiteinflusses [1/s³]
- $c_{\text{HTC, hom, b}}$: Parameter zur Abstimmung des Temperatureinflusses [1/s]
- t_{BB} : Zeitpunkt des Brennbeginns [s]
- f_{AGR} : Funktion zur Abbildung der AGR-Rate [-]
- $E_{\text{Akt., HTC}}$: Aktivierungsenergie der Hochtemperaturverbrennung [J/mol]
- R : Universelle Gaskonstante [J/(mol·K)]
- $T_{\text{Zyl, BB}}$: Temperatur im Brennraum zum Brennbeginn [K]

Bei Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung wird es zunächst zu einer Zündung an den heißesten Stellen im Brennraum kommen. Im weiteren Verlauf erreichen immer mehr Stellen im Brennraum ein vergleichbares Temperaturniveau, was mit dem t^2 -Term ausgedrückt wird. Über die später genauer beschriebene Funktion f_{AGR} , wird der Einfluss der AGR-Rate abgebildet. Sofern kein Restgas im Brennraum vorliegt, hat die Funktion den Wert eins. Mit zunehmendem Restgasgehalt nehmen der Funktionswert und folglich auch die Massenumsatzrate ab. Mit fortschreitender Verbrennung kommt es zu einer Temperaturerhöhung, welche die Reaktivität zusätzlich verstärkt. Da die Reaktivität zum Zündzeitpunkt unabhängig von der Temperatur sein soll, wird der Temperatureinfluss durch einen normierten Arrhenius-Term modelliert. Generell hat sich gezeigt, dass mit normierten Arrhenius-Termen eine höhere Robustheit bei der Modellabstimmung über alle Betriebsarten erreicht werden kann.

In der fallenden Flanke werden Phänomene zusammengefasst, welche die Massenumsatzrate mit zunehmendem Verbrennungsfortschritt dämpfen:

$$r_{\text{HTC, hom, fal.}} = c_{\text{HTC, hom, c}} \cdot (m_{\text{hom. Pool 1, umsetzbar}} + m_{\text{hom. Pool 2}}) \cdot k \cdot f_{\text{AGR}} \cdot \underbrace{\lambda_{\text{UV, R-Zone}}^{0.25}}_{\text{Nur bei } \lambda < 1} \quad (4-48)$$

- $r_{\text{HTC, hom, fal.}}$: Fallende Flanke der Massenumsatzrate zur Beschreibung der homogenen Hochtemperaturverbrennung [kg/s]
 $c_{\text{HTC, hom, c}}$: Parameter zur Abstimmung der fallenden Flanke [s/m²]
 k : Spezifische Turbulenzenergie im Brennraum [m²/s²]
 $\lambda_{\text{UV, R-Zone}}$: Luftverhältnis in der Reaktionszone [-]

Der naheliegendste Einflussfaktor ist die unverbrannte Kraftstoffmasse der beiden homogenen Kraftstoffpools. Wie schon im vorherigen Kapitel wird davon ausgegangen, dass die Verbrennung durch die spezifische Turbulenz im Brennraum verstärkt wird. Diese nimmt jedoch nach Einspritzende kontinuierlich ab und somit auch die Massenumsatzrate. Der AGR-Einfluss wird erneut über die Funktion f_{AGR} abgebildet. Wenn aufgrund mangelhafter Ladungsbeimischung vorübergehend ein fettes Gemisch in der Mischungszone vorliegt, wird die Massenumsatzrate über den letzten Teil von Gleichung (4-48) zusätzlich abgeschwächt. Der Exponent wurde anhand stochastischer Überlegungen zur Stoßwahrscheinlichkeit zwischen einem Kraftstoff- und einem Sauerstoffmolekül abgeleitet⁹⁰. Sofern die Massenumsatzrate aufgrund von Luftmangel abgeschwächt werden muss, wird bis Rechenende mit dem minimal in der Mischungszone aufgetretenem Luftverhältnis weitergerechnet. Dies lässt sich phänomenologisch damit begründen, dass die nachfolgend beigemischte Luft eine gewisse Zeit braucht, um sich dem noch nicht verbrannten Kraftstoff zu vermischen.

Die gemeinsame Umsatzrate der beiden homogenen Pools ergibt sich aus dem kleineren Wert der beiden Flanken, siehe Gleichung (4-49), und wird, entsprechend der Kraftstoffmassenverhältnisse, anteilig auf die beiden homogenen Kraftstoffpools verteilt, siehe Gleichung (4-50).⁹¹

$$r_{\text{HTC, hom.}} = \min(r_{\text{HTC, hom, st.}}; r_{\text{HTC, hom, fal.}}) \quad (4-49)$$

- $r_{\text{HTC, hom.}}$: Massenumsatzrate der homogenen Hochtemperaturverbrennung [kg/s]

⁹⁰ Unter der Annahme, dass Luft nur aus O₂- und N₂-Molekülen besteht, wurde das Verhältnis von O₂-Molekülen zu allen Molekülen im Brennraum (O₂, N₂, Kraftstoff) in Abhängigkeit von Lambda berechnet. Normiert man das Verhältnis so, dass es bei $\lambda=1$ ebenfalls eins ist, ergibt sich ein charakteristischer Verlauf, der durch $\lambda^{0.25}$ näherungsweise dargestellt werden kann. Restgasanteile, wie z. B. CO₂- oder H₂O-Moleküle, werden bei dieser Betrachtung vernachlässigt.

⁹¹ Da die Gradienten der beiden Flanken im Übergangspunkt von der steigenden auf die fallende Flanke unterschiedliche Vorzeichen haben und sehr groß sind, würde sich ein sehr „spitzes“ Brennverlaufmaximum ergeben. Aus diesem Grund wurde eine Übergangsfunktion implementiert, die den Gradienten der steigenden Flanke mit zunehmender Annäherung an die fallende Flanke abschwächt.

$$\dot{r}_{\text{HTC, hom.Pool1}} = \dot{r}_{\text{HTC, hom.}} \cdot \frac{m_{\text{hom.Pool1, umsetzbar}}}{m_{\text{hom.Pool1, umsetzbar}} + m_{\text{hom.Pool2}}} \quad (4-50)$$

$$\dot{r}_{\text{HTC, hom.Pool2}} = \dot{r}_{\text{HTC, hom.}} - \dot{r}_{\text{HTC, hom.Pool1}}$$

$\dot{r}_{\text{HTC, hom.Pool1}}$: Massenumsatzrate des homogenen Pools 1 [kg/s]

$\dot{r}_{\text{HTC, hom.Pool2}}$: Massenumsatzrate des homogenen Pools 2 [kg/s]

Die Analyse der vorhandenen Messdaten ergab, dass sich Restgas, abhängig vom Einspritzzeitpunkt, unterschiedlich stark auf die Hochtemperaturverbrennung auswirkt. Finden Einspritzung und Gemischbildung in der Kompressionsphase statt, ist der AGR-Einfluss wesentlich geringer, als wenn sie in der Expansionsphase stattfinden, vgl. [Kapitel 5.4.2](#) und [5.4.3](#). Eine mögliche Erklärung ist, dass während der Verbrennung in der Kompressionsphase die gleiche Energie auf ein dichteres Gemisch vor dem Flammenbereich verteilt wird und dessen Entflammung somit begünstigt. Entsprechend kann die Verbrennung auch bei hohen AGR-Raten noch vergleichsweise schnell ablaufen. In der Expansionsphase nimmt die Dichte in dem Gebiet vor dem Flammenbereich ab und folglich wird die Zündung in diesem Bereich nicht mehr so stark begünstigt. Als physikalische Größe zur Beschreibung dieses Effekts ist zunächst der Druck naheliegend. Ohne Verbrennung ist der Druckverlauf jedoch relativ symmetrisch zum oberen Totpunkt⁹². Insbesondere bei den HCLI- und den HPLI-Betriebspunkten ist der Druckunterschied vor Brennbeginn deshalb nicht groß genug, um den Effekt quantitativ richtig abzubilden. Aus diesem Grund wurde der mittlere Druckgradient im Brennraum zur Beschreibung des Phänomens herangezogen. Ohne Verbrennung ist dieser bis kurz vor OT positiv, während er danach ohne Verbrennung negativ ist. Die Mittelung der Druckgradienten erfolgt ausgehend vom Einspritzbeginn, respektive Rechenbeginn bei äußerer Gemischbildung, bis zum Brennbeginn, siehe Gleichung (4-51). Der Wert entspricht somit dem Mittelwert während der Zündverzugsphase. Die Verwendung des Druckgradienten bei Brennbeginn wurde in Betracht gezogen. Aufgrund der relativ starken Änderung der Druckgradienten vom positiven in den negativen Wertebereich um den OT herum, entsteht in diesem Fall jedoch eine starke Abhängigkeit vom Zündzeitpunkt, was nicht zielführend ist.

$$\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\text{gem.,ä.G.}} = \frac{\int_{t_{\text{RB}}}^{t_{\text{BB,HTC}}} \left(\frac{dp}{dt}\right) dt}{t_{\text{BB,HTC}} - t_{\text{RB}}} \quad \left(\frac{dp}{dt}\right)_{\text{gem.,DI}} = \frac{\int_{t_{\text{EB}}}^{t_{\text{BB,HTC}}} \left(\frac{dp}{dt}\right) dt}{t_{\text{BB,HTC}} - t_{\text{EB}}} \quad (4-51)$$

$(dp/dt)_{\text{gem.,ä.G.}}$: Mittlere Druckänderungsrate bei äußerer Gemischbildung [Pa/s]

t_{RB} : Zeitpunkt des Rechenbeginns [s]

$t_{\text{BB,HTC}}$: Zeitpunkt des Brennbeginns der Hochtemperaturverbrennung [s]

dp/dt : Aktuelle Druckänderungsrate im Brennraum [Pa/s]

$(dp/dt)_{\text{gem.,DI}}$: Mittlere Druckänderungsrate bei DI-Betrieb [Pa/s]

⁹² Beim geschleppten Motor liegt das Druckmaximum aufgrund der Wandwärmeverluste kurz vor OT.

Der Inertgaseinfluss wird anhand der stöchiometrischen AGR-Rate bei Brennbeginn über folgende Gleichung abgebildet:

$$f_{AGR} = e^{-\frac{x_{st\ddot{o}.AGR, BB} \cdot c_{Inert}}{f_{Druck}}} \quad (4-52)$$

$x_{st\ddot{o}.AGR, BB}$: Stöchiometrische AGR-Rate bei Brennbeginn [-]

c_{Inert} : Parameter zur Abstimmung des Inerteinflusses [-]

f_{Druck} : Funktion zur Abbildung des Druckgradienteneinflusses [-]

Vernachlässigt man den Druckgradienteneinfluss ($f_{Druck} = 1$) ergeben sich bei unterschiedlichen Parametrierungen die in Abbildung 61 dargestellten Funktionsverläufe.

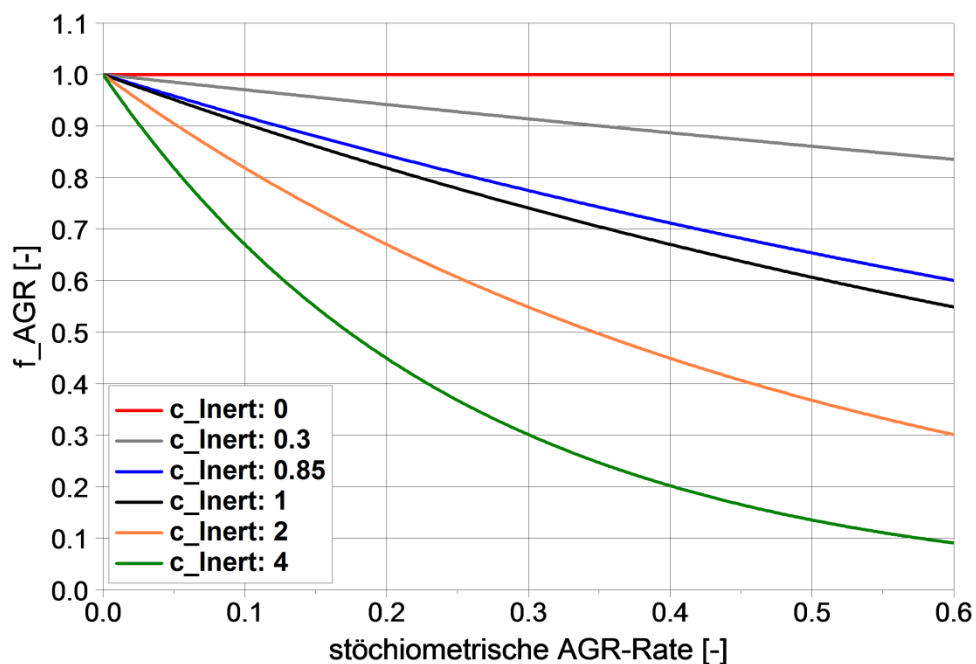


Abbildung 61: Funktion zur Abbildung des AGR-Einflusses mit unterschiedlichen Parametrierungen ohne Berücksichtigung des Druckgradienteneinflusses ($f_{Druck} = 1$)

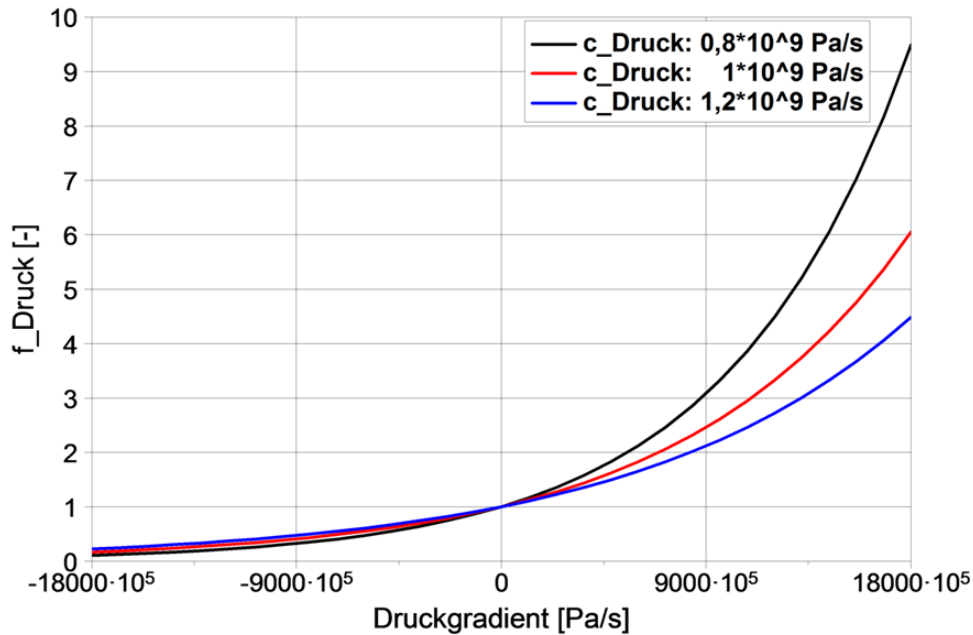
Wählt man den Abstimmparameter c_{Inert} größer als Null, nimmt der Funktionswert mit zunehmender AGR-Rate ab. Für $c_{Inert} = 0.85$ ergibt sich ein linearer Verlauf, bei größeren Parameterwerten nimmt der Funktionswert im Bereich niedriger AGR-Raten bereits sehr stark ab, während er in Bereichen höheren AGR-Raten kaum noch kleiner wird.

Ausgehend von dem in Abbildung 61 dargestellten Funktionsverlauf muss dieser bei positiven Druckgradienten abgeschwächt (vergleichbar mit einer Verkleinerung von c_{Inert}) und bei negativen Druckgradienten verstärkt werden. Gleichung (4-53) zeigt die Funktion zur Abbildung des Druckgradienteneinflusses, deren Verlauf für unterschiedliche Parametrierungen beispielhaft in Abbildung 62 dargestellt ist. Bei $f_{Druck}=1$ ist der Inertgaseinfluss unverändert. Eine Vergrößerung ($f_{Druck}>1$) entspricht einer Verringerung von c_{Inert} . Je höher der Funktionswert von f_{Druck} , umso mehr wird folglich der AGR-Einfluss verändert. Aus der Abbildung 62 kann daher abgeleitet werden, dass mit kleiner gewähltem Abstimmparameter c_{Druck} der Einfluss des mittleren Druckgradienten auf die Funktion zur Abbildung des AGR-Einflusses zunimmt.

$$f_{\text{Druck}} = e^{\left(\frac{dp}{dt}\right)_{\text{gem.}} \cdot c_{\text{Druck}}} \quad (4-53)$$

$(dp/dt)_{\text{gem.}}$: Mittlere Druckänderungsrate bis zum Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung [Pa/s]

c_{Druck} : Parameter zur Abstimmung des Druckeinflusses [Pa/s]



18000·10⁵ Pa/s entsprechen 1,5 bar/°KW bei 2000 U/min

Abbildung 62: Druckeinfluss bei unterschiedlicher Parametrierung

Abbildung 63 zeigt abschließend den Verlauf von f_{AGR} über der AGR-Rate für drei charakteristische mittlere Druckgradienten mit einer beispielhaften Parametrierung. Bei Atomizer-HCCI Betrieb und HCLI-Betriebspunkten ist der rote Verlauf relevant. Selbst bei hohen AGR-Raten wird die Verbrennung nur unwesentlich durch das Restgas abgeschwächt. Liegen Einspritzung und Brennbeginn um den oberen Totpunkt herum, ist die schwarze Kurve relevant. Hohe AGR-Raten führen hier bereits zu einer sichtbaren Abschwächung der Hochtemperaturverbrennung. Der HCLI-Betrieb wird durch die blaue Kurve repräsentiert. Bei der dargestellten Parametrierung führt bereits eine stöchiometrische AGR-Rate von 20% zu einer deutlichen Abschwächung der Verbrennung, um Faktor fünf im Vergleich zu einem Betriebspunkt ohne AGR.

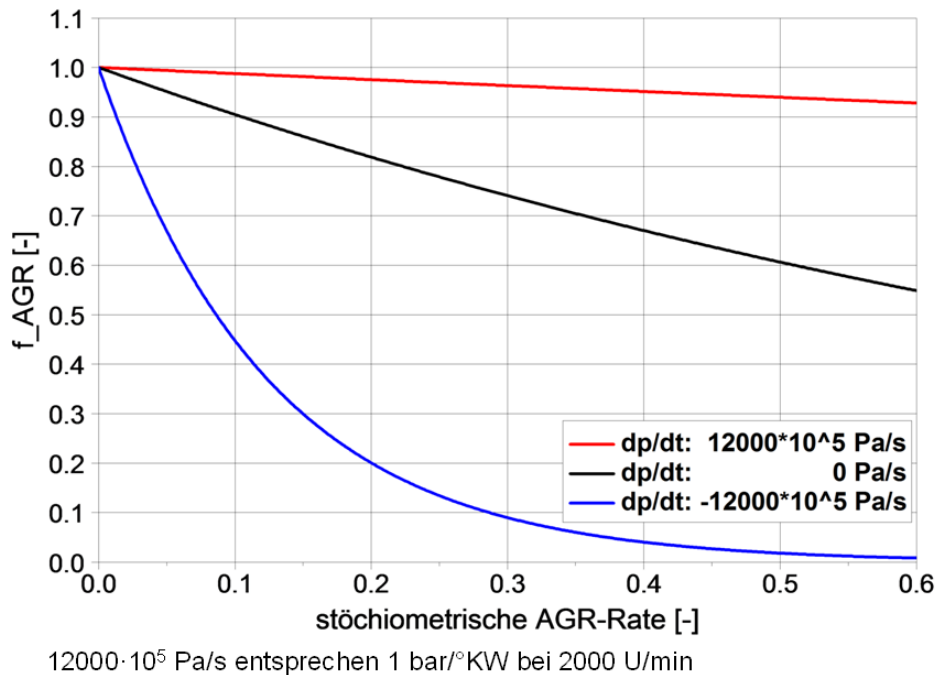


Abbildung 63: Funktion zur Abbildung des AGR-Einflusses bei unterschiedlichen Druckgradienten ($c_{\text{Inert}}: 1$, $c_{\text{Druck}}: 0,576 \cdot 10^9 \text{ Pa/s}$)

4.4.3 Der teilhomogene Anteil

Wie in den vorherigen Abschnitten gezeigt wurde, kann die homogene Dieselerbrennung nicht allein über die Reaktionskinetik in einem homogenen Reaktor abgebildet werden. Ebenso ist es nicht zielführend mehrere Temperaturzonen einzuführen. Unter motorischen Randbedingungen müssen bereits bei der perfekt homogenen Verbrennung (Atomizier-Betrieb) selbstverstärkende und abschwächende Effekte berücksichtigt werden. Die Zahl der Zündorte nimmt mit der Zeit zu und in der Umgebung der einzelnen Zündorte steigt – aufgrund der zunehmenden Temperatur – die Wahrscheinlichkeit, dass es zu weiteren Selbstzündungen kommt. Aufgrund der abnehmenden Turbulenz und den geringen unverbrannten Kraftstoffmengen gegen Brennende nimmt die Umsatzgeschwindigkeit ab, was auch bei der perfekt homogenen Verbrennung zu einem Ausbrand führt⁹³.

Da die teilhomogene Verbrennung nicht über den gesamten Brennraum verteilt stattfindet, nehmen die Wechselwirkungen zwischen den Zündorten, den verbrannten Bereichen und dem unverbranntem Gemisch weiter zu. Es liegen auch lokal Lambda-Bereiche vor, die eine Flammenausbreitung ermöglichen. Andererseits ist der Kraftstoff bei Brennbeginn noch nicht vollständig verdampft, was die Selbstzündung erschwert. Es ist daher nicht zielführend, bei der Modellierung der teilhomogenen Verbrennung von einer Volumenreaktion auszugehen. Die Modellvorstellung einer von mehreren Zündorten ausgehenden Flammenausbreitung erscheint passender. Deren Ausbreitungsgeschwindigkeit liegt jedoch deutlich über der laminaren Flammengeschwindigkeit, da im unverbrannten Bereich vor der Flamme auch schon deut-

⁹³ Natürlich begünstigen auch lokal kalte Bereiche, beispielsweise in Wandnähe, einen verlangsamten Ausbrand. Es ist jedoch nicht möglich den Ausbrand allein über Temperaturinhomogenitäten abzubilden und zu erklären.

liche Vorreaktionen abgelaufen sein können, auch wenn diese noch nicht zur Selbstzündung ausgereicht haben. Folglich muss weniger Energie in die „Vorheizzone“ vor der Flamme eingebracht werden, damit es zu einem Flammenfortschritt kommt. Eine Modellierung über den von Barba entwickelten Modellansatz auf Basis der laminaren Flammenausbreitung von vielen Zündorten, siehe [10] S. 115 bzw. Kapitel 3.2.2, ist daher ebenfalls nicht sinnvoll.

Es kann zusammengefasst werden, dass sich die teilhomogene Verbrennung weder über eine – durch eine Reaktionskinetik bestimmte – Volumenreaktion, noch über eine laminare Flammenausbreitung modellieren lässt. Damit lässt sie sich nur schwer über physikalisch-chemische Grundgleichungen darstellen. Deswegen wurde ein Ansatz gewählt, der zunächst etwas empirisch erscheinen mag, der jedoch an allen vorhandenen Messdaten sehr gute Ergebnisse liefert und sich leicht handhaben und abstimmen lässt. Die von Lämmle durchgeführten 3D-CFD Simulationen von HPLI-Betriebspunkten zeigten außerdem, dass die teilhomogene Verbrennung auch mit dieser Modellklasse nur schwer wiedergegeben werden kann:

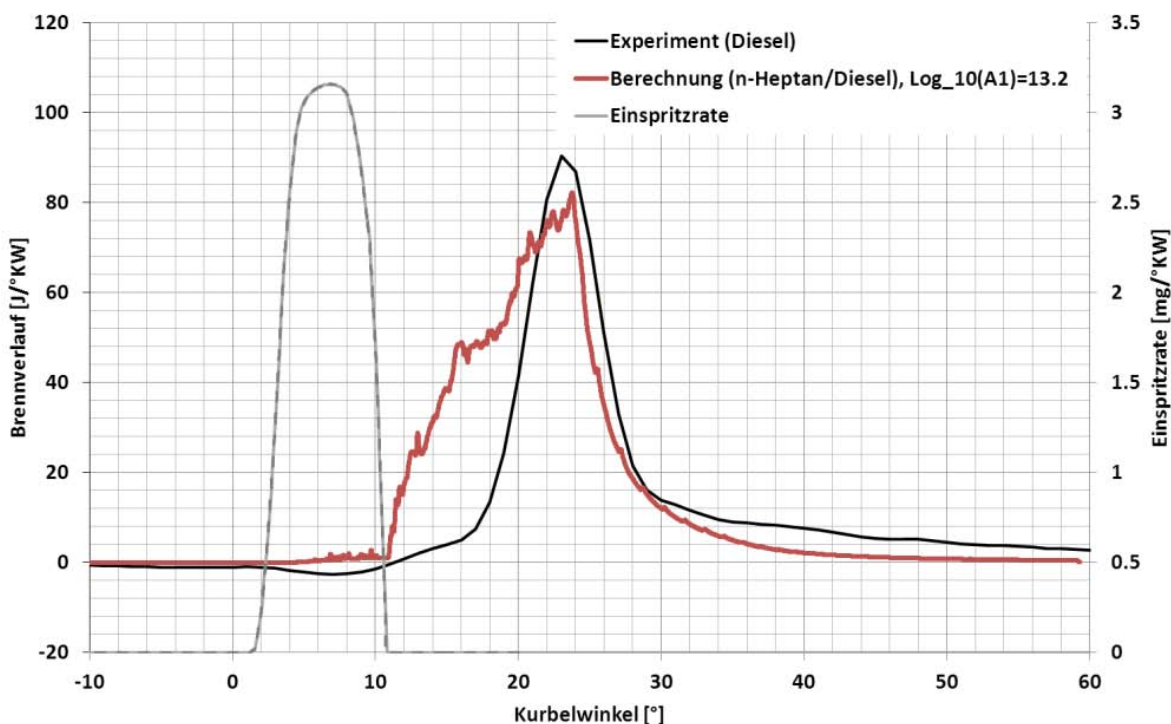


Abbildung 64: Gegenüberstellung von DVA-Brennverlauf und 3D-CFD Simulation bei einem HPLI-Betriebspunkt [128] S. 102

Im teilhomogenen Pool befindet sich der Kraftstoff, der bei Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung bereits eingespritzt war, aber erst nach einer vorgegebenen Zeit verdampft. Bei Brennbeginn ist der teilhomogene Pool somit zunächst leer und wird erst im weiteren Verlauf gefüllt. Wie die in Kapitel 5.4 dargestellten Simulationen noch zeigen werden, wird bei OT-naher Einspritzung zwischen 15% und 30% der eingespritzten Kraftstoffmasse dem teilhomogenen Pool zugeordnet.

Die Reaktionsrate ergibt sich aus der Kraftstoffdichte der Mischungszone – wobei nur der Kraftstoff des teilhomogenen Pools in die Berechnung der Dichte eingeht – und einer Zeitfunktion zur Beschreibung der Gemischaufbereitung während der teilhomogenen Verbrennung, siehe Gleichung (4-54).

$$\dot{r}_{\text{HTC,teilhom.}} = C_{\text{HTC,teilhom.}} \cdot \frac{m_{\text{Krst.,teilhom.}}}{V_{\text{M-Zone}}} \cdot f_{\text{teilhom.}} \quad (4-54)$$

- $\dot{r}_{\text{HTC,teilhom.}}$: Massenumsatzrate des teilhomogenen Pools [kg/s]
 $C_{\text{HTC,teilhom.}}$: Abstimmparameter der teilhomogenen Verbrennung [m³/s]
 $m_{\text{Krst.,teilhom.}}$: Masse des teilhomogenen Kraftstoffpools [kg]
 $f_{\text{teilhom.}}$: Zeitfunktion zur Beschreibung der teilhomogenen Verbrennung [-]

Die Zeitfunktion wird durch Gleichung (4-55) beschrieben. In Sekunden betrachtet, bleibt die Brenndauer der teilhomogenen Verbrennung bei einer Drehzahländerung somit konstant. In der Einheit Grad Kurbelwinkel verändert sich die Brenndauer bei einer Variation der Drehzahl, siehe Abbildung 65. Mangels Messdaten mit einer Drehzahlvariation erschien diese Implementierung am sinnvollsten.

$$f_{\text{teilhom.}} = 1 - \frac{1}{e^{5 \cdot 10^5 \cdot (t - t_{\text{BB,HTC}})^2}} \quad (4-55)$$

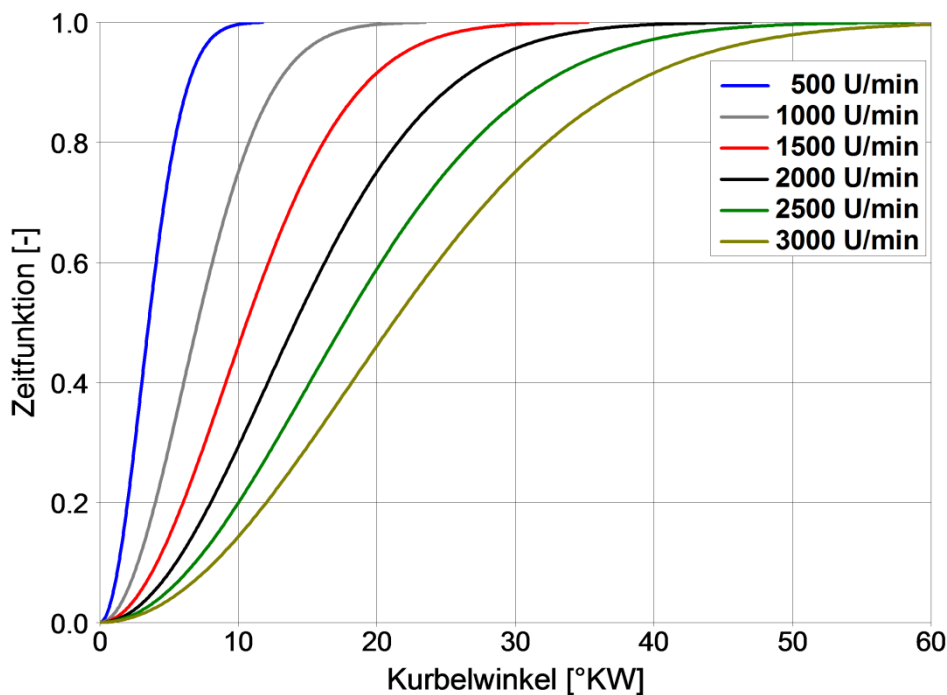


Abbildung 65: Darstellung der Zeitfunktion über dem Kurbelwinkelverlauf für unterschiedliche Drehzahlen

Die Zeitfunktion steigt zunächst exponentiell an, geht dann aber in einen degressiven Verlauf über. Der exponentielle Anstieg repräsentiert die Entzündung des teilhomogenen Gemisches an dem bereits umgesetzten homogenen Gemisch. Dieser Effekt ist jedoch räumlich begrenzt. Es ist außerdem davon auszugehen, dass die Umsatzrate gegen Ende durch lokalen Sauerstoffmangel zusätzlich abgeschwächt wird. Dies wird indirekt über die abnehmende Kraftstoffkonzentration und die degressive, gegen einen Grenzwert laufende Zunahme der Zeitfunktion abgebildet. Im Übrigen ist anzumerken, dass bei Betriebspunkten mit teilhomogener Verbrennung die Verdampfungsrates während der „Befüllung“ des Kraftstoffpools bereits rückläufig ist, was den Brennverlauf zusätzlich verringert.

5 Validierung des neuen Berechnungsansatzes

5.1 Motordaten

Zur Entwicklung und Validierung des Verbrennungsmodells wurde auf Messdaten aus dem FVV-Vorhaben 808 zurückgegriffen [64]. Der damalige Versuchsträger war ein Einzylinder-Forschungsmotor, der auf dem OM611 Pkw-Motor von Daimler-Chrysler basierte. Eine Beschreibung des Serienmotors kann [81] und [115] entnommen werden. Abweichend vom Serienzustand hatte der Forschungsmotor ein leistungsfähigeres Einspritzsystem, siehe [64] S. 16. Im Rahmen des FVV-Vorhabens 808 wurden auch Kolben- und Einspritzdüsengeometrie variiert, siehe [64] S. 17 ff. Im Anschluss an das FVV Vorhaben wurde von Haas ein Atomizer verbaut und entsprechende Messungen durchgeführt, siehe [63] S. 75 ff. Für diese Arbeit wurde aus der Vielzahl an Messdaten eine Auswahl mit einheitlichem Motor-aufbau für alle gemessenen Betriebsarten (Atomizer-HCCI, HCLI, HPLI) übernommen. Die entsprechenden Motorkenndaten sind in Tabelle 5-1 aufgelistet. Abbildung 66 zeigt die verwendete Kolbenmuldengeometrie. Die Messdatenauflösung der Indizierung betrug 1°KW.

Hub	mm	88.4
Bohrung	mm	88
Hubraum	cm ³	537.6
Pleuellänge	mm	149
Verdichtungsverhältnis (geometrisch)	-	16
Kurzbezeichnung der Kolbenmulde	-	80_1
Anzahl der Ventile	-	4
Ø Einlassventil	mm	30.3
Ø Auslassventil	mm	28.4
maximaler Ventilhub	mm	7.9
Einlass schließt	°KW n. UT	56.5
Auslass öffnet	°KW v. UT	47
Aufladeverfahren	-	Fremdaufladung
DrzUT ohne EKAS	-	2.7
DrzUT mit EKAS	-	6.1
Einspritzsystem	-	Common-Rail System der 2. Generation (Robert Bosch GmbH)
maximaler Einspritzdruck	bar	1600
mögliche Einzeleinspritzungen pro ASP	-	6
Injektor	-	CRIP 2.2 (Robert Bosch GmbH)
Injektorlage	-	zentral
Kurzbezeichnung der Einspritzdüse	-	8L-HD320/80°SKW
Anzahl der Düsenlöcher	-	8
Spritzkegelwinkel	°	80
Hydraulischer Durchfluss	[cm ³ /30 s] @ 100 bar	320
Düsenlochdurchmesser	mm	0.112

Tabelle 5-1: Relevanten Kenndaten des Einzylinder-Forschungsmotors (Datenbasis: [64] S. 16ff)

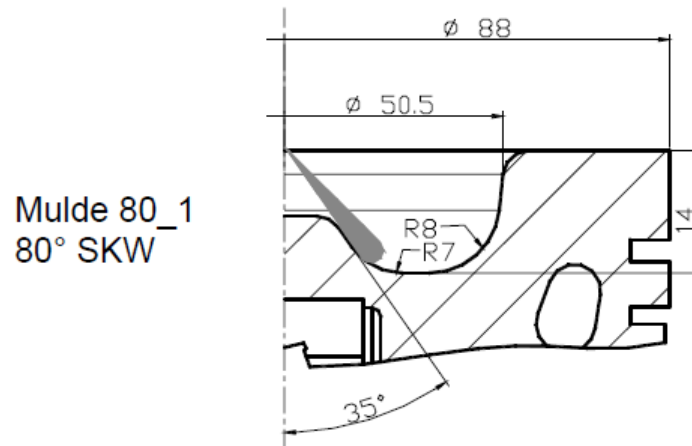


Abbildung 66: Geometrie der Kolbenmulde [64] S. 18

5.2 Messdatenaufbereitung

Die Rohdruckverläufe wurden zunächst mit einem Butterworth-Filter 2. Ordnung mit einer Grenzfrequenz von 5000 Hz gefiltert. Im Anschluss wurde eine DVA mit 100%-Iteration bei konstanter Luftmasse durchgeführt. Die Nulllinie wurde anhand des Summenbrennverlaufkriteriums bestimmt.

Eine erste Analyse der Messdaten ergab in einigen Betriebspunkten Abweichungen zwischen den qualitativen Verläufen der gemessenen Saugrohrtemperatur und der Brennraumtemperatur bei Einlass-Schließt⁹⁴:

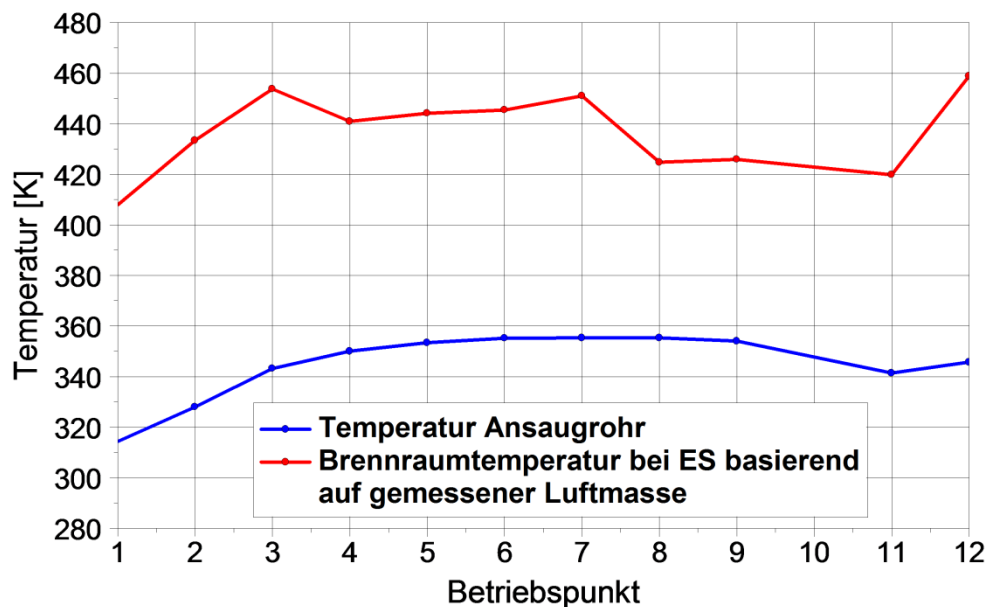


Abbildung 67: Temperatur im Ansaugrohr und Brennraumtemperatur bei Einlass-Schließt

Drehzahl und Last sind bei den dargestellten Betriebspunkten identisch, die AGR-Rate unterscheidet sich deutlich. Da die Temperaturmessstelle im Ansaugrohr je-

⁹⁴ Die Brennraumtemperatur bei Einlass-Schließt kann über die thermische Zustandsgleichung aus der Ladungsmasse, dem Zylinderdruck und dem Zylindervolumen bei Einlass-Schließt berechnet werden.

doch deutlich hinter der Einleitungsstelle für das AGR liegt, sollten die beiden Verläufe qualitativ ähnlich sein. Das niedrigere Temperaturniveau der Betriebspunkte acht, neun und elf ist daher nicht ganz nachvollziehbar. Für die Abweichungen gibt es folgende Erklärungsmöglichkeiten:

- Die Messung der Ansaugrohrtemperatur ist fehlerhaft
- Die Vermischung von Restgas und Frischluft ist bis zur Temperaturmessstelle unvollständig, was zur Folge hat, dass ein heterogener Temperaturverlauf über dem Strömungsquerschnitt vorliegt, d. h. die gemessene Ansaugrohrtemperatur entspricht nicht der mittleren Temperatur des Gases
- Der gemessene Zylinderdruck ist fehlerhaft
- Die gemessene Luftmasse ist fehlerhaft
- Die gemessene AGR-Rate ist fehlerhaft

Da die Fehlerquelle letztlich nicht identifiziert werden kann, Abweichungen in der Starttemperatur von 20 K bei Berechnungen mit dem Reaktionsmechanismus jedoch auch nicht vernachlässigbar sind, wurden die Startbedingungen mit Hilfe einer 1D-Strömungssimulation berechnet. Dazu wurde ein GT-Power Modell des Motors aufgebaut, das an den Stellen der Niederdruckindizierung freigeschnitten wurde:

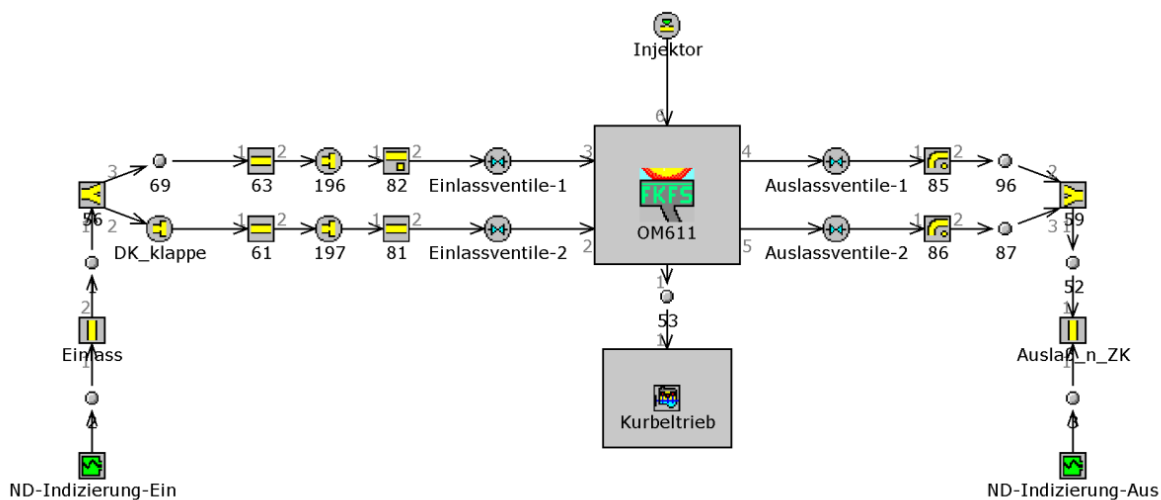


Abbildung 68: Vereinfachtes GT-Power Modell zur Berechnung der Startbedingungen der Hochdruckrechnung

In dem Umgebungsobjekt der Einlassseite wurden die gemessene Niederdruckindizierung, die AGR-Rate sowie die Temperatur im Ansaugrohr vorgegeben. Auf der Auslassseite wurde analog verfahren, wobei stöchiometrisches Restgas vorgegeben wurde. Im Brennraum wurde der DVA-Brennverlauf des jeweiligen Betriebspunkts vorgegeben. Durch die Strömungssimulation werden die Ladungsmasse und der Druck im Zylinder bei Einlass-Schließt bestimmt, woraus wiederum die Starttemperatur berechnet wird, siehe [Abbildung 69](#).

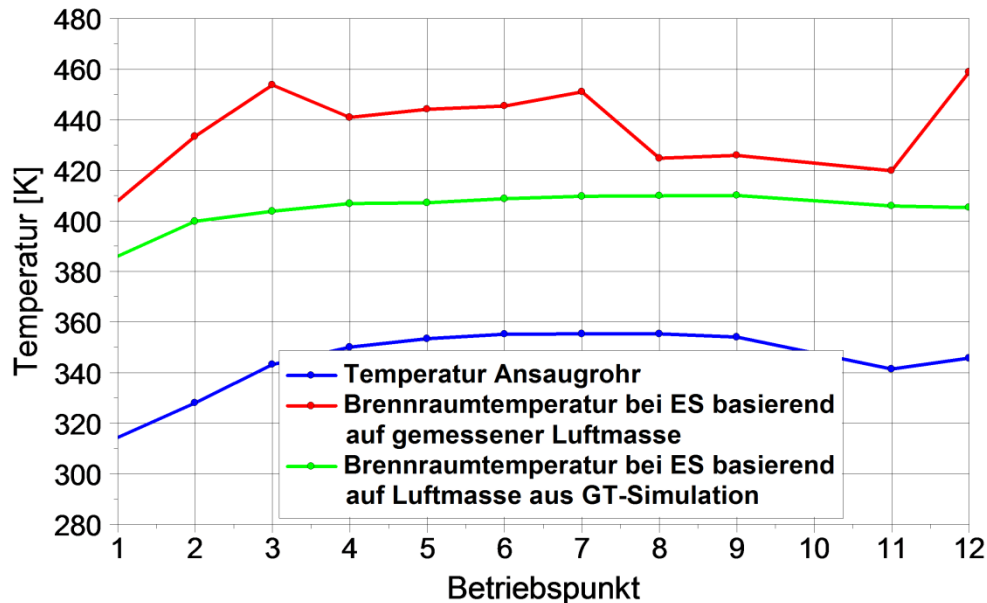


Abbildung 69: Vergleich der Starttemperaturen basierend auf Messwerten gegenüber der Starttemperatur basierend auf der 1D-Strömungssimulation

Die anhand der Strömungssimulation berechneten Starttemperaturen sind vom Gesamtniveau etwas niedriger. Vom qualitativen Verlauf über die verschiedenen Betriebspunkte sind sie jedoch physikalisch plausibler, als die Starttemperaturen, die basierend auf den Messwerten bestimmt wurden. Die Tatsache, dass die Temperaturdifferenzen zwischen den einzelnen Betriebspunkten besser wiedergegeben werden, überwiegt den Nachteil der absoluten Abweichung von ca. 30 K gegenüber den ursprünglichen Starttemperaturen. Bei allen Betriebspunkten mit Direkteinspritzung wurden die Ladungsmasse bei Einlass-Schließt und deren Restgasanteil anhand des GT-Modells bestimmt. Die DVA wurde mit diesen Randbedingungen wiederholt, wobei erneut eine 100%-Iteration bei konstanter Luftmasse gemacht wurde.

5.3 Abstimmprozess

Aufgrund der vergleichsweise hohen Anzahl an Abstimmparametern ist es sinnvoll bei der Modellabstimmung systematisch vorzugehen. Tabelle 5-2 zeigt alle Parameter in der Reihenfolge, in der man sie sinnvollerweise abstimmt. In der ersten Spalte sind die Parameterbezeichnungen aufgelistet, die im vorherigen Kapitel verwendet wurden. Die zweite Spalte listet die Gleichungen auf, in denen der entsprechende Parameter enthalten ist. Da die Datei zur Parametrierung des Zylindermoduls eine normale Textdatei ohne Formatierung ist (Par-Datei), weichen die Bezeichnungen ab und sind in der dritten Spalte aufgeführt. Um „handliche“ Parameterwerte zu haben, werden teilweise Einheiten mit SI-Präfixen verwendet, welche der vierten Spalte entnommen werden können. Die in Spalte fünf aufgelisteten Parameterwerte haben sich als optimal zur Simulation des OM611 herausgestellt. Die letzte Spalte enthält eine kurze Beschreibung des jeweiligen Parameters.

Die in Tabelle 5-2 hellgrau hinterlegten Parameter sind geometrische Größen, die in jedem Fall notwendig sind. Die gelb hinterlegten Geometriegrößen sind nur bei DI-Betrieb erforderlich. Die zehn grün hinterlegten Abstimmparameter müssen unabhängig von der Art der Gemischbildung immer abgestimmt werden. Der gelbbraun hinterlegte Parameter ist nur bei äußerer Gemischbildung notwendig, während die blau hinterlegten Parameter nur bei DI-Betrieb abgestimmt werden müssen.

Parameter	Gleichung	Bezeichnung in Par-Datei	Einheit in Par-Datei	Wert	Beschreibung
n_D	4-5, 4-15	Anz_Duesenloecher	-	8.0	Düsenlochanzahl
d_D	4-15	d_Duese	mm	0.12	Düsenlochdurchmesser
d_{EV}	4-6	d_EV	mm	30.30	Einlassventildurchmesser
h_{EV}	4-6	h_EV	mm	7.90	Maximaler Hub des Einlassventils
Z_{Drill}	4-8, 4-10, 4-11, 4-12	Z_Drill	-	2.6	Drillzahl
$c_{A,3+}$	4-37, (Tabelle 4-2)	A_R3_vor	-	-0.4	Dient der Abstimmung des Brennverlaufsmaximums während der LTC
$c_{E,7}$	4-37, (Tabelle 4-2)	E_R7	-	0.85	Dient der Abstimmung des LTC-Brennbeginns
ϵ_{Drill}	4-8	Eps_Drill	-	0.142	Gewichtet die Drallturbulenz
ϵ_{Diss}	4-8	Eps_Diss	-	2.184	Gewichtet die Dissipation
C_{Zg}	4-39, 4-41	Zuendgrenze	J/kg	10000	Zündgrenze bei maximaler Homogenisierung
$c_{Eff,a.Gb.}$	4-44	c_CombEff_Atomizer	mm ³ ·mg	4070	Faktor zur Abstimmung der unvollkommenen Verbrennung bei äußerer Gemischbildung
C_{Druck}	4-53	HTC_hom_Druckeinfluss	bar/s	5760	Parameter zur Abstimmung des Druckeinflusses auf die AGR-Verträglichkeit der homogenen HTC
C_{Inert}	4-52	HTC_hom_Inerteinfluss	-	1	Parameter zur Abstimmung des Inertgaseinflusses auf die homogene HTC
$C_{HTC, hom, a}$	4-47	HTC_hom_a	1/ms ³	3.97	Parameter zur Abstimmung des Zeiteinflusses auf die homogene HTC
$C_{HTC, hom, b}$	4-47	HTC_hom_b	1/s	13.244	Parameter zur Abstimmung des Temperatureinflusses auf die homogene HTC
$C_{HTC, hom, c}$	4-48	HTC_hom_c	s/m ²	21.6	Parameter zur Abstimmung der umsatzbegrenzenden Einflüsse der homogenen HTC
$f_{X,HB}$	4-40, 4-41	f_X_Start	-	0.08	Vorfaktor zur Festlegung der unteren Zündgrenze
$c_{Eff,DI}$	4-45	c_CombEff_DI	dm ³ /kg	135	Faktor zur Abstimmung der unvollkommenen Verbrennung bei DI-Betrieb
$C_{HTC, teilhom.}$	4-54	HTC_teilhom	m ³ /s	0.06	Abstimmparameter der teilhomogenen HTC
$\epsilon_{Einspr.$	4-8	Eps_Einspritz	-	0.8	Gewichtet die Einspritzturbulenz
$C_{Beimisch, 1}$	4-3	Beimischfaktor_1	-	0.08	Gewichtet die turbulenzbasierte Beimischung
$C_{Beimisch, 2}$	4-3	Beimischfaktor_2	-	0.06	Gewichtet die Beimischung aufgrund der Dichtedifferenz

Tabelle 5-2: Übersicht aller Parameter von HomBrennrateFVV

Wenn das Verbrennungsmodell auf einen neuen Motor abgestimmt werden soll, ist es empfehlenswert als Ausgangsbasis die in Tabelle 5-2 aufgelisteten Parameterwerte zu verwenden. Ausgehend davon sind Parameter in der aufgelisteten Reihenfolge anzupassen. Diese wurde so gewählt, dass die einzelnen physikalischen Effekte möglichst in der Reihenfolge ihres Auftretens in der Realität abgestimmt werden.

Im Weiteren wird auf die einzelnen Parameter detaillierter eingegangen. Dabei wird vereinzelt auf Ergebnisgrößen verwiesen, die durch das FVV-Zylindermodul in die Ausgabedateien (Hrd- und Htb-Datei) geschrieben werden. Hinsichtlich der grundsätzlichen Bedienung des FVV-Zylindermoduls sei auf die verfügbare Dokumentation [61] verwiesen.

Anz_Duesenloecher, d_Duese

Diese beiden Geometriegrößen sollten dem Anwender bekannt sein. Es ist ausreichend den geometrischen Düsenlochdurchmesser in der Einheit Millimeter anzugeben.

d_EV, h_EV

Auch diese beiden geometrischen Größen sollten bekannt sein. Auch sie müssen in der Einheit Millimeter angegeben werden

Z_Drall

Hier ist die Drallzahl nach Toppelmann für den zu simulierenden Betriebspunkt einzutragen. Wenn diese nicht bekannt ist und auch nicht abgeschätzt werden kann, sollte 1 eingetragen werden. Jedoch ist es dann nicht möglich, den Einfluss des Ladungsdralls auf die spezifische Turbulenz vorherzusagen. In diesem Fall muss **Eps_Drall** für jeden Betriebspunkt individuell abgestimmt werden, wenn man mehrere Betriebspunkte mit unterschiedlicher Drallzahl simulieren möchte.

A_R3_vor und E_R7

Um zu verstehen warum die Niedertemperaturverbrennung anhand von nur zwei Parametern abgestimmt wird, müssen die Reaktionen 3 bis 7 des Zheng-Mechanismus etwas abstrakter betrachtet werden. Aus den beiden Spezies Kraftstoff (F) und Sauerstoff wird über Reaktion 3 die Radikal-Spezies I_1 gebildet, siehe Abbildung 70. Der Effekt der „erlöschenden Niedertemperaturverbrennung“ wird über diese Reaktion dargestellt, da sie als einzige Reaktion der Niedertemperaturverbrennung sowohl aus einer Hin-, als auch aus einer Rückreaktion besteht, vgl. Tabelle 4-2. Unter der Annahme, dass die I_1 -Radikale bei höheren Temperaturen vollständig umgesetzt werden, ergibt sich eine Proportionalität zwischen der freigesetzten Wärmeenergie während der Niedertemperaturverbrennung und der insgesamt gebildeten Menge an I_1 -Radikalen. Die gebildete I_1 -Menge ergibt sich aus den Verläufen der Hin- und Rückreaktion von Reaktion 3. Da eine gleichzeitige Abstimmung von Hin- und Rückreaktion jedoch sehr komplex ist und im Allgemeinen nicht zu besseren Simulationsergebnissen führt, wird empfohlen nur den Koeffizienten der Hinreaktion abzustimmen (**A_R3_vor**).

Die I_1 -Radikale können im Anschluss über zwei verschiedene Reaktionspfade weiterreagieren, siehe Abbildung 70. Dabei stehen Reaktion 4 und 6 zueinander in „Konkurrenz“. Verändert man die Original Zheng-Parametrierung nicht⁹⁵ werden bei innermotorischen Randbedingungen die I_1 -Radikale ausschließlich über Reaktion 6 weiterreagieren. Es ist außerdem so, dass Reaktion 7 die Weiterreaktion zu Y-Radikalen verzögert. Sobald die Temperaturen ausreichend hoch sind, dass Y-Radikale gebildet werden, werden diese ohne weitere Verzögerung über Reaktion 5 umgesetzt, wobei es zur Wärmefreisetzung kommt. Aus dieser Betrachtung

⁹⁵ $c_A = 0$ und $c_E = 1$ bei allen Reaktionen.

tung wird ersichtlich, wieso der Brennbereich der Niedertemperaturverbrennung anhand der Aktivierungsenergie von Reaktion 7 abgestimmt wird.

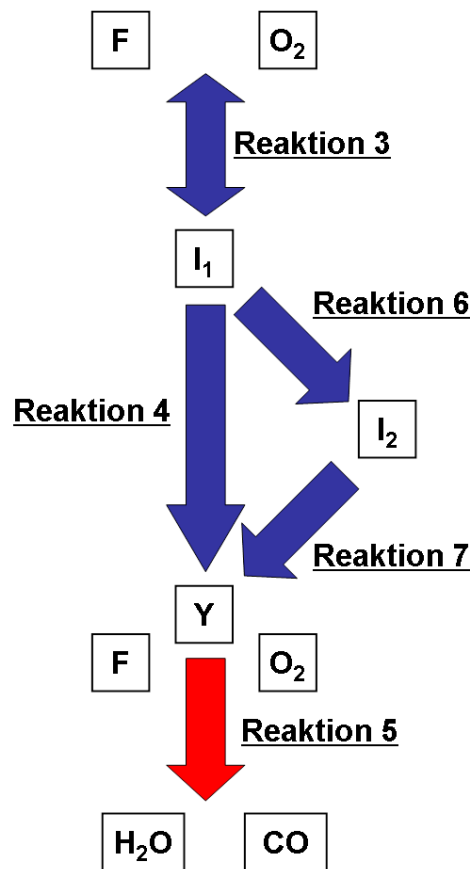


Abbildung 70: Abbildung der Niedertemperaturverbrennung über den Zheng-Mechanismus

Es hat sich gezeigt, dass es aufgrund der zwei verschiedenen Reaktionspfade verschiedene Parametrierungen gibt, die zu einer ähnlichen Wärmefreisetzung führen. Durch „fehlerhafte“ Parametrierung ist es auch möglich die Wärmefreisetzung vollständig zu unterbinden. Allgemein erfordert die Veränderung der Reaktionsparameter viel Erfahrung im Umgang mit dem Reaktionsmechanismus. Im Sinne eines anwendungsfreundlichen Modells wurde daher die Anzahl an Abstimmparametern auf die zwei nachfolgend beschriebenen beschränkt.

A_R3_vor

Je größer man diesen Parameter wählt, umso höher ist die Reaktionsrate der Hin-Reaktion 3. Da die Parametrierung der Rück-Reaktion konstant ist, werden somit in Summe mehr I_1 -Radikale gebildet und somit auch mehr Wärme während der Niedertemperaturverbrennung freigesetzt. Als Parameterwert kann jede reelle Zahl gewählt werden, vgl. Gleichung (4-37), wobei man sich im Normalfall auf Werte zwischen -1,5 und 1 beschränken sollte.

E_R7

Für diesen Parameter muss eine reelle Zahl größer als 0 gewählt werden. Je niedriger der Parameterwert, umso geringer ist die Aktivierungsenergie. Die hat zur Folge, dass bereits bei niedrigen Temperaturen vergleichsweise hohe Reaktionsraten erreicht werden können, was einen früheren Beginn der Niedertemperaturverbrennung zur Folge hat. Es bleibt allerdings anzumerken, dass aufgrund der festgelegten

Parametrierung der restlichen Reaktionen der Brennbeginn nicht beliebig nach „früh“ verschoben werden kann.

Eps_Drall

Dieser Parameter dient zur Abstimmung des Dralleinflusses auf die spezifische Turbulenz im Brennraum. Je größer der Parameter gewählt wird, umso mehr Turbulenz wird – bei konstanter Drallzahl – durch den Ladungsdrall erzeugt. Unabhängig von der Betriebsart wirkt sich eine Veränderung der spezifischen Turbulenz direkt auf die Berechnung der unvollkommenen Verbrennung, siehe Gleichungen (4-44) und (4-45), sowie auf den Brennverlauf der Hochtemperaturverbrennung aus, siehe Gleichung (4-48). Bei DI-Betrieb führt eine hohe Turbulenz zu einer entsprechend großen Beimischung von der Frischladungs- in die Mischungszone, vgl. Gleichung (4-4). Der Massenanteil der Mischungszone beeinflusst den Zündverzögerung und die Brennrate der Hochtemperaturverbrennung. Im Gegensatz zu bisherigen Implementierungen des k-ε Modells geht in diesem Verbrennungsmodell die Drallzahl direkt in die Berechnung mit ein (**Z_Drall**). Hat man bei früheren Untersuchungen bereits das Ruß-NO_x-Modell nach Kožuch verwendet und somit auch das dort implementierte k-ε Modell abgestimmt, vgl. [83] S. 98 ff, kann **Eps_Drall** bei Kenntnis der Drallzahl (**Z_Drall**) über folgende Gleichung berechnet werden⁹⁶:

$$\text{Eps_Drall} = \frac{\varepsilon_{\text{Drall,Koż.}}}{Z_{\text{Drall}}^3} \quad (5-1)$$

Eps_Drall: Abstimmparameter. Entspricht $\varepsilon_{\text{Drall}}$ in Gleichung (4-8) [-]

$\varepsilon_{\text{Drall,Koż.}}$: Parameter, der bei der Abstimmung des Ruß-NO_x Modells nach Kožuch bestimmt wurde, vgl. [83] S. 100 [-]

Eps_Diss

Mit diesem Parameter wird die Dissipation der Gemischbildungsturbulenz abgestimmt. Je größer der Parameter, umso schneller nimmt die spezifische Turbulenz im Brennraum ab. Hinsichtlich der Auswirkungen eines veränderten Turbulenzniveaus sei auf die Ausführungen in der Beschreibung von **Eps_Drall** verwiesen. Eine Anpassung von **Eps_Diss** sollte im Normalfall nicht notwendig sein, da das Turbulenzniveau über **Eps_Drall** bzw. bei DI-Betrieb auch über **Eps_Einspritz** abgestimmt werden kann.

Zuendgrenze

Durch diesen Parameter wird die obere Zündgrenze der Hochtemperaturverbrennung festgelegt. Je höher der Parameterwert, umso später beginnt die Hochtemperaturverbrennung. Die obere Zündgrenze kommt bei äußerer Gemischbildung immer zur Anwendung. Bei DI-Betrieb würde sie erst nach vollständiger Beimischung der Frischladung in die Mischungszone zur Berechnung des Zündverzögerung herangezogen werden, vgl. Abbildung 59. Dieser Durchmischungszustand kann bei physikalisch sinnvoller Parametrierung der Beimischung jedoch erst nach Brennbeginn erreicht werden und somit nicht während des Zündverzögerung. Sofern man Messungen des Motors mit äußerer Gemischbildung hat, kann der Parameter daran abgestimmt werden.

⁹⁶ Aus [83] S. 135 geht hervor, dass die Drallzahl beim OM611 ohne Einlasskanalabschaltung (EKAS) 2,6 betragen hat während $\varepsilon_{\text{Drall,Koż.}}$ 2,5 betrug. Entsprechend Gleichung (5-1) ergibt sich somit für Eps_Drall 0,142, vgl. Tabelle 5-2.

Hat man lediglich Messungen bei DI-Betrieb, ist es zunächst sinnvoll für **Zuendgrenze** den Wert des OM611-Motors zu verwenden. Der Zündverzögerung kann dann über den Parameter **f_X_Start** abgestimmt werden. Hat man Betriebspunkte mit sehr frühem Einspritzbeginn kann der Verlauf der variablen Zündgrenze überprüft und evtl. durch Anpassung des Parameters **Zuendgrenze** variiert werden.

c_CombEff_Atomizer

Dieser Parameter muss nur bei äußerer Gemischbildung abgestimmt werden, bei DI-Betrieb hat er keinen Einfluss. Je größer dieser Parameter gewählt wird, umso unvollständiger ist die Verbrennung, siehe Gleichung (4-44). Die Abstimmung erfolgt anhand des Umsetzungswirkungsgrads, der über eine DVA mit 100%-Iteration bei Berücksichtigung der Emissionen bestimmt wurde. Bei der Abstimmung ist darauf zu achten, dass der umsetzbare Anteil des homogenen Pools 1 auch tatsächlich umgesetzt wird. Dies ist gegeben, wenn die Ergebnisgröße *Comb_Eff_Sub1* in der Htb-Datei möglichst nahe bei 100 % liegt. Der qualitative Verlauf der Brennrate während der Hochtemperaturverbrennung ist dabei unerheblich. Berücksichtigen Sie, dass sich die spezifische Turbulenz im Brennraum auf den Umsetzungswirkungsgrad auswirkt.

Zur Abstimmung der homogenen Hochtemperaturverbrennung ist es sinnvoll den in der Hrd-Datei ausgegebenen Teil-Brennverlauf *dQ_B_HTC_Sub1* zu betrachten. Bei DI-Betrieb sollte man auch den Brennverlauf des Homogenen Pool 2 (*dQ_B_HTC_Sub2*) berücksichtigen.

HTC_hom_a

Über diesen Parameter wird innerhalb der steigenden Flanke des Brennverlaufs der homogenen Hochtemperaturverbrennung der Zeiteinfluss gegenüber dem Temperatureinfluss abgestimmt. Je größer der Parameter, umso stärker der Zeiteinfluss und umso steiler ist der Brennverlaufanstieg nach Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung, unabhängig von der Massenmitteltemperatur im Brennraum. Wenn der vordere Teil der Hochtemperaturverbrennung qualitativ nicht korrekt wiedergegeben wird, sollte man zunächst versuchen über **HTC_hom_a** eine Verbesserung zu erzielen. Vorzugsweise beginnt man mit Betriebspunkten mit niedriger AGR-Rate, da bei hohen AGR-Raten die Parameter **HTC_hom_Druckeinfluss** und **HTC_hom_Inerteinfluss** den Brennverlauf deutlich beeinflussen.

HTC_hom_c

Mit Hilfe dieses Parameters wird sowohl das Brennverlaufmaximum, als auch die fallende Flanke des Brennverlaufs abgestimmt. Vergrößert man den Parameterwert, nimmt das Brennverlaufmaximum zu und die fallende Flanke wird steiler. Die Brenndauer der homogenen Verbrennung nimmt folglich ab.

HTC_hom_b

Über diesen Parameter wird der Temperatureinfluss gegenüber dem Zeiteinfluss innerhalb der steigenden Flanke des Brennverlaufs der homogenen Hochtemperaturverbrennung abgestimmt. Erhöht man diesen Parameter, steigt der Brennverlauf bei einer Temperaturerhöhung stärker an. Dies führt im Allgemeinen zu einem sehr „spitzen“ Übergang zwischen steigender und fallender Flanke. Eine Anpassung des Parameters sollte nur in Einzelfällen notwendig sein.

HTC_hom_Inerteinfluss

Über diesen Parameter lässt sich einstellen, wie stark sich stöchiometrisches Restgas auf die Verbrennung auswirkt. Ein negativer Parameterwert ist nicht zulässig. Bei 0 würde Restgas die Verbrennung nicht beeinflussen, was nicht realistisch ist. Je größer man den Parameter wählt, umso stärker wird die Verbrennung bei hohen Restgasgehalten geschwächt, siehe [Abbildung 61](#). Der Parameter wird sinnvollerweise gemeinsam mit dem nächsten Parameter abgestimmt.

HTC_hom_Druckeinfluss

Dieser Parameter dient dazu, den Inertgaseinfluss abhängig vom mittleren Druckgradienten zu verändern. Wie in [Kapitel 4.4.2](#) dargestellt, ist der Inertgaseinfluss während der Kompressionsphase geringer als in der Expansionsphase. Je größer der Parameterwert, umso weniger Auswirkung hat der mittlere Druckgradient auf den Inertgaseinfluss. Ein Parameterwert unterhalb von 4000 bar/s erscheint nicht sinnvoll, da der Druckgradient sonst einen zu großen Einfluss bekommt. Zur einfachen Abstimmung von **HTC_hom_Inerteinfluss** kann es hilfreich sein, **HTC_hom_Druckeinfluss** zunächst so groß festzulegen, dass der Druckgradient keinen Einfluss hat (Empfehlung: 1000000 bar/s).

f_X_Start

Dieser Parameter muss nur bei DI-Betrieb abgestimmt werden, bei äußerer Gemischbildung hat er keinen Einfluss. Das Produkt aus **f_X_Start** und **Zuendgrenze** ergibt die untere Zündgrenze, die bei DI-Betrieb überwiegend bei der Berechnung des Zündverzugs gültig ist. Lediglich bei HCLI-Betrieb mit frühem Einspritzbeginn (ca. 55°KW v. OT und früher) kommt es zu einer Anhebung der Zündgrenze, vgl. [Abbildung 59](#). Je kleiner **f_X_Start**, umso früher beginnt die Hochtemperaturverbrennung. Es ist zu beachten, dass Veränderungen des Parameters **Zuendgrenze** bei konstantem **f_X_Start** ebenfalls zu einer Veränderung des Zündzeitpunkts bei DI-Betrieb führen. Da die Reaktionsraten zur Berechnung des Zündintegrals anhand der Reaktionszonentemperatur (entspricht bei DI-Betrieb der Mischungszonentemperatur) berechnet werden, können Veränderungen der Gemischbildungsparameter zu einer Veränderung des Zündzeitpunkts führen, die durch Anpassung von **f_X_Start** ausgeglichen werden kann.

c_Comb_Eff_DI

Ist das Äquivalent zum Parameter **c_Comb_Eff_Atomizer**, um die Berechnung des Umsatzwirkungsgrads bei DI-Betrieb abzustimmen. Da die Parameter unterschiedliche Einheiten haben, sind sie jedoch vom Zahlenwert nicht vergleichbar. Allerdings gilt auch hier, dass der Parameter größer gleich 0 gewählt werden muss. Je größer man ihn wählt, desto niedriger wird der Umsatzwirkungsgrad bei hohen Restgasgehalten.

HTC_teilhom

Mit diesem Parameter wird die teilhomogene Verbrennung abgestimmt. Diese kann nur bei HCLI-Betrieb mit Einspritzung kurz vor OT oder bei HPLI-Betrieb auftreten. Zur Abstimmung ist es hilfreich die Hrd-Ausgabegröße $dQ_B_HTC_Sub3$ zu betrachten, die den Brennverlauf des teilhomogenen Pools darstellt. Je größer man **HTC_teilhom** wählt, umso schneller läuft die Verbrennung ab. Im Allgemeinen bedatet man jedoch einen kleinen Parameterwert. Über die längere Brenndauer kann so der Ausbrand aufgrund von Sauerstoffmangel am Ende von HPLI-Betriebspunkten dargestellt werden.

Eps_Einspritz

Über diesen Parameter wird abgestimmt, wie stark die Turbulenz durch die Einspritzung erhöht wird. Die Einspritzung ist mit Abstand der größte Turbulenzerzeuger, was auch entsprechend parametrisiert werden sollte. Die drei Epsilon-Parameter sollten als Gewichtung zueinander verstanden werden, wobei im Allgemeinen gelten sollte: **Eps_Diss** > **Eps_Einspritz** > **Eps_Drall**. Möchte man die Ladungsbeimischung in die Mischungszone verstärken, sollte man dies in erster Linie über eine Erhöhung von **Beimischfaktor_2** erzielen.

Beimischfaktor_1

Über diesen Faktor wird abgestimmt, wie stark sich die Turbulenz im Brennraum auf die Ladungsbeimischung in die Mischungszone auswirkt. Bei DI-Betrieb kommt es zu dem in Abbildung 71 dargestellten charakteristischen Turbulenzverlauf. Durch die kontinuierliche Abnahme der spezifischen Turbulenzenergie nach Einspritzende, kommt es zwingenderweise zu einem degressiven Beimischverlauf nach Einspritzende, vgl. Abbildung 52.

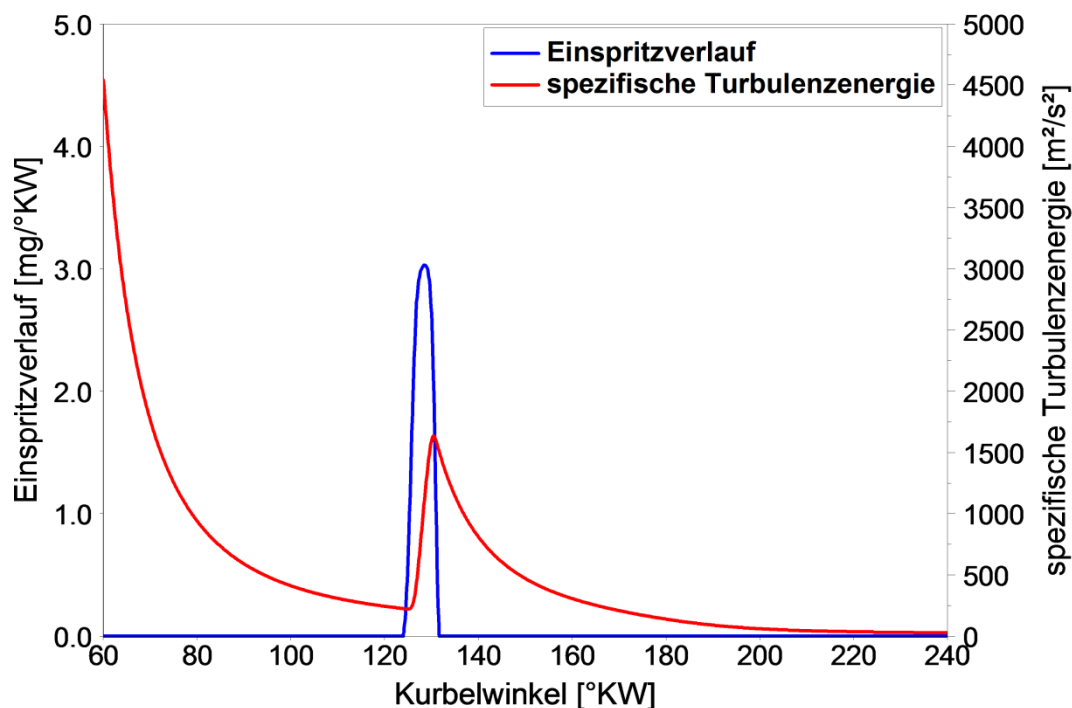


Abbildung 71: Verlauf der spezifischen Turbulenzenergie über den Hochdruckteil

Erhöht man den Parameter, kommt es bei gleicher spezifischer Turbulenz zu einer stärkeren Beimischrate. Da dem späteren Anwender meist keine 3D-Simulationen als Anhaltspunkt für die Abstimmung zur Verfügung stehen, sollte **Beimischfaktor_2** nur geringfügig verändert werden. Ohne Verbrennung⁹⁷ und bei üblichen Teillasteinspritzdrücken sollte der Massenanteil der Mischungszone, nach dem Abklingen der einspritzinduzierten Turbulenz, ungefähr zwischen 40 und 70% liegen.

⁹⁷ Dies lässt sich bei DI-Betrieb erzwingen, in dem **Zuendgrenze** auf 0.0000001 J/kg setzt. Es kommt dann unmittelbar nach Einspritzbeginn zur Zündung der Hochtemperaturverbrennung. Da die Diffusionsverbrennung jedoch nicht modelliert ist, kommt es zu keiner Wärmefreisetzung bei der Simulation.

Beimischfaktor_2

Über diesen Faktor wird die Ladungsbeimischung aufgrund der Dichteunterschiede zwischen Frischladungs- und Mischungszone abgestimmt. Bei Betriebspunkten nahe dem stöchiometrischen Luftverhältnis ist dieser Parameter von besonderer Bedeutung. Ist die Ladungsbeimischung zu langsam parametrisiert, kommt es in solchen Betriebspunkten zu einer Abschwächung der Verbrennung aufgrund von Luftmangel, vgl. Gleichung (4-48). Da es aufgrund der Kraftstoffverdampfung innerhalb der Mischungszone zu einer Temperaturabsenkung kommt, wird die Ladungsbeimischung vor Brennbeginn umso stärker abgeschwächt, je größer man **Beimischfaktor_2** wählt, siehe Abbildung 72. Andererseits kommt es nach Brennbeginn zu einer schnelleren Ladungsumsichtung in die Mischungszone. Dem Absinken der Beimischung vor Brennbeginn kann durch Erhöhen von **Beimischfaktor_1** gegengesteuert werden.

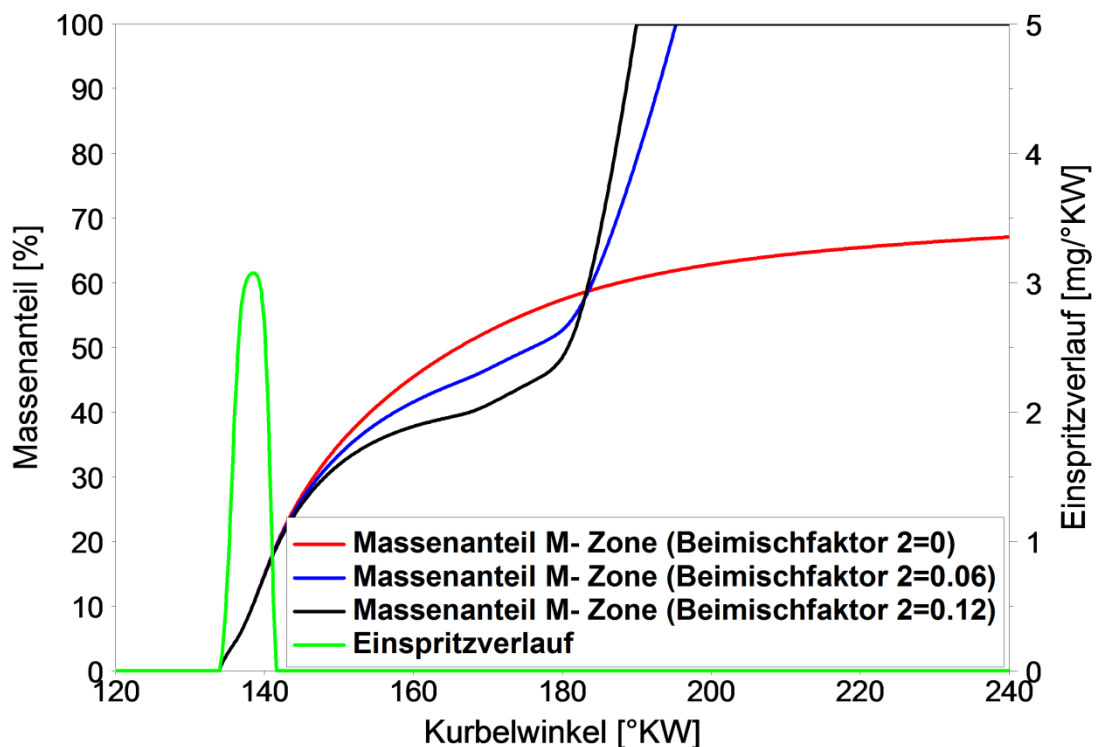


Abbildung 72: Vergleich der Ladungsbeimischung bei unterschiedlicher Parametrierung von Beimischfaktor_2

5.4 Simulationsergebnisse

Zur Entwicklung und Validierung wurden die folgenden Betriebspunkte herangezogen:

#	Betriebsart	Drehzahl [U/min]	effektiver Mittel- druck [bar]	Raildruck [bar]	Variation
1 - 5	Atomizer-HCCI	2000	< 0.4	-	AGR
6 - 10	Atomizer-HCCI	2000	1.4	-	AGR
11 - 13	Atomizer-HCCI	2000	1.4 - 2.4	-	Last bei maximaler AGR-Rate (55%) Luftmasse konstant
14 - 24	HCLI	2000	4	1200	Einspritzbeginn (56 °KW bis 1 °KW vor OT)
25 - 35	HCLI	2000	2	1200	Einspritzbeginn (56 °KW bis 1 °KW vor OT)
36 - 41	HPLI	2000	6	800	AGR (Einspritzbeginn 1,5 °KW nach OT)
42 - 47	HPLI	2000	6	1200	AGR (Einspritzbeginn 1,5 °KW nach OT)
48 - 54	HCLI/HPLI	2000	6	1200	AGR (Einspritzbeginn 1 °KW vor OT)

Tabelle 5-3: Übersicht der simulierten Betriebspunkte

Das Lastspektrum geht vom beinahe Leerlauf bis zur mittleren Teillast. Bei den Atomizer-HCCI-Betriebspunkten wird die AGR-Rate bei unterschiedlichen Lasten variiert. Im HCLI-Betrieb wurde der Einspritzbeginn deutlich variiert. Um den homogenen Betrieb darzustellen, musste dabei gleichzeitig die AGR-Rate angepasst werden. Bei den HPLI-Betriebspunkten wurde bei konstantem Einspritzbeginn, für zwei verschiedene Einspritzdrücke, erneut die AGR-Rate variiert. Die letzten sieben Betriebspunkte lassen sich je nach Sichtweise dem HCLI- oder dem HPLI-Betrieb zuordnen. Macht man es am Einspritzbeginn fest, handelt es sich um HCLI-Betriebspunkte, da vor OT mit der Einspritzung begonnen wird. Macht man es am Homogenisierungsgrad fest, handelt es sich um eine teilhomogene Verbrennung und somit um HPLI-Betriebspunkte.

Die in den nachfolgenden Unterkapiteln dargestellten Simulationen wurden alle mit einem einheitlichen Parametersatz berechnet, vgl. Tabelle 5-2.

5.4.1 Atomizer-HCCI-Betrieb

Abbildung 73 zeigt Betriebspunkt 4. Aufgrund der äußeren Gemischbildung kommt es zu einer ausgeprägten Niedertemperaturverbrennung, die das Verbrennungsmodell sehr schön wiedergibt. Der Zündverzögerung der Hochtemperaturverbrennung wird richtig berechnet, ebenso wird die Hochtemperaturverbrennung mit ihrem ausgeprägten Ausbrand korrekt dargestellt.

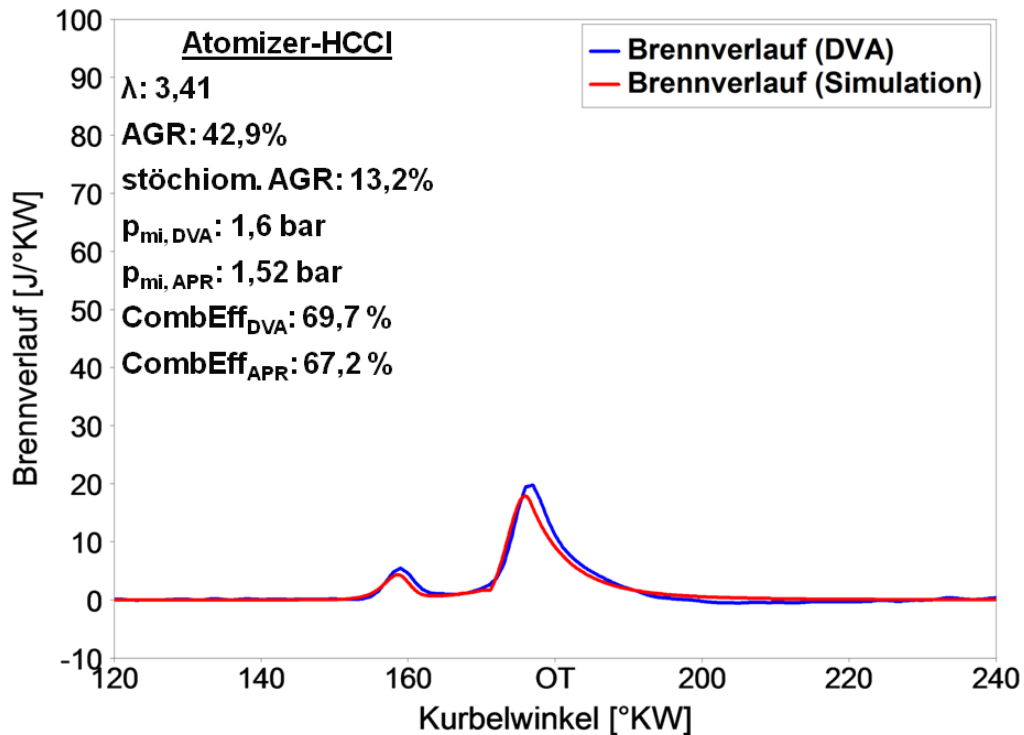


Abbildung 73: Gegenüberstellung von DVA-Brennverlauf und Simulation in Betriebspunkt 4

Bei der Prüfstandsmessung werden 30,3 % der zugeführten Kraftstoffenergie nicht in Wärme umgesetzt. Der überwiegende Teil der nicht umgesetzten Energie befindet sich in den HC- und CO-Emissionen. Bei der Simulation wurde die angesaugte Kraftstoffmasse vorgegeben. Anhand der in [Kapitel 4.4.1](#) dargestellten Gleichungen, kann die unvollkommene Verbrennung durch das Modell sehr gut vorhergesagt werden. Dadurch ist es zwar nicht möglich die HC- und CO-Emissionen in der Simulation zu berechnen, aber zumindest die in ihnen enthaltene Energie. Dies wäre bei einer zukünftigen Einbindung des Verbrennungsmodells in eine 1D-Strömungssimulation vorteilhaft, da so beispielsweise das Aufheizverhalten des Abgasnachbehandlungssystems simulierbar ist. Ohne die Abschätzung der unvollkommenen Verbrennung müsste man zur korrekten Simulation des Brennverlaufs entweder die vorgegebene Kraftstoffmasse um den in den Emissionen enthaltenen Energieanteil verringern, oder den Verbrennungswirkungsgrad vorgeben.

[Abbildung 74](#) und [Abbildung 75](#) zeigen die Brennverläufe der Betriebspunkte 6 und 10. Die DVA-Brennverläufe zeigen nur minimale Unterschiede. Das Maximum der Niedertemperaturverbrennung ist bei hoher AGR-Rate minimal niedriger. Der Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung verschiebt sich um 2°KW nach spät. Die Simulation zeigt in beiden Fällen das Auftreten einer Niedertemperaturverbrennung, wobei die Abschwächung etwas größer ausfällt, als bei der Messung. Die Verschiebung des Zündzeitpunkts der Hochtemperaturverbrennung wird sehr schön wiedergegeben. Die unvollständige Verbrennung fällt in der Simulation bei beiden Betriebspunkten ähnlich aus. Die Prüfstandsmessung ergab dagegen eine Zunahme des Umsetzungswirkungsgrades um 8% bei hoher AGR-Rate. Im Rahmen einer einzonigen Modellierung stößt man hier jedoch an Grenzen, weshalb die Abweichung von $\pm 5\%$ zu tolerieren ist.

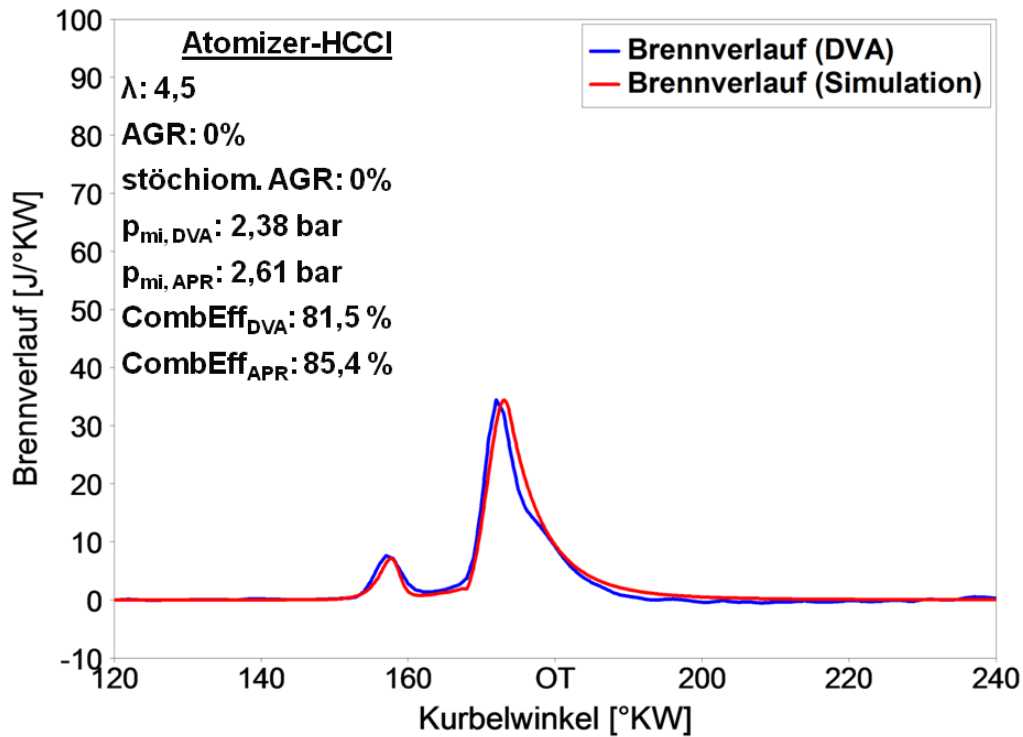


Abbildung 74: Gegenüberstellung von DVA-Brennvverlauf und Simulation in Betriebspunkt 6

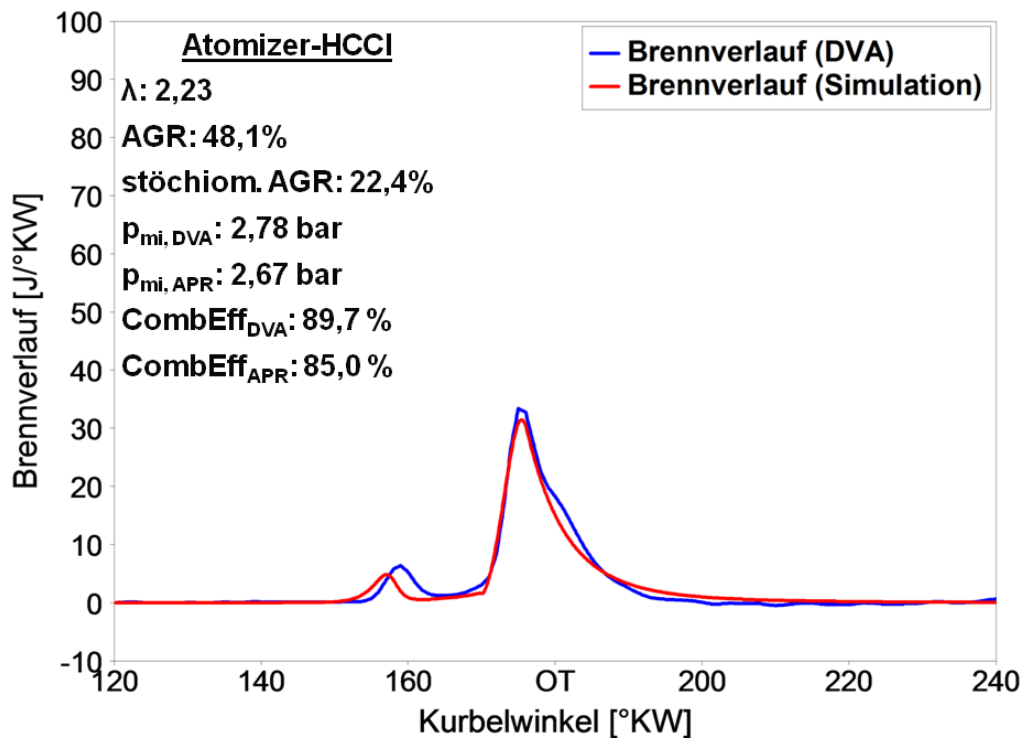


Abbildung 75: Gegenüberstellung von DVA-Brennvverlauf und Simulation in Betriebspunkt 10

5.4.2 HCLI-Betrieb

Nachfolgend sind die Randbedingungen der ersten HCLI-Messreihe aufgelistet:

#	Einspritzbeginn [°KW v. OT]	Luftverhältnis [-]	stöchiometrische AGR-Rate [%]	indizierter Mittel- druck DVA [bar]	indizierter Mittel- druck Simulation [bar]
14	1	2.40	7.2	4.99	5.12
15	6	1.71	23.3	5.11	5.31
16	11	1.29	39.9	5.21	5.52
17	16	1.16	47.6	5.33	5.62
18	21	1.08	53.8	5.21	5.45
19	26	1.03	59.0	5.04	5.16
20	31	1.01	61.3	5.00	5.00
21	36	1.01	61.2	4.84	4.97
22	41	1.03	59.7	4.80	4.95
23	46	1.09	54.9	4.60	5.00
24	56	1.11	53.9	4.69	4.66

Tabelle 5-4: Randbedingungen der Betriebspunkte der ersten HCLI-Messreihe

Bei Betriebspunkt 14 liegt der Einspritzbeginn fast im oberen Totpunkt, weshalb man ihn auch als HPLI-Betriebspunkt bezeichnen kann. Dies ist auch aus der AGR-Rate ersichtlich, die vergleichsweise niedrig ist. Im Laufe der Messreihe wurde die Einspritzung nach früh verstellt. Gleichzeitig wurde bei konstanter Gesamtladungsmasse die Frischluft durch Restgas ersetzt, was sich in der Annäherung an das stöchiometrische Luftverhältnis bei steigender stöchiometrischer AGR-Rate widerspiegelt. Nur so konnten die zum HCLI-Betrieb notwendigen Zündverzugszeiten und Druckgradienten erreicht werden. [Abbildung 76](#) zeigt die DVA-Brennverläufe einiger Betriebspunkte der Messreihe, [Abbildung 77](#) die entsprechenden Brennverläufe aus der Simulation. Man berücksichtige, dass bei diesen Übersichtsdarstellungen die Skalierung der x-Achse verändert wurde.

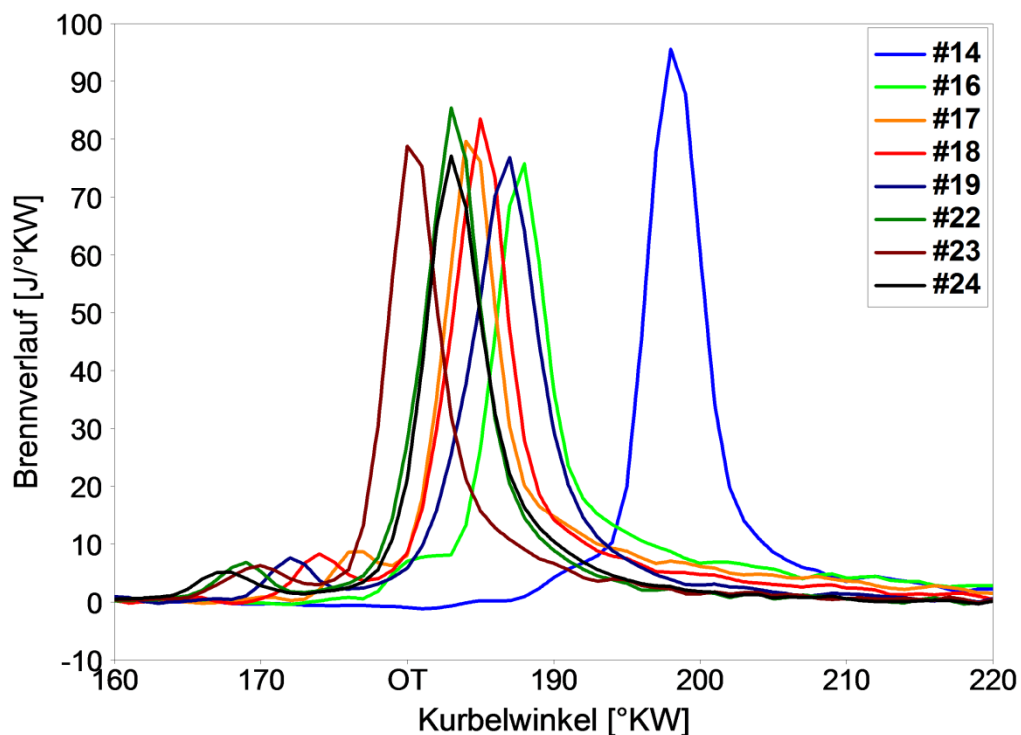


Abbildung 76: Auswahl an DVA-Brennverläufen der ersten HCLI-Messreihe

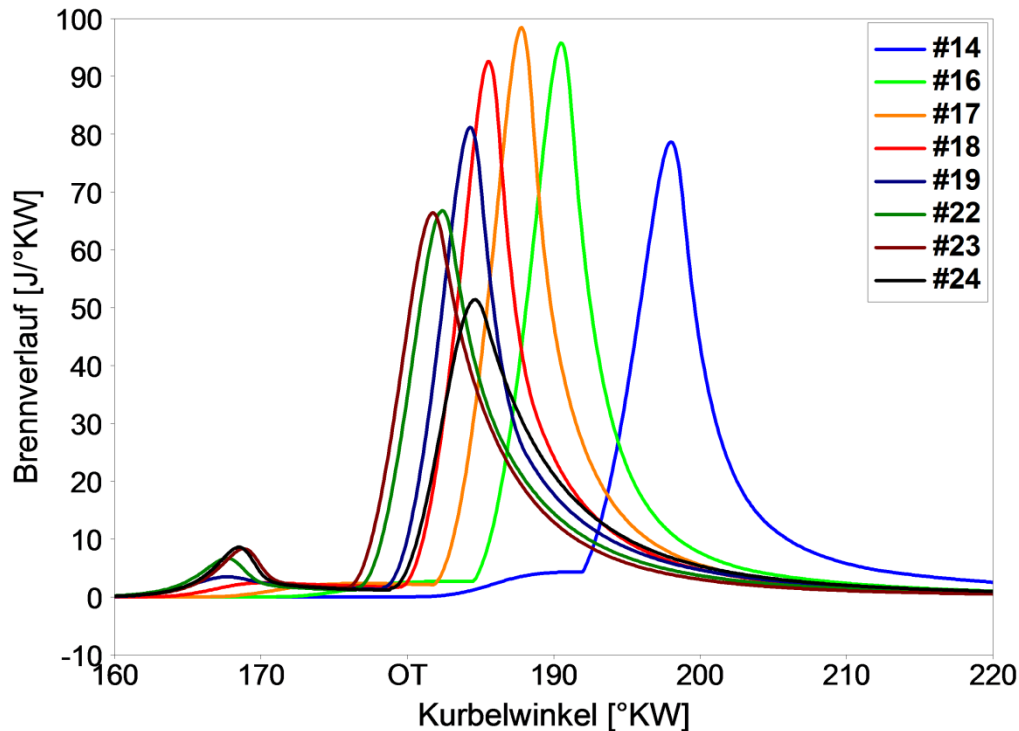


Abbildung 77: Auswahl an simulierten Brennverläufen der ersten HCLI-Messreihe

Hinsichtlich der Brennverlaufmaxima sind die DVA-Brennverläufe bis auf Betriebspunkt 14 ungefähr gleich, siehe [Abbildung 76](#). Obwohl der Einspritzbeginn bei den Betriebspunkten 18 und 19 früher liegt, als bei Betriebspunkt 17, beginnt die Hochtemperaturverbrennung später. Ursache dafür könnte eine Verzögerung des Brennbeginns durch Wandanlagerung sein. Betriebspunkt 16 und alle nachfolgenden Betriebspunkte zeigen ein zweistufiges Zündverhalten. In den Punkten 16 und 17 beginnt die Hochtemperaturverbrennung noch während der Niedertemperaturverbrennung. Dies lässt den Schluss zu, dass in Realität die Hochtemperaturverbrennung an heißen Stellen im Brennraum beginnt, während andere Bereiche des Brennraums noch so kühl sind, dass dort gleichzeitig die Niedertemperaturverbrennung stattfindet.

In der Simulation wird die Niedertemperaturverbrennung bis auf die Betriebspunkte 16 bis 18 sehr gut wiedergegeben, siehe [Abbildung 77](#). Die Zündzeitpunkte der Hochtemperaturverbrennung liegen im Allgemeinen richtig, bis auf die Betriebspunkte, bei denen es aufgrund der Wandanlagerung zu einer Verzögerung des Brennbeginns kommt. Die Brenndauer und die maximale Brennrate werden gut, aber mit einer etwas falschen Tendenz wiedergegeben. In Summe sind die simulierten Brennverläufe jedoch als gut zu bewerten, was auch am qualitativ richtig wiedergegebenen Verlauf des indizierten Mitteldrucks über der Messreihe abzulesen ist, siehe [Tabelle 5-4](#).

Nachfolgend sollen die Ursachen für die Abweichungen etwas näher betrachtet werden. Bezüglich der Niedertemperaturverbrennung ist anzumerken, dass in den Betriebspunkten 16 bis 18 die Einspritzung relativ nahe am oberen Totpunkt stattfindet. In diesen Punkten ist die Massenmitteltemperatur während der Einspritzung so hoch, dass die Reaktionsrate der Rückreaktion von Reaktion 3 bereits höher ist als die der Hinreaktion, vgl. [Tabelle 4-2](#). Auf den ersten Blick scheint es daher zielführend die Reaktionsraten des Niedertemperaturmechanismus anhand der Mischungszonentemperatur zu bestimmen. Allerdings kommt es nur bei einer entsprechend geringen

Mischungszonenmasse zu einer signifikanten Abkühlung aufgrund der Verdampfungsenthalpie, was zwei Nachteile mit sich bringt. Da viel weniger Masse erhitzt werden muss, kommt es in Folge während der Niedertemperaturverbrennung zu einem viel stärkeren Temperaturanstieg in der Mischungszone. Dadurch ergeben sich unrealistisch kurze Brenndauern, die in ihrem qualitativen Verlauf bisher bei keiner Messung beobachtet werden konnten. Als zweiter Nachteil ergibt sich eine sehr starke Abhängigkeit der Niedertemperaturverbrennung von der Beimischrate aus der Frischladungs- in die Mischungszone. Die Vorhersagbarkeit und auch die Handhabung bei der Modellabstimmung leiden unter diesem Aspekt deutlich. Von daher ist die in [Kapitel 4.3.1](#) beschriebene Berechnung der Niedertemperaturverbrennung, anhand der Massenmitteltemperatur, in dieser Modellklasse sinnvoll.

Die Wandanlagerung wird von dem Modell bisher nicht explizit berücksichtigt. Im Allgemeinen ist davon auszugehen, dass Wandanlagerung bei der Applikation aufgrund der damit verbundenen Probleme (verzögerte Verbrennung, erhöhte Emissionen, Ölabbau) vermieden wird. Die Berechnung der Strahleindringtiefe ist ein klassisches Anwendungsgebiet von 3D-CFD Simulationen. Sie erfordert detaillierte Geometrieinformationen, sowie ein Modell zur Berechnung von flüssigen und gasförmigen Strömungen. Das Modellscreening hat gezeigt, dass die Berechnung der Strahleindringtiefe im Rahmen eines phänomenologischen Modells mit Unsicherheiten behaftet ist, vgl. [Kapitel 3.2.3, S. 62ff.](#) Die Implementierung eines Modells zur Abschätzung des an die Wand angelagerten Kraftstoffs im Sinne von Thoma, vgl. S. 67, würde zusätzliche Abstimmparameter erforderlich machen, die jedoch nur belastbar über begleitende 3D-CFD-Rechnungen abgestimmt werden könnten. Im Rahmen dieser Arbeit erschien es somit ausreichend und sinnvoll, dass das Modell die Verbrennung ohne Verzögerung durch Wandanlagerung wiedergibt.

Die Abweichungen hinsichtlich Brennverlaufmaximum und Brenndauer ergeben sich durch die Überlagerung von zwei Aspekten. Zum einen der Einfluss der spezifischen Turbulenz auf die Berechnung der fallenden Flanke, vgl. Gleichung (4-48). Je länger die Zeitspanne zwischen Einspritzende und Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung ist, umso niedriger ist das Turbulenzniveau während der Verbrennung, siehe [Abbildung 78](#). Folglich ist das Brennverlaufmaximum bei frühem Einspritzbeginn niedriger, als bei OT-naher Einspritzung. Als zweites führt die Abhängigkeit des Restgaseinflusses vom mittleren Druckgradienten während der Zündverzugszeit zu einer Abschwächung der Verbrennung der Betriebspunkte 14 und 16 gegenüber Betriebspunkt 17. Sowohl in Punkt 14, als auch in Punkt 16, ist der mittlere Druckgradient niedriger, als in Punkt 17, siehe [Abbildung 78](#). Dies führt zu einem deutlich geringeren f_{AGR} -Wert, der in die Berechnung von beiden Flanken eingeht, vgl. Gleichung (4-47) und Gleichung (4-48). In Hinblick auf die Modellierung des HPLI-Betriebs sind beide Gleichungsansätze jedoch unverzichtbar.

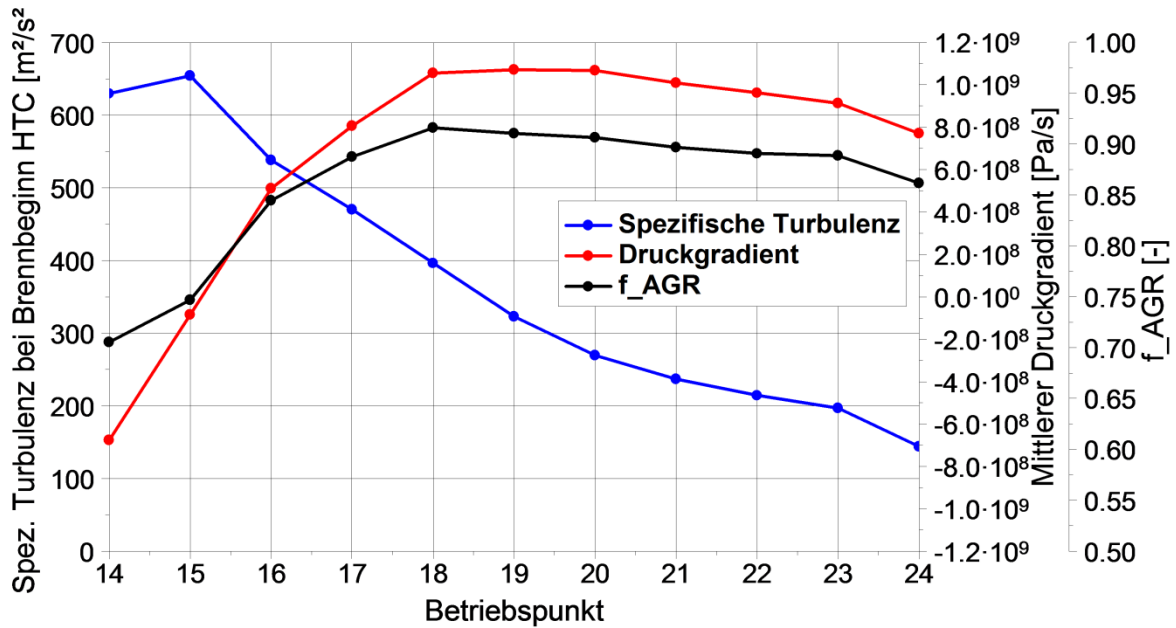


Abbildung 78: Spezifische Turbulenz bei Brennbeginn HTC, Mittlerer Druckgradient und f_{AGR} der Betriebspunkte 14 bis 24

Abbildung 79 zeigt, wie sich der simulierte Brennverlauf von Betriebspunkt 15 aus den Brennverläufen der einzelnen Verbrennungsarten zusammensetzt. Aufgrund des späten Einspritzzeitpunktes und der draus resultierenden kurzen Zündverzugszeit ist die Verbrennung nicht vollständig homogen. Während die beiden homogenen Pools relativ schnell ausbrennen, kommt es aufgrund der teilhomogenen Verbrennung zu einem sehr langen Ausbrand, der auch beim DVA-Brennverlauf zu sehen ist.

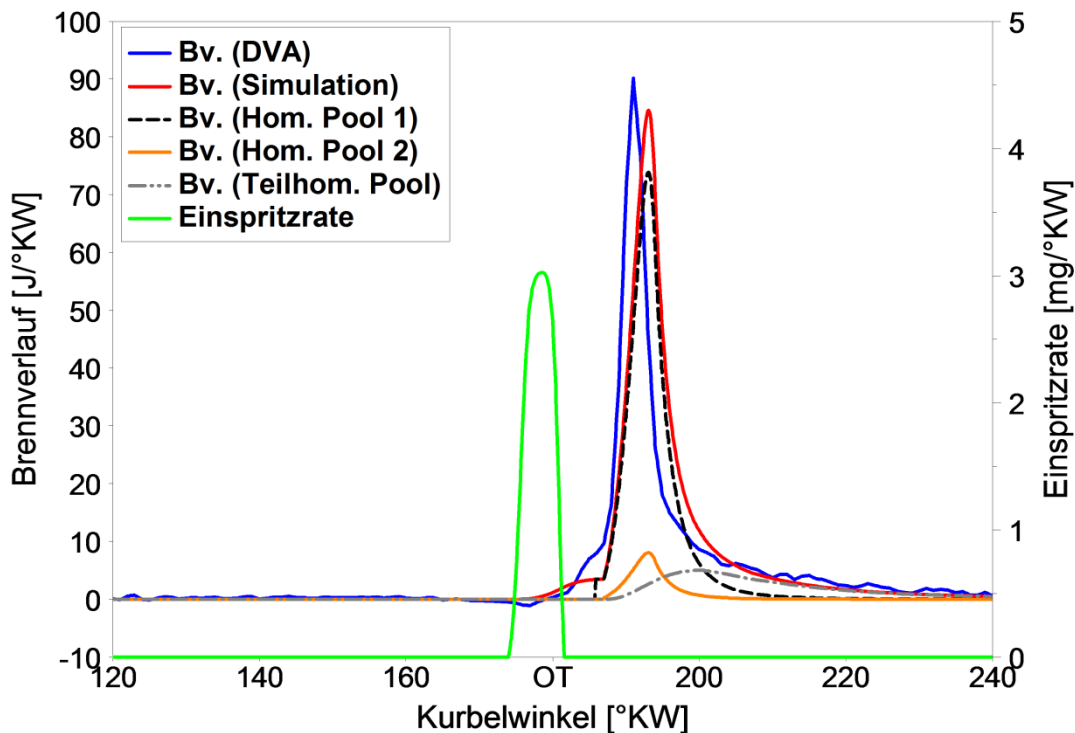


Abbildung 79: Detaillierte Darstellung des Brennverlaufs von Betriebspunkt 15

Anders ist die Situation bei dem in [Abbildung 80](#) dargestellten Betriebspunkt 23. Hier ist bei Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung bereits der gesamte Kraftstoff verdampft. Folglich sind der zweite homogene Pool sowie der teilhomogene Pool leer

und setzen auch keine Wärme frei. Beide Betriebspunkte werden durch das Verbrennungsmodell sehr gut wiedergegeben.

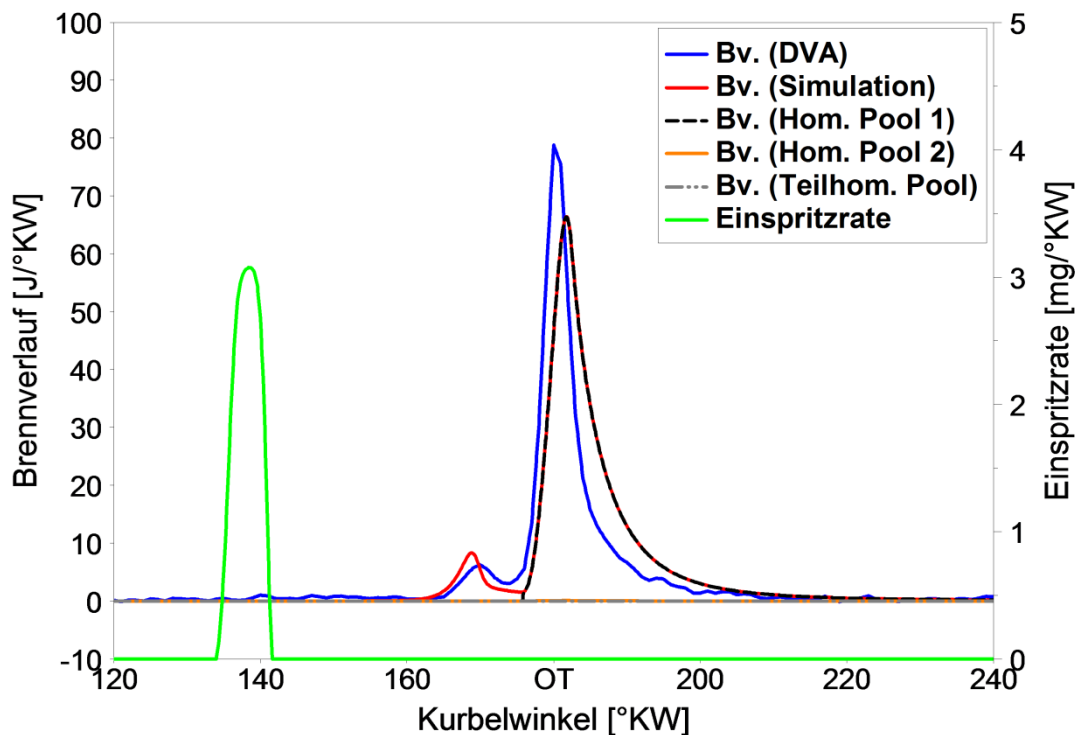


Abbildung 80: Detaillierte Darstellung des Brennverlaufs von Betriebspunkt 23

Die zweite HCLI-Messreihe ist ebenfalls eine Einspritzbeginnvariation, allerdings bei geringerer Last. Dies spiegelt sich in einem durchweg höheren Luftverhältnis und etwas niedrigeren AGR-Raten wider:

#	Einspritzbeginn [°KW v. OT]	Luftverhältnis [-]	stöchiometrische AGR-Rate [%]	indizierter Mittel- druck DVA [bar]	indizierter Mittel- druck Simulation [bar]
25	1	4.09	1.5	3.36	3.55
26	6	2.55	16.6	3.51	3.64
27	11	1.93	29.3	3.51	3.65
28	16	1.60	40.0	3.42	3.56
29	21	1.46	45.6	3.49	3.57
30	26	1.42	47.0	3.46	3.54
31	31	1.42	47.5	3.45	3.48
32	36	1.42	47.4	3.37	3.43
33	41	1.42	47.7	3.24	3.37
34	46	1.46	45.7	3.10	3.32
35	56	1.81	33.4	2.94	3.28

Tabelle 5-5: Randbedingungen der Betriebspunkte der zweiten HCLI-Messreihe

Abbildung 81 zeigt die DVA-Brennverläufe einiger Betriebspunkte der zweiten HCLI-Messreihe. Im Gegensatz zur ersten Messreihe zeigt diese eine kontinuierliche Abnahme der Brennverlaufmaxima bei Verschiebung des Einspritzbeginns nach früh. Der Einspritzbeginn kann zwischen 16 und 26 °KW variiert werden, ohne dass es zu einer deutlichen Verschiebung des Brennbeginns der Hochtemperaturverbrennung kommt. Wie schon bei der ersten HCLI-Messreihe liegt die Vermutung nahe, dass dieser Effekt eine Folge von Wandanlagerung ist. Da die Last bei der zweiten Messreihe niedriger ist, lagert sich verglichen mit der ersten Messreihe deutlich weniger

Kraftstoff an der Wand an. Folglich wird der Brennbeginn nur wenig verzögert. Verglichen damit, ist die Wandanlagerung bei der ersten HCLI-Messreihe in diesem Kurbelwinkelbereich höher und somit wird der Brennbeginn wesentlich stärker verzögert, vgl. [Abbildung 76](#). Bei allen Betriebspunkten kommt es zu einer mehr oder weniger stark ausgeprägten Niedertemperaturverbrennung.

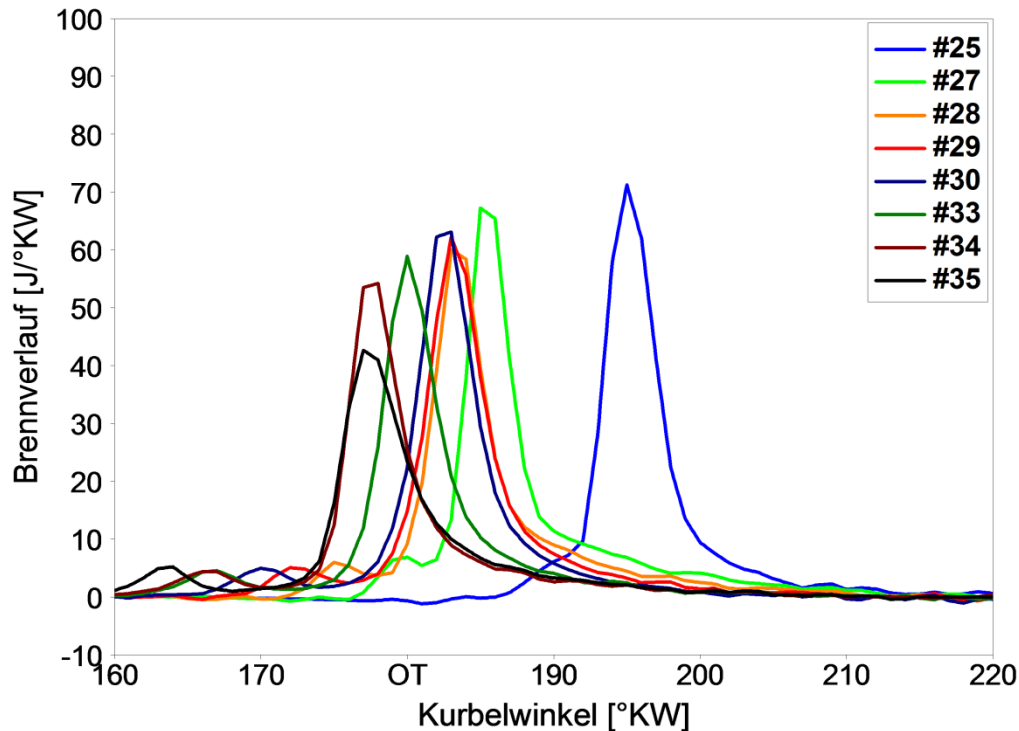


Abbildung 81: Auswahl an DVA-Brennverläufen der zweiten HCLI-Messreihe

Da die Wandanlagerung geringer ausfällt, sind die in [Abbildung 82](#) dargestellten Simulationsergebnisse noch besser als die der ersten HCLI-Messreihe. Hinsichtlich der Niedertemperaturverbrennung zeigt sich erneut, dass bei Verschiebung des Einspritzbeginns Richtung OT die Niedertemperaturverbrennung nicht ganz korrekt abgebildet werden kann. Sehr gut wird dagegen der Aspekt dargestellt, dass eine Verschiebung des Einspritzbeginns von 46 auf 56 °KW v. OT zu keinem früheren Beginn der Hochtemperaturverbrennung führt. In Summe sind die Simulationsergebnisse jedoch als sehr gut anzusehen, wie [Abbildung 83](#) exemplarisch zeigt.

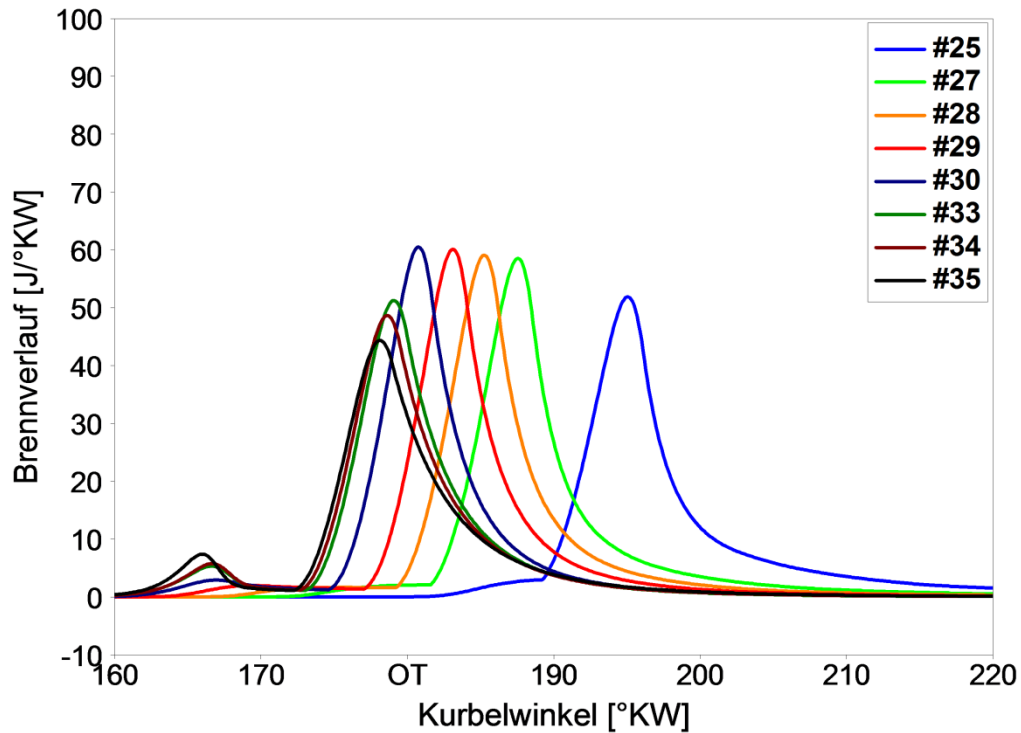


Abbildung 82: Auswahl an simulierten Brennverläufen der zweiten HCLI-Messreihe

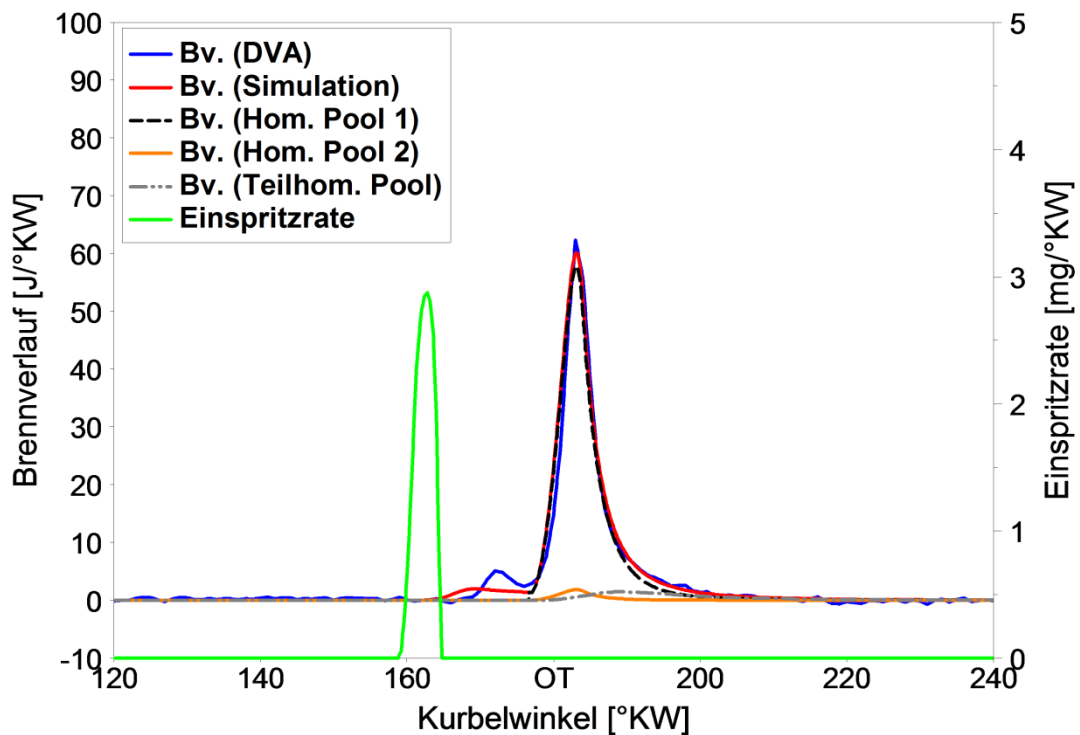


Abbildung 83: Detaillierte Darstellung des Brennverlaufs von Betriebspunkt 29

5.4.3 HPLI-Betrieb

Wie man Tabelle 5-6 entnehmen kann, werden die AGR-Raten bei den ersten beiden HPLI-Messreihen im Vergleich zum HCLI-Betrieb sehr moderat variiert. Zusätzlich ist die Aufteilung der Kraftstoffmasse auf die einzelnen Verbrennungsabschnitte während der Simulation dargestellt. Aufgrund der vergleichsweise kurzen Zündverzugs-

zeiten, enthält der teilhomogene Pool je nach Betriebspunkt zwischen 20 und 35% der eingespritzten Kraftstoffmasse.

#	Luftverhältnis [-]	stöchiometrische AGR-Rate [%]	Anteil Niedertemperaturverbrennung [%]	Anteil homogener Pool 1+2 [%]	Anteil teilhomogener Pool [%]
36	2.22	2.34	1.5	51.8	34.7
37	2.05	6.37	3.3	67.6	29.1
38	1.94	9.26	3.5	69.4	27.1
39	1.90	10.31	3.5	69.7	26.8
40	1.84	11.89	3.3	69.1	27.6
41	1.80	13.20	3.5	70.2	26.4
42	2.25	2.62	2.7	64.7	32.6
43	1.98	8.88	3.9	71.5	24.6
44	1.88	10.85	4.0	72.4	23.6
45	1.81	13.45	4.0	73.0	23.0
46	1.72	16.38	4.1	74.4	21.5
47	1.70	17.81	4.2	75.4	20.4

Tabelle 5-6: Randbedingungen der Betriebspunkte der ersten beiden HPLI-Messreihen

Abbildung 84 zeigt die DVA-Brennverläufe der ersten HPLI-Messreihe. Die Skalierung beider Diagrammachsen unterscheidet sich von den Abbildungen in den vorherigen Abschnitten. Man erkennt deutlich, dass mit steigender AGR-Rate der Zündverzug der Hochtemperaturverbrennung und die Brenndauer zunehmen und das Brennverlaufmaximum folglich kleiner wird. Aufgrund der hohen Brennraumtemperaturen während der Einspritzung, kommt es zu einer minimalen Wärmefreisetzung aber zu keiner ausgeprägten Niedertemperaturverbrennung.

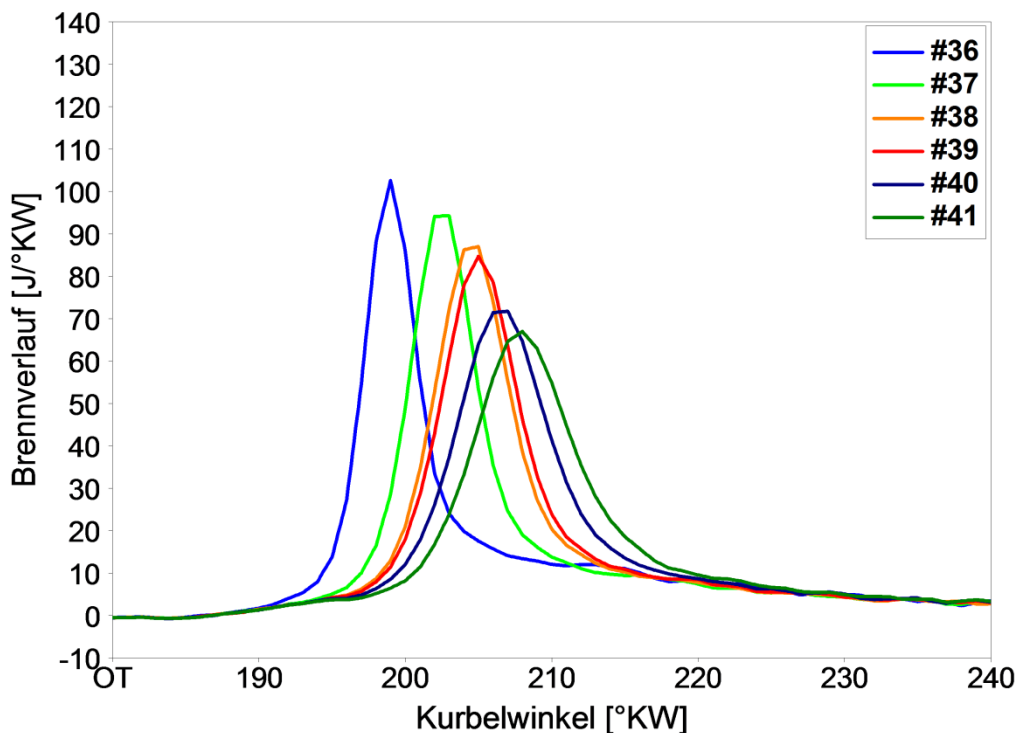


Abbildung 84: DVA-Brennverläufe der ersten HPLI-Messreihe

Wie Abbildung 85 zeigt, gibt das Verbrennungsmodell die grundsätzlichen Tendenzen korrekt wieder. Vor Brennbeginn der Hochtemperaturverbrennung wird nur sehr wenig Energie freigesetzt, vgl. Tabelle 5-6. Bei höheren AGR-Raten wird der Zünd-

verzögert zunehmend kürzer berechnet, als er in der Messung war. Es wird jedoch eindrucksvoll bewiesen, dass die – im Vergleich zum HCLI-Betrieb wesentlich stärkere – AGR-Abhängigkeit qualitativ korrekt wiedergegeben wird.

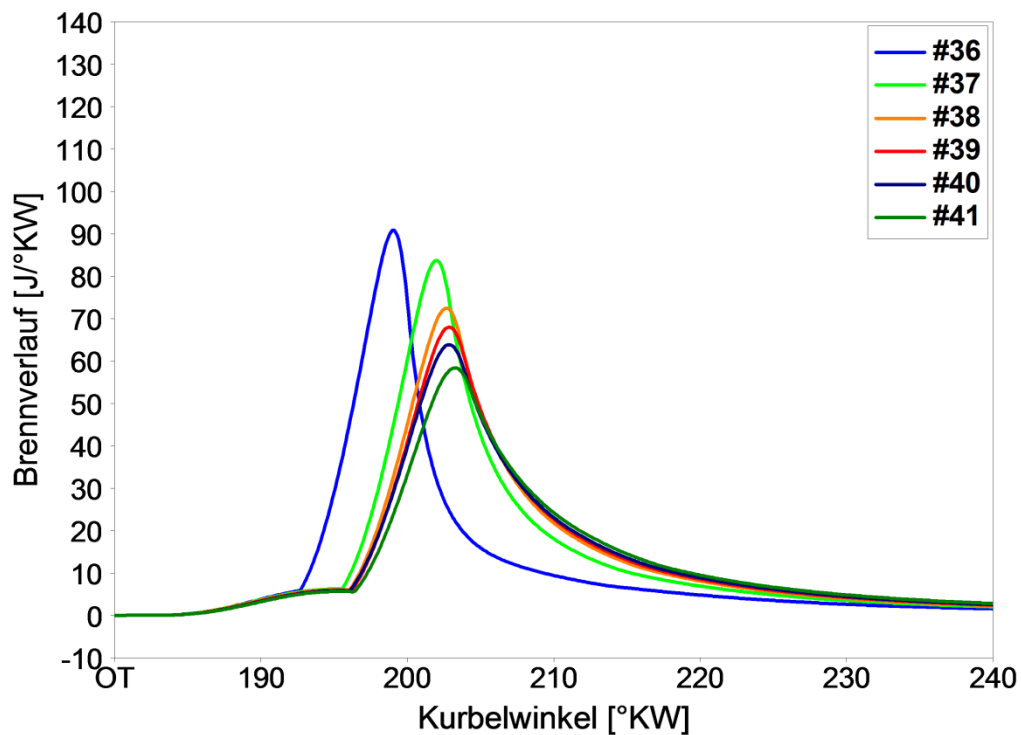


Abbildung 85: Simulierte Brennverläufe der ersten HPLI-Messreihe

Abbildung 86 zeigt die DVA-Brennverläufe der zweiten HPLI-Messreihe, bei der im Vergleich zur ersten Messreihe der Einspritzdruck erhöht wurde, vgl. Tabelle 5-3. Dadurch konnte die maximale AGR-Rate leicht erhöht werden. Im Vergleich zur ersten Messreihe fallen die Zündverzögerungen länger aus. Die Unterschiede hinsichtlich der Brenndauer und der Abnahme des Brennverlaufmaximums zwischen den einzelnen Betriebspunkten sind ebenfalls größer. Das Verbrennungsmodell kann diese Tendenzen wiedergeben, siehe Abbildung 87. Mit den größten Unsicherheiten ist erneut die Berechnung des Zündverzugs behaftet.

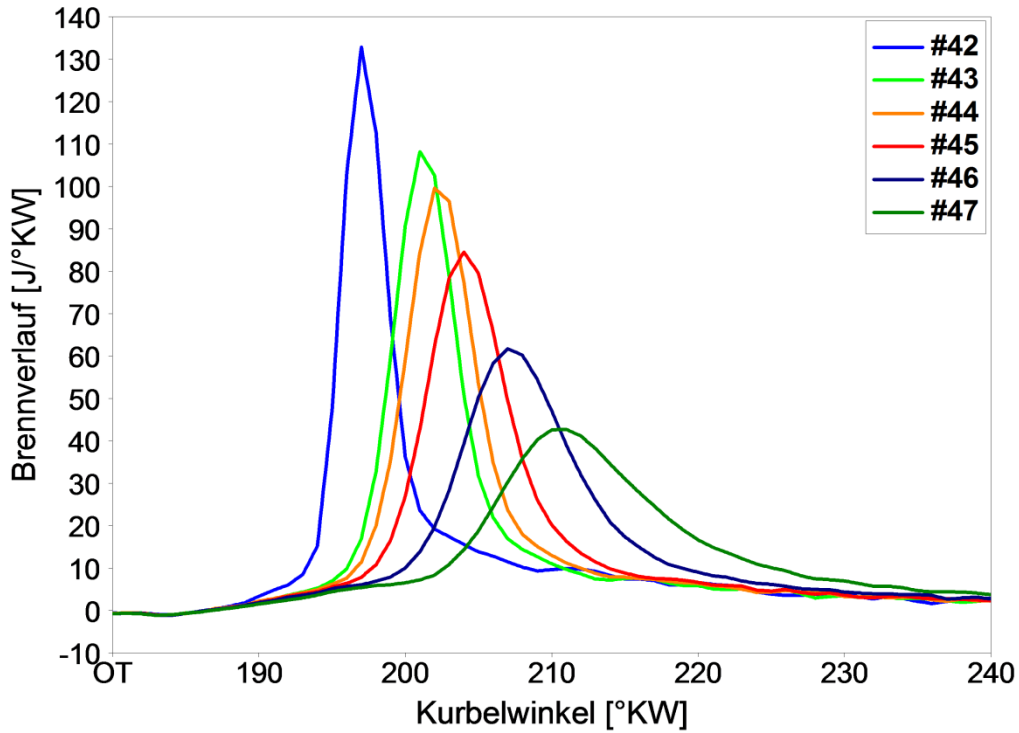


Abbildung 86: DVA-Brennverläufe der zweiten HPLI-Messreihe

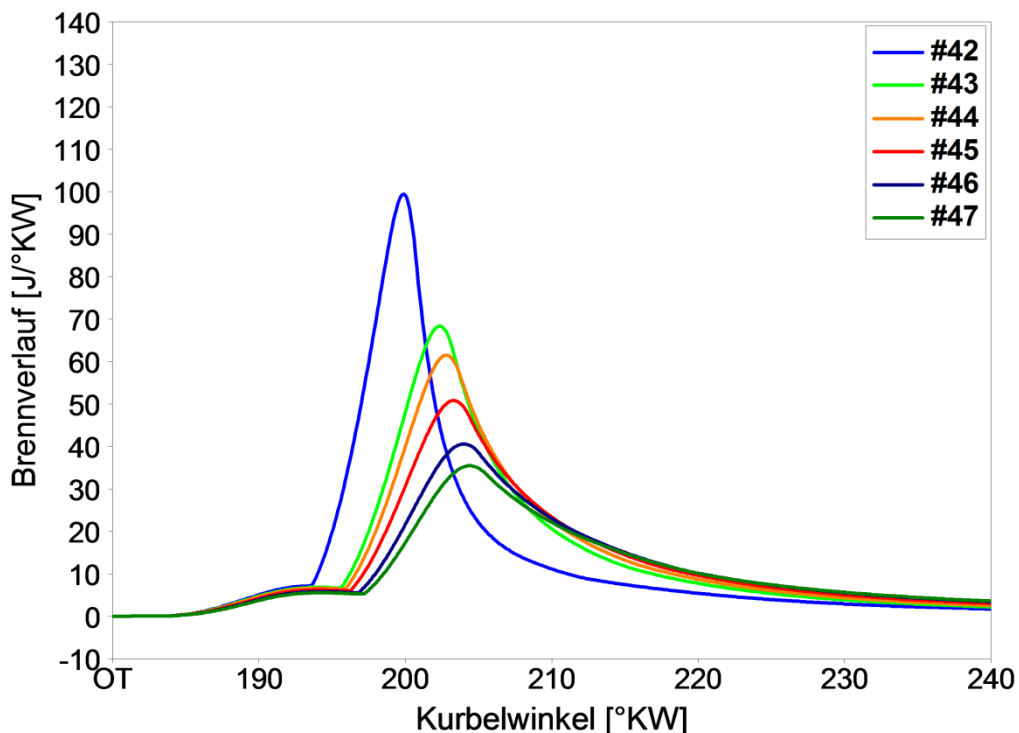


Abbildung 87: Simulierte Brennverläufe der zweiten HPLI-Messreihe

Abschließend soll die dritte HPLI-Messreihe betrachtet werden, die aufgrund des Einspritzbeginns von 1 °KW v. OT dem Übergangsbereich zwischen HCLI und HPLI zuzuordnen ist. Im Vergleich zu den ersten beiden HPLI-Messreihen konnten deutlich höhere AGR-Raten gemessen werden, siehe Tabelle 5-7. Auch der Kraftstoffanteil der über den teilhomogenen Pool umgesetzt wird ist tendenziell größer.

#	Luftverhältnis [-]	stöchiometrische AGR-Rate [%]	Anteil Niedertemperaturverbrennung [%]	Anteil homogener Pool 1+2 [%]	Anteil teilhomogener Pool [%]
48	1.73	14.30	1.4	58.2	39.7
49	1.58	19.35	2.0	65.4	32.4
50	1.53	21.33	2.1	67.0	30.6
51	1.45	24.33	2.1	68.7	28.8
52	1.37	29.14	2.3	72.0	25.2
53	1.32	30.76	1.9	70.7	27.0
54	1.32	31.35	2.1	72.5	24.8

Tabelle 5-7: Randbedingungen der Betriebspunkte der dritten HPLI-Messreihe

Bei den Messungen ist ansatzweise eine Niedertemperaturverbrennung aufgetreten, siehe [Abbildung 88](#). Ansonsten ergibt sich qualitativ ein ähnlicher Verlauf wie bei den bisherigen HPLI-Messreihen.

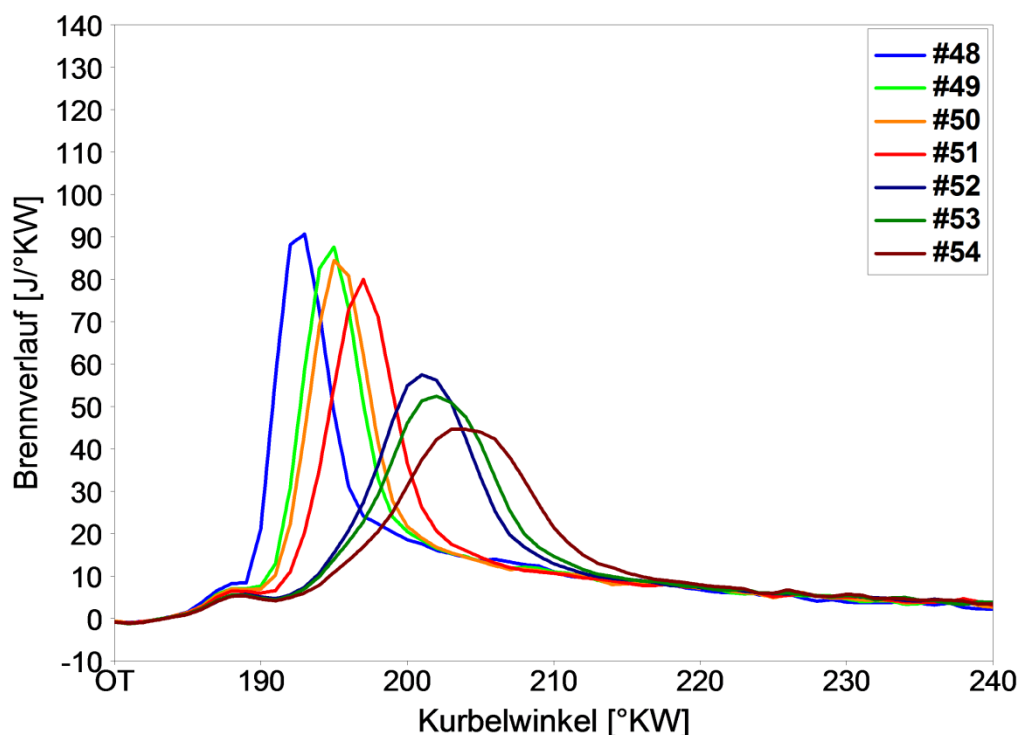


Abbildung 88: DVA-Brennverläufe der dritten HPLI-Messreihe

Bei der Simulation zeigen sich erneut leichte Defizite bei der Berechnung des Zündverzugs der Hochtemperaturverbrennung, siehe [Abbildung 89](#). Die Verbrennung wird tendenziell richtig wiedergegeben, allerdings wird die Zunahme der Brenndauer quantitativ nicht ganz richtig vorhergesagt. Hier scheint der Ansatz, den AGR-Einfluss über den Druckgradienten abzubilden, an seine Grenzen zu stoßen.

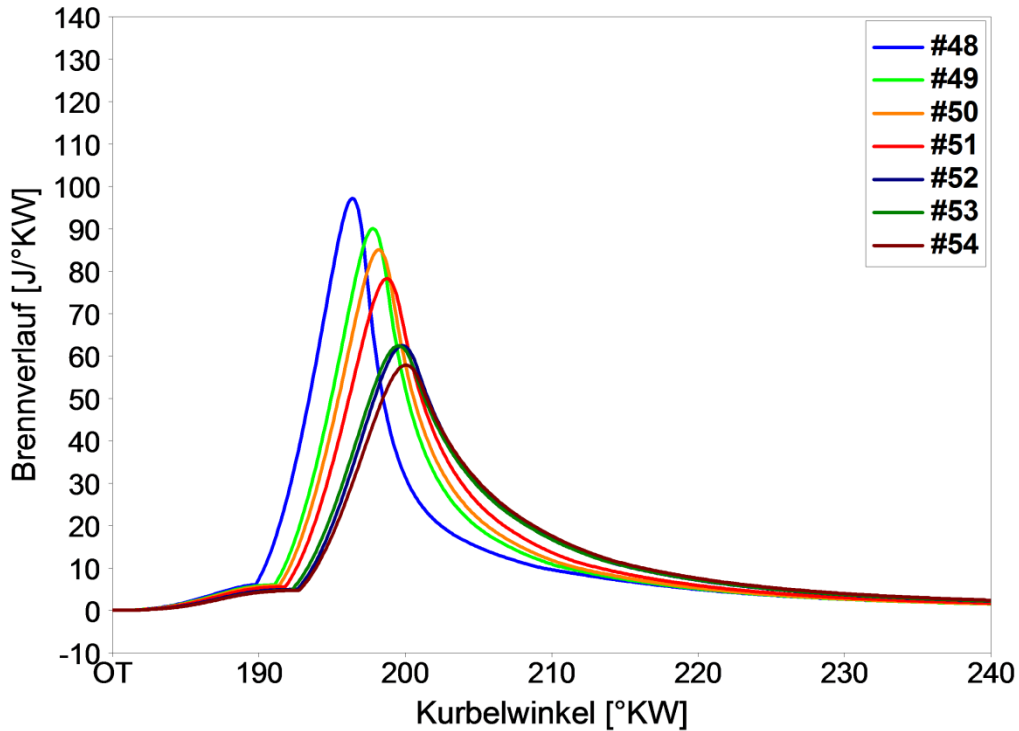


Abbildung 89: Simulierte Brennverläufe der dritten HPLI-Messreihe

5.4.4 Gesamtheitliche Betrachtung der Simulationsergebnisse

Abschließend sollen die gezeigten Messreihen gesamtheitlich betrachtet werden. Abbildung 90 zeigt, dass sich die einzelnen Messpunkte deutlich in der Last und vor allem in Umsatzwirkungsgrad unterscheiden.

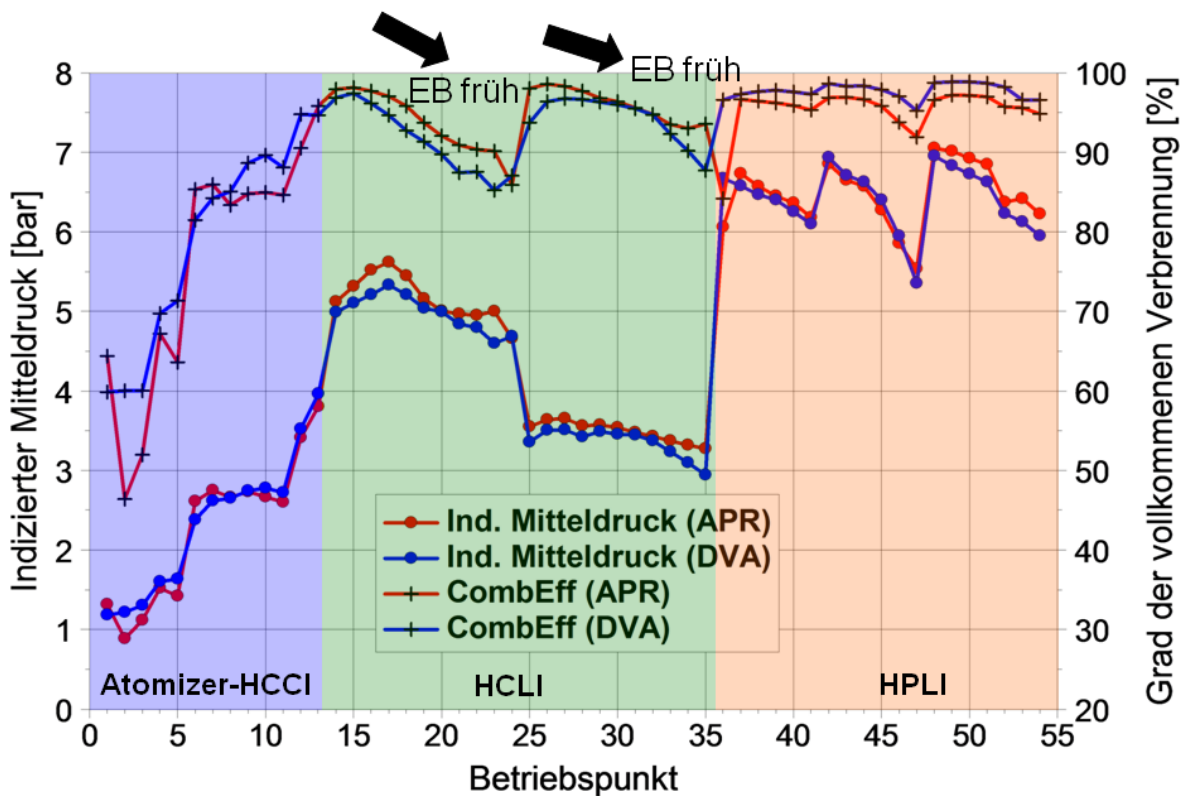


Abbildung 90: Indizierter Mitteldruck und Umsatzwirkungsgrad aller Messpunkte

Der Umsatzwirkungsgrad wird in Anbetracht des Wertebereichs von 50 bis 99% durch das Verbrennungsmodell sehr gut vorhergesagt. Bei HCLI-Betrieb wird der Umsetzungswirkungsgrad meist etwas zu hoch berechnet, während er bei HPLI-Betrieb etwas zu niedrig berechnet wird. Eine mögliche Ursache ist die Tatsache, dass der Quetschspalt während der Simulation nicht explizit betrachtet wird. Es ist denkbar, dass sich bei HCLI-Betrieb Kraftstoff in diesem befindet und somit zunächst nicht an der Verbrennung teilnehmen kann. Erst bei der Abwärtsbewegung des Kolbens wird dieser Kraftstoff freigegeben. Die HCLI-Verbrennung ist, im Gegensatz zur HPLI-Verbrennung, jedoch 20 °KW nach OT bereits weitgehend abgeschlossen, vgl. [Abbildung 77](#), [Abbildung 82](#), [Abbildung 85](#), [Abbildung 87](#) und [Abbildung 89](#), so dass der freigegebene Kraftstoff in Realität gar nicht, oder nur noch unvollständig, verbrennt. Da bei HPLI-Betrieb erst nach OT eingespritzt wird, kann somit kein Kraftstoff in den Quetschspalt gelangen, weshalb sich bessere Umsetzungswirkungsgrade ergeben.

Der indizierte Mitteldruck wird bei der Simulation gut vorhergesagt. Über das gesamte Betriebskennfeld beträgt die Abweichung bis auf fünf Ausnahmen weniger als $\pm 10\%$, siehe [Abbildung 91](#). Es ist anzumerken, dass der zu niedrig berechnete Umsatzwirkungsgrad von Betriebspunkt 36 darauf zurückzuführen ist, dass in diesem Betriebspunkt ca. 12% des eingespritzten Kraftstoffs diffusiv verbrennen müsste. Da das Verbrennungsmodell diese Diffusionsverbrennung jedoch nicht abbildet, weicht der simulierte Umsatzwirkungsgrad und in Folge auch der indizierte Mitteldruck ab.

Bei den Atomizer-HCCI Betriebspunkten sind die Abweichungen am größten. Allerdings können Messfehler und daraus resultierend fehlerhafte Randbedingungen bei der Simulation nicht gänzlich ausgeschlossen werden. Eine Plausibilitätsprüfung der Messdaten mittels Strömungssimulation war mangels Niederdruckindizierdaten nicht möglich.

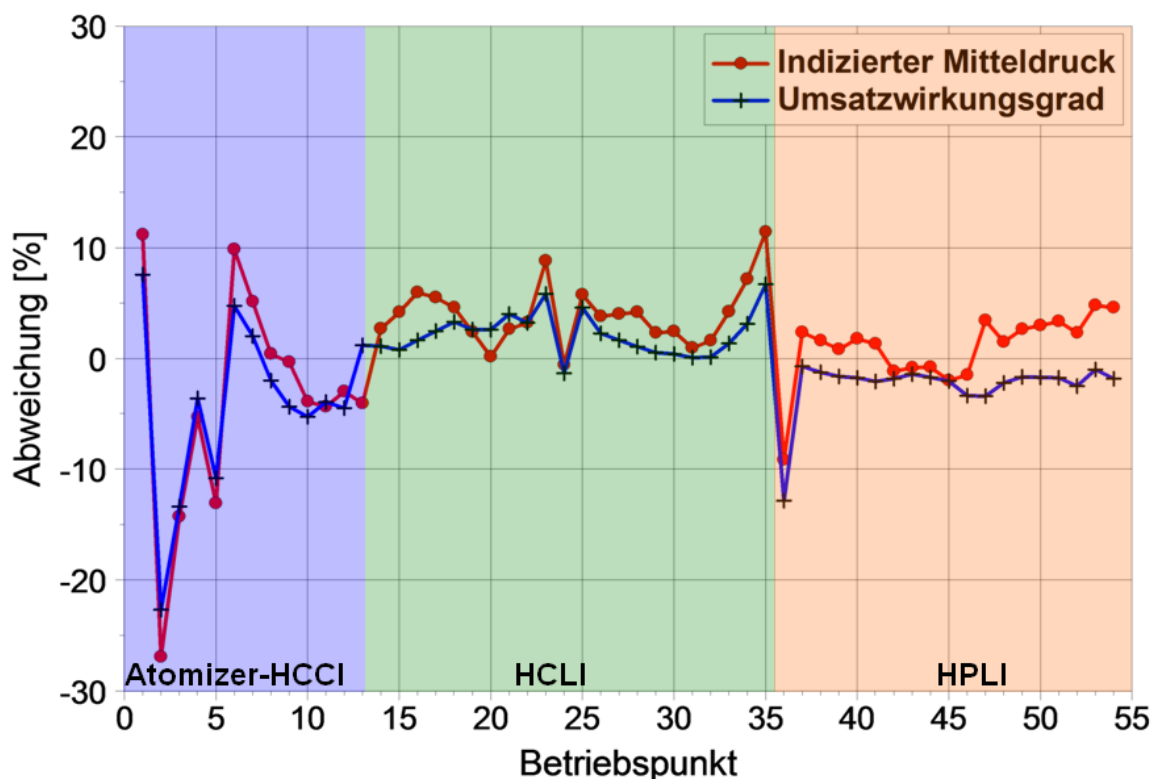


Abbildung 91: Abweichung des indizierten Mitteldrucks und des Umsatzwirkungsgrads aller Messpunkte

5 Validierung des neuen Berechnungsansatzes

In [Abbildung 92](#) sind die Abweichungen derjenigen Betriebspunkte dargestellt, deren Einspritzbeginn in Nähe des oberen Totpunkts liegt. Diese Punkte können aufgrund des teilhomogenen Charakters ihrer Verbrennung als besonders seriennah angesehen werden. Bei den vier HCLI Betriebspunkten handelt es sich um die Punkte 14, 15, 25 und 26 aus [Abbildung 91](#). Bei den Punkten 14 und 25 liegt der Einspritzbeginn 1 °KW vor OT, bei den Punkten 15 und 26 liegt er 6 °KW vor OT. Die HPLI Punkte wurden komplett übernommen.

Bei den seriennahen Betriebspunkten ist die Abweichung des indizierten Mitteldrucks zwischen DVA und Simulation wesentlich niedriger. Vernachlässigt man den fünften Punkt, der dem bereits erwähnten Betriebspunkt 36 entspricht, liegt die maximale Abweichung des indizierten Mitteldrucks unter 6%, was in Hinblick auf das Brennverfahren als sehr gut einzuschätzen ist. Die Tatsache, dass der Umsatzwirkungsgrad bei der Simulation meist etwas zu niedrig berechnet wird, der indizierte Mitteldruck jedoch meist etwas zu hoch, ist im Zusammenhang mit den Abweichungen der Brennverläufe plausibel, vgl. beispielsweise [Abbildung 88](#) und [Abbildung 89](#).

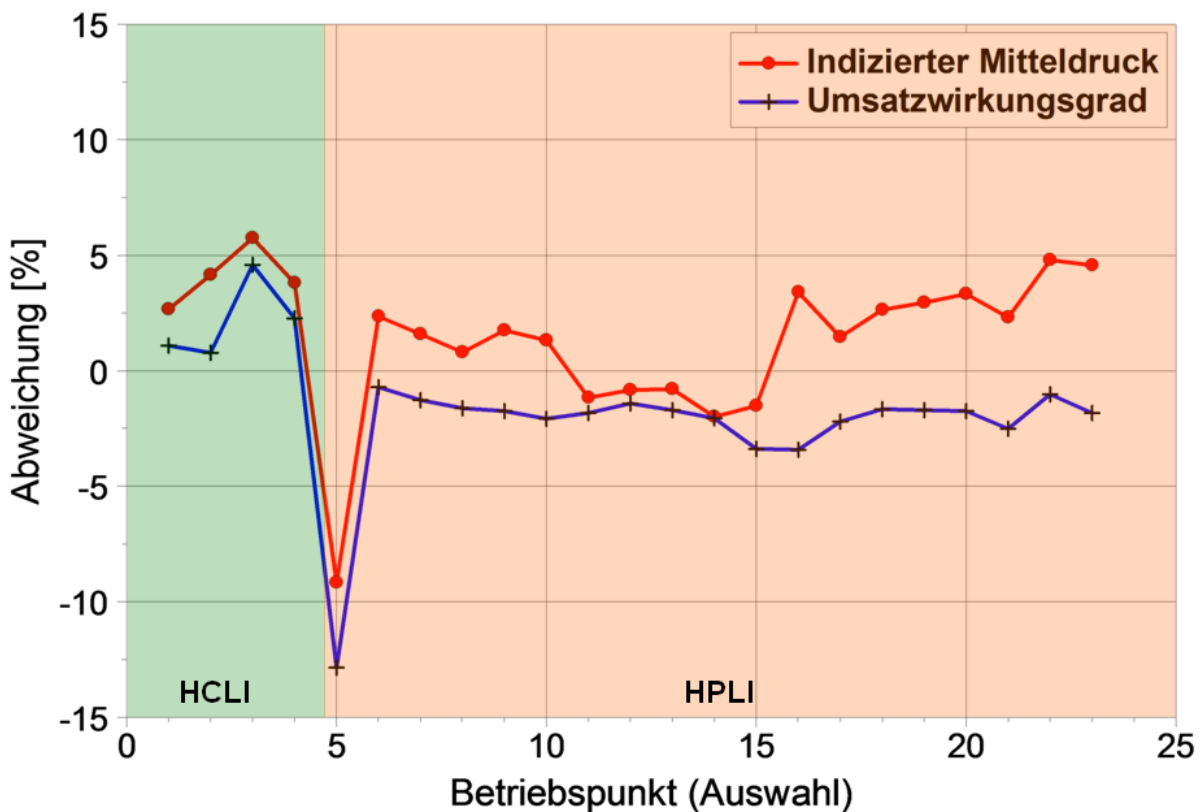


Abbildung 92: Abweichung des indizierten Mitteldrucks und des Umsatzwirkungsgrads in den seriennahen Betriebspunkten (entsprechen #14, 15, 25, 26 und 36 bis 54 in [Abbildung 91](#))

6 Zusammenfassung und Ausblick

Um beim Dieselmotor zukünftige Schadstoffemissionsgrenzwerte einhalten zu können wird, neben der Verbesserung der bereits existierenden Abgasnachbehandlungssysteme, aus Kostengründen auch nach innermotorischen Verbesserungsmöglichkeiten geforscht. Im Teillastbetrieb hat die teilhomogene Verbrennung diesbezüglich Potenzial gezeigt. Eine simulative Untersuchung der teil- oder auch vollhomogenen Dieselerverbrennung war jedoch mangels eines geeigneten phänomenologischen Verbrennungsmodells bisher nicht möglich. Diese Lücke ist durch das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Modell geschlossen worden.

Zur Abbildung der Niedertemperaturverbrennung wurde der vereinfachte Reaktionsmechanismus nach Zheng implementiert. Anders als bei der Simulation von Stoßrohrversuchen kann die Hochtemperaturverbrennung in einem Motor – selbst bei Verwendung vieler Zonen – nicht über Reaktionsmechanismen abgebildet werden. Aus diesem Grund wurde zu deren Abbildung ein phänomenologischer Ansatz entwickelt. Die Hochtemperaturverbrennung besteht je nach Einspritzzeitpunkt aus einem vollhomogenen und einem teilhomogenen Anteil. Da sich der Verlauf der homogenen Verbrennung nicht allein über die Temperaturinhomogenität im Brennraum erklären lässt, wurden selbstverstärkende und abschwächende Effekte modelliert. Beim teilhomogenen Anteil der Verbrennung liegt ein dichteres Gemisch vor, weshalb die Wechselwirkungen zwischen den Zündorten und den unverbrannten Bereichen des Gemischs zunehmen. Dies führt zu einer Art Flammenausbreitung, die jedoch wesentlich schneller abläuft als beispielsweise die ottomotorische Flammenausbreitung. Da sich dieser Teil der Verbrennung weder über Reaktionsmechanismen, noch über eine laminare Flammenausbreitung modellieren lässt, wurde ein halbempirischer Ansatz gewählt, der jedoch sehr gute Ergebnisse liefert. Die Gemischbildung bei Direkteinspritzung wird basierend auf der globalen Turbulenz im Brennraum und der Dichtdifferenz zwischen Frischladungs- und Mischungszone abgebildet. Dieser Ansatz konnte anhand zur Verfügung stehender 3D-CFD Simulationen von einigen Betriebspunkten, sowie dem Vergleich mit einer anderen Arbeit, validiert werden.

Das Verbrennungsmodell wurde in Form eines Moduls in das FVV-Zylindermodul eingebunden. Es kann alle voll- und teilhomogene Betriebsarten nach Abstimmung an den jeweiligen Motor mit einem gemeinsamen Parametersatz abbilden. Trotz reaktionskinetischer Berechnungen beträgt die Rechenzeit weniger als zwei Sekunden pro Arbeitsspiel. Dies ist ein Alleinstellungsmerkmal gegenüber bisherigen Modellen zur Abbildung der homogenen Dieselerverbrennung, deren Rechenzeit teilweise im Minutenbereich pro Arbeitsspiel liegt. Aufgrund dieser hohen Rechenzeiten sind solche Modelle zur Einbindung in 1D-Simulationswerkzeuge eher ungeeignet und haben somit einen akademischen Charakter. Im Gegensatz dazu ist das in dieser Arbeit erstellte Modell jedoch bestens für Untersuchungen vieler verschiedener Betriebspunkte geeignet und kann somit eher als Werkzeug für die Motorenentwicklung angesehen werden.

Die Verifizierung des Modells hat gezeigt, dass die wichtigsten Trends bei Veränderung der Randbedingungen wiedergegeben werden. Im Gegensatz zur konventionellen Dieselerverbrennung wird, bei voll- und teilhomogenem Betrieb teilweise bis zur Hälfte des Kraftstoffs nicht vollständig umgesetzt. Das Modell kann dies abbilden und somit nicht nur den Kraftstoffverbrauch, sondern auch die Abgasenthalpie vorhersagen. Eine bekannte Schwäche ist, dass die Wandanlagerung bisher nicht eigenständig modelliert ist. Allerdings kann erst nach intensivem Einsatz des Modells an verschiedenen Motoren abgeschätzt werden, ob es sich dabei um ein Phänomen han-

delt, dass auch allgemeingültig und einfach modelliert werden kann. Dabei ist abzuwägen, ob die eventuell mögliche Verbesserung der Vorhersagefähigkeit einen komplexeren Abstimmvorgang gerechtfertigt.

Zukünftige Anwendungsmöglichkeiten des Modells sind nicht nur die Simulation von stationären Betriebszuständen, sondern grundsätzlich auch die Berechnung transienter Vorgänge. Durch Koppelung mit Modellen zur Simulation der konventionellen Dieselerbrennung könnte so beispielsweise der Übergang zwischen inhomogenen Betrieb bei höheren Lasten und teilhomogenen Betrieb bei niedrigeren Lasten untersucht werden, was zu einer Entlastung der Motorprüfstände bei der Entwicklung von Regelstrategien führen würde.

7 Anhang

7.1 Literaturverzeichnis

- [1] Abramovich, G. N.: *the theory of turbulent jets*. Cambridge: The M.I.T. Press, 1963, Library of Congress Catalog Card Number: 63-21743
- [2] Abthoff, J.; Schuster, H.-D.; Strohmmer, E.: *Möglichkeiten der Partikelabscheidung am Pkw-Dieselmotor*. Tagungsbeitrag TAE Symposium Dieselmotorentchnik 1986, In: Fortschritt-Berichte VDI, VDI Reihe 12: Verkehrstechnik/Fahrzeugtechnik, Nr. 97, S. 339-359, Düsseldorf, VDI-Verlag, 1988, ISBN: 3-18-149712-6
- [3] Advanced Micro Devices Inc. (Hrsg.): *AMD Sempron 140*. Produktdatenblatt auf der Homepage von Advanced Micro Devices Inc., <http://products.amd.com/de-de/DesktopCPUDetail.aspx?id=585&f1=AMD+Sempron%e2%84%a2&f2=&f3=&f4=&f5=&f6=&f7=&f8=&f9=&f10=False&f11=False&f12=>, Abgerufen am 3.10.2012 um 17:00
- [4] Ahmed, S. S.; Mauß, F.; Moréac, G.; Zeuch, T.: *A comprehensive and compact n-heptane oxidation model derived using chemical lumping*. Physical Chemistry Chemical Physics, No.9, S. 1107-1126, 2007
- [5] Akihama, K.; Takatori, Y.; Inagaki, K.; Sasaki, S.; Dean, A. M.: *Mechanism of the Smokeless Rich Diesel Combustion by Reducing Temperature*. SAE-Paper 2001-01-0655, 2001
- [6] Atkins, P. W.; de Paula, J.: *Kurzlehrbuch physikalische Chemie*. 4. Auflage, Weinheim: Wiley-VCH, 2008, ISBN: 978-3-527-31807-0
- [7] Austen, A. E. W.; Lyn, W. T.: *Some Steps Toward Calculation Diesel Engine Behavior*. SAE-Paper 409A, 1961
- [8] Baehr, H. D.; Kabelac, S.: *Thermodynamik*. 14. Auflage, Berlin: Springer Verlag, 2009, ISBN: 978-3-642-00555-8
- [9] Barba, C.; Burkhardt, C.; Boulouchos, K.; Bargende, M.: *A Phenomenological Combustion Model for Heat Release Rate Prediction in High-Speed DI Diesel Engines with Common Rail Injection*. SAE-Paper 2000-01-2933, 2000
- [10] Barba, C.: *Erarbeitung von Verbrennungskennwerten aus Indizierdaten zur verbesserten Prognose und rechnerischen Simulation des Verbrennungsablaufes bei Pkw-DE-Dieselmotoren mit Common-Rail-Einspritzung*. Zürich, ETH, Dissertation, 2001, http://www.lav.ethz.ch/publications/thesis/CB_thesis.pdf

- [11] Bargende, M.: *Ein Gleichungsansatz zur Berechnung der instationären Wandwärmeverluste im Hochdruckteil von Ottomotoren*. Darmstadt, Technische Hochschule, Fachbereich Maschinenbau, Dissertation, 1991
- [12] Bauder, R.: *Die Zukunft der Dieselmotoren-Technologie*. In: Supplement zu MTZ 59 (1998), Nr. 7/8, S. XI-XVIII
- [13] Bauer, C.: *3d-Simulation von Diesel-HCCI-Brennverfahren*. Tagung „Simulation der motorischen Verbrennung“, Haus der Technik – Essen, 2004
- [14] Bazari, Z.: *A DI Diesel Combustion and Emission Predictive Capability for Use in Cycle Simulation*. SAE-Paper 920462, 1992
- [15] Bechmann, O.; Carli, S.; Engeler, W.; Garbe, T.; Lach, G.; Ryan, L.; Schindler, K.-P.: *Partikelemission und -messung aus Sicht des Anwenders: heute und morgen*. 23. Internationales Wiener Motorensymposium, 2002
- [16] Beck, S.; Schmidt, D.; Bargende, M.: *Einfluss des Homogenisierungsgrades auf das Selbstzündverhalte unterschiedlicher Kraftstoffe*. 6. MTZ-Fachtagung – Der Antrieb von morgen, 2011
- [17] Benzinpreis.de (Hrsg.): *Preisfixing*. Benzinpreis.de - Die aktuellen Benzinpreise: Vorhersagen, Statistiken, Daten, Tipps, <http://benzinpreis.de/statistik.phtml>, Abgerufen am 29.10.2011 um 17:07
- [18] Blechstein, A.; Brauer, M.; Buchwald, R.; Sommer, A.; Kahrstedt, J.; Schutting, E.: *Einspritzstrategien zur Realisierung der homogenen Verbrennung am Pkw-Dieselmotor*. 9. Tagung „Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors“, 2003
- [19] BMW (Hrsg.): *BMW Deutschland*. Homepage der BMW AG, <http://www.bmw.de/de/de/index.html>, Abgerufen am 28.10.2011 zwischen 9:30 Uhr und 10:30 Uhr
- [20] Borchsenius, F.; Stegemann, D.; Gebhardt, X.; Jagani, J.; Lyubar, A.: *Simulation von Diesel-Common-Rail-Einspritzsystemen*. In: MTZ 71 (2010), Nr. 6, S. 436-441
- [21] Borgnakke, C.; Arpaci, V. S.; Tabaczynski, R. J.: *A Model for the Instantaneous Heat Transfer and Turbulence in a Spark Ignition Engine*. SAE-Paper 800287, 1980
- [22] Bosch (Hrsg.): *Amortisation SCR-Systemkosten*. Homepage der Robert Bosch GmbH, http://aa.bosch.de/advastaboschaa/Product.jsp?prod_id=397&ccat_id=149&language=de-DE&publication=1, Abgerufen am 30.6.2011 um 14:00 Uhr

- [23] Bosch (Hrsg.): *Common Rail Systeme CRS3 mit 1800 bis 2000 bar und Piezo-Injektoren*. Datenblatt Robert Bosch GmbH, 2 920 00P 0KR-C/CCA-201009-De, 2010, Verfügbar unter: www.bosch-kraftfahrzeugtechnik.de/de/antriebssysteme/dieselcommonrailsystem/kraftstoffeinspritzung_6/commonraileinspritzung.asp
- [24] Bosch (Hrsg.): *Kraftfahrtechnisches Taschenbuch*. 25. Auflage, Wiesbaden: Vieweg, 2003, ISBN: 3-528-23876-3
- [25] Brüne, H.-J.; Honeder, J.; Raschl, P.; Schinnerl, M.; Tangemann, R.: *Diesel-Emissionstechniken von BMW für künftige weltweite Abgasnormen*. In: MTZ 70 (2009), Nr. 3, S. 210-216
- [26] Buschmann, G.; Basse, N.; Mylidakis, E.; Matz, M.; Tietze, T.: *NO_x, CO₂- und Geräuschkinderung für Pkw-Dieselmotoren - Realisierung von unterschiedlichen Verbrennungsabläufen in einem Motorkennfeld*. 11. Tagung „Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors“, 2007
- [27] Chiatti, G.; Chiavola, O.; Palmieri, F.: *Phenomenological Multi-Step Modeling of Diesel Injection and Combustion*. SAE-Paper 2009-24-0007, 2009
- [28] Chiodi, M.: *An innovative 3D-CFD-Approach towards Virtual Development of Internal Combustion Engines*. Stuttgart, Universität, Fakultät Konstruktions-, Produktions- und Fahrzeugtechnik, Dissertation, 2010
- [29] Chmela, F.; Orthaber, G.; Schuster, W.: *Die Vorausberechnung des Brennverlaufs von Dieselmotoren mit direkter Einspritzung auf der Basis des Einspritzverlaufs*. In: MTZ 59 (1998), Nr. 7/8, S. 484-492
- [30] Chmela, F.; Piock, W. F.; Sams, T.; Pirker, G.: *Potenzial alternativer Verbrennungsverfahren für Otto- und Dieselmotoren*. 9. Tagung „Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors“, 2003
- [31] Chmela, F.; Engelmayer, M.; Pirker, G.; Wimmer, A.: *Prediction of turbulence controlled combustion in diesel engines*. Thiesel Conference on Thermo- and Fluid Dynamic Processes in Diesel Engines, 2004
- [32] Chmela, F.; Dimitrov, D.; Pirker, G.; Wimmer, A.: *Konsistente Methodik zur Vorausberechnung der Verbrennung in Kolbenkraftmaschinen*. In: MTZ 67 (2006), Nr. 6, S. 468-475

- [33] Chmela, F. G.; Pirker, G. H.; Wimmer, A.: *Zero-dimensional ROHR simulation for DI diesel engines – A generic approach*. In: Energy Conversion and Management 48 (2007), Nr.11, S. 2942–2950,
www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890407002051
- [34] Cui, Y.; Deng, K.; Wu, J.: *A direct injection diesel combustion model for use in transient condition analysis*. In: Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering, Volume 215 (2001), Number 9, S. 995-1004
- [35] Curran, H. J.; Gaffuri, P.; Pitz, W. J.; Westbrook, C. K.: *A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation*. In: Combustion and Flame 114 (1998), S. 149-177
- [36] c't (Red.): *Wie viele GFlops liefert mein PC?*. In: c't (15.08.2011), Heft 18, S. 168-169
- [37] Daimler AG (Hrsg.): *Die neue BlueTec-Dieselseltechnologie für Euro 4 / Euro 5*. Pressemappe Daimler AG, Wörth, 2004, www.media.daimler.com
- [38] Daimler AG: *Daimler-Benz trifft Systementscheidung für Partikelfilteranlage*. In: ATZ 91 (1989), Nr. 3, S. 132-134
- [39] De Neef, A. T.: *Untersuchung der Voreinspritzung am schnellaufenden, direkteingespritzten Dieselmotor*. Zürich, ETH, Dissertation, 1987
- [40] Dent, J. C.: *A Basis for the Comparison of Various Experimental Methods for Studying Spray Penetration*. SAE-Paper 710571, 1971
- [41] Dent, J. C.; Mehta, P. S.: *Phenomenological Combustion Model for a Quiescent Chamber Diesel Engine*. SAE-Paper 811235, 1981
- [42] Dulbecco, A.; Lafossas, F.-A.; Mauviot, G.; Poinot, T. J.: *A New 0D Diesel HCCI Combustion Model Derived from a 3D CFD Approach with Detailed Tabulated Chemistry*. In: Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP, Volume 64 (2009), No. 3, S. 259-284,
http://ogst.ifpenergiesnouvelles.fr/index.php?option=com_article&access=doi&doi=10.2516/ogst/2008051&Itemid=129
- [43] Dürnholz, M.; Endres, H.; Schöppe, D.: *Maßnahmen zur Verminderung der Schadstoffemissionen bei Nutzfahrzeugmotoren*. In: MTZ 53 (1992), Nr. 9, S. 378-384
- [44] Dworschak, J.; Neuhauser, W.; Rechberger, E.; Stastny, J.: *Der neue Sechszylinder-Dieselmotor von BMW*. In: MTZ 70 (2009), Nr. 2, S. 108-115

- [45] Eichlseder, H.; Klüting, M.; Piock, W. F.: *Grundlagen und Technologien des Ottomotors*. 1. Auflage, Berlin: Springer Verlag, 2007, ISBN: 978-3-211-25744-6
- [46] Eifler, G.: *Effiziente Applikation von Partikelfiltern mittels synthetischem Russ*. In: MTZ 72 (2011), Nr. 11, S. 882-887
- [47] Eilts, P.: *Modell zur Vorausberechnung des Brenngesetzes mittelschnelllaufender Dieselmotoren*. In: MTZ 54 (1993), Nr. 3, S. 134-140
- [48] Fasolo, B.; Hardy, J.-P.; Leroy, K.: *Abgas-Kraftstoffeinspritzsystem für effiziente DPF-Regeneration*. In: MTZ 70 (2009), Nr. 7-8, S. 554-561
- [49] Felchner, B.; Bösswetter, A.; Eder, M.; Frambourg, M.: *CO₂-neutrale Partikelreduzierung im Dieselpartikelfilter*. In: MTZ 71 (2010), Nr. 5, S. 354-359
- [50] Figer, G.; Pirker, G.; Wimmer, A.; Jauk, T.; Eichlseder, H.; Fuchs, C.; Schutting, E.: *Analyse von HCCI-Brennverfahren beim direkteinspritzenden Dieselmotor*. 9. Tagung „Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors“, 2003
- [51] Fortnagel, M.: *Der aktuelle Entwicklungsstand der Mercedes-Benz Dieselmotoren für Personenwagen und leichte Nutzfahrzeuge*. Tagungsbeitrag TAE Symposium Dieselmotorentchnik 1991, In: Fortschritt-Berichte VDI, VDI Reihe 12: Verkehrstechnik/Fahrzeugtechnik, Nr. 172, S. 22-43, Düsseldorf, VDI-Verlag, 1992, ISBN: 3-18-147212-3
- [52] Fortnagel, M.; Moser, P.: *Die Mercedes-Benz Dieselmotorenbaureihe für Personenkraftwagen mit Abgasrückführung und Oxidationskatalysator*. In: MTZ 53 (1992), Nr. 1, S. 14-20
- [53] Fortnagel, M.; Moser, P.; Pütz, W.: *Die neuen Vierventil-Dieselmotoren von Mercedes-Benz Entwicklung von Verbrennung und Abgasreinigungssystem*. In: MTZ 54 (1993), Nr. 9, S. 392-405
- [54] Frank, W.; Hüthwohl, G.; Maurer, B.: *SCR-Technologie für Nutzfahrzeuge*. In: MTZ 65 (2004), Nr. 9, S. 632-639
- [55] Friedrich, C.; Inclán, T.; Wilmes, B.; Brichzin, V.; Eller, M.: *Dieselveerdampfer zur Partikelfilterregeneration*. In: MTZ 70 (2009), Nr. 5, S. 398-406
- [56] Gamma Technologies (Hrsg.): *GT-Suite Engine Performance Application Manual*. Beilage zur Software GT-Suite Version 7.0, Westmont: Gamma Technologies, 2009

- [57] Ganser, M.: *Akkumuliereinspritzung: theoretische und experimentelle Untersuchung eines elektronisch gesteuerten Dieseleinspritzsystems für Personenwagenmotoren*. Zürich, Eidgenössische Technische Hochschule, Dissertation, 1984
- [58] Gesundheitsamt Baden-Württemberg (Hrsg.): *Ozon - gesundheitliche Auswirkungen*. Information des Öffentlichen Gesundheitsdienstes des Gesundheitsamts Baden-Württemberg, www.gesundheitsamt-bw.de/oegd/Gesundheitsthemen/UmweltGesundheit/ChemischeRisiken/Seiten/Ozon.aspx, 2011
- [59] Grill, M.: *Objektorientierte Prozessrechnung von Verbrennungsmotoren*. Stuttgart, Universität, Fakultät Maschinenbau, Dissertation, 2006, http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2006/2725/pdf/Diss_Grill.pdf
- [60] Grill, M.: *Zylindermodul*. Abschlussbericht zum FVV-Vorhaben 869, Heft 866-1, Frankfurt am Main: Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen, 2008
- [61] Grill, M.: *FVV-Zylindermodul Tutorial und Referenzhandbuch*. Beilage zur Software FVV-Zylindermodul Version 1.1, Frankfurt am Main: Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen, 2009
- [62] Grill, M.; Bargende, M.; Schmid, A.; Rether, D.: *Quasi-Dimensional and Empirical Modeling of Compression Ignition Engine Combustion and Emissions*. SAE-Paper 2010-01-0151, 2010
- [63] Haas, S.: *Experimentelle und theoretische Untersuchung homogener und teilhomogener Dieselmotoren*. Stuttgart, Universität, Fakultät Maschinenbau, Dissertation, 2007, http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2007/3242/pdf/Diss_Haas.pdf
- [64] Haas, S.: *Homogene Dieselmotoren – Teilprojekt 1 (Pkw)*. Abschlussbericht zum FVV-Vorhaben 808, Heft 834-1, Frankfurt am Main: Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen, 2007
- [65] Halstead, M. P.; Kirsch, L. J.; Prothero, A.; Quinn, C. P.: *Mathematical Model for Hydrocarbon Autoignition at High Pressures*. In: Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, Vol. 346 (1975), No. 1647, S. 515-538, <http://www.jstor.org/stable/78834>
- [66] Heider, G.: *Rechenmodell zur Vorausrechnung der NO-Emission von Dieselmotoren*. München, Technische Universität, Fakultät für Maschinenwesen, Dissertation, 1996

- [67] Heimlich, F.; Maaß, J.; Frambourg, M.; Rölle, T.; Behnk, K.: *Externe Nacheinspritzung zur Regeneration von Dieselpartikelfiltern*. In: MTZ 65 (2004), Nr. 5, S. 354-361
- [68] Hewson, J. Ch.: *Pollutant Emissions From Nonpremixed Hydrocarbon Flames*. San Diego, University of California, Dissertation, 1997
- [69] Hirako, Y.; Ohta, M.: *Effect of Lean Pre-Mixture in the Combustion in Diesel Engine*. In: Bulletin of the JSME, Vol. 17 (1979), No. 109, S. 936-943
- [70] Hiroyasu, H.; Kadota, T.: *Models for Combustion and Formation of Nitric Oxide and Soot in Direct Injection Diesel Engines*. SAE-Paper 760129, 1976
- [71] Hiroyasu, H.; Kadota, T.; Arai, Masataka: *Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions (Part 1 Combustion Modeling)*. In: Bulletin of the JSME, Vol. 26 (1983), No. 214, S. 569-575, JSME-Paper: 214-12
- [72] Hitachi Global Storage Technologies (Hrsg.): *Deskstar™ 7K4000*. Datenblatt Hitachi Global Storage Technologies, [http://www.hgst.com/tech/techlib.nsf/techdocs/3C330019E6ED04A48825797700626F0D/\\$file/DS7K4000_ds.pdf](http://www.hgst.com/tech/techlib.nsf/techdocs/3C330019E6ED04A48825797700626F0D/$file/DS7K4000_ds.pdf), Abgerufen am 3.10.2012 um 16:15 Uhr
- [73] Hohlbaum, B.: *Beitrag zur rechnerischen Untersuchung der Stickstoffoxid-Bildung schnelllaufender Hochleistungsdieselmotoren*. Karlsruhe, Universität Fridericiana (TH), Fakultät für Chemieingenieurwesen, Dissertation, 1992
- [74] Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung (Hrsg.): *Datenblatt Kohlenmonoxid*. GESTIS-Stoffdatenbank, <http://gestis.itrust.de/>, Abgerufen am 3.11.2011 um 15:20 Uhr
- [75] IT Wissen (Hrsg.): *MIPS (million instructions per second)*. IT Wissen - Das große Online-Lexikon für Informationstechnologie, <http://www.itwissen.info/definition/lexikon/million-instructions-per-second-MIPS-Millionen-Anweisungen-pro-Sekunde.html>, Abgerufen am 6.7.2011 um 18:10 Uhr
- [76] Joos, F.: *Technische Verbrennung*. 1. Auflage, Berlin: Springer Verlag, 2006, ISBN: 978-3540343332
- [77] Jung, D.; Assanis, D. N.: *Quasidimensional Modeling of Direct Injection Diesel Engine Nitric Oxide, Soot, and Unburned Hydrocarbon Emissions*. In: Transactions of the ASME, Vol. 128 (2006), Issue 2, S. 388-396

- [78] Kawaguchi, Y.; Terada, K.; Masuda, M.; Maki, T.: *An Optical Investigation of Combustion on a Double Injection Diesel Engine*. In: Bulletin of the JSME, Vol. 22 (1979), No. 174, S. 1810-1817, Paper No. 174-14
- [79] Kerékgyártó, J.: *Ermittlung des Einspritzverlaufs an Diesel-Injektoren*. Magdeburg, Otto-von-Guericke-Universität, Fakultät Maschinenbau, Dissertation, 2009, http://edoc.bibliothek.uni-halle.de/servlets/MCRFileNodeServlet/HALCoRe_derivate_00003054/Dissertation_Kerekgyarto.pdf
- [80] Kimura, S.; Aoki, O.; Ogawa, H.; Muranaka, S.; Enomoto, Y.: *New Combustion Concept for Ultra-Clean and High-Efficiency Small DI Diesel Engines*. SAE-Paper 1999-01-3681, 1999
- [81] Klingmann, R.; Brüggemann, H.: *Der neue Vierzylinder-Dieselmotor OM611 mit Common-Rail-Einspritzung Teil 1: Motorkonstruktion und mechanischer Aufbau*. In: MTZ 58, Nr. 11, S. 652-658, 1997
- [82] Kouremenos, D. A.; Rakopoulos, C. D.; Hountalas, D. T.: *Multi-Zone Combustion Modelling for the Prediction of Pollutants Emissions and Performance of DI Diesel Engines*. SAE Paper 970635, 1997
- [83] Kožuch, P.: *Ein phänomenologisches Modell zur kombinierten Stickoxid- und Rußberechnung bei direkteinspritzenden Dieselmotoren*. Stuttgart, Universität, Fakultät Maschinenbau, Dissertation, 2004, elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2004/2104/pdf/Diss_Kozuch.pdf
- [84] Kožuch, P.; Maderthaner, K.; Grill, M.; Schmid, A.: *Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung bei schweren Nutzfahrzeugmotoren der Daimler AG*. 9. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, Baden-Baden, 2010
- [85] Krieger, K.: *Diesel-Einspritztechnik für Pkw-Motoren*. In: MTZ 60 (1999), Nr. 5, S. 308-313
- [86] Krüger, C.; Otto, F.: *Einsatz und Optimierungsbedarf von CFD und optischer Diagnostik zur Entwicklung moderner Brennverfahren*. 9. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, Baden-Baden, 2010
- [87] Kuleshov, A. S.: *Model for predicting air-fuel mixing, combustion and emissions in DI diesel engines over whole operating range*. SAE Paper 2005-01-2119, 2005

- [88] Kuleshov, A. S.: *Use of Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Simulation and Optimization of Performance and Emissions of Engines with Multiple Injection*. SAE Paper 2006-01-1385, 2006
- [89] Kuleshov, A. S.: *Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model and its application for Matching the Injector Design with Piston Bowl Shape*. SAE Paper 2007-01-1908, 2007
- [90] Kuleshov, A. S.; Mahkamov, K.: *Multi-zone diesel fuel spray combustion model for the simulation of a diesel engine running on biofuel*. In: Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy, Volume 222 (2008), Number 3, S. 309-321, <http://pia.sagepub.com/content/222/3/309>
- [91] Kuleshov, A. S.: *Multi-Zone DI Diesel Spray Combustion Model for Thermodynamic Simulation of Engine with PCCI and High EGR Level*. SAE Paper 2009-01-1956, 2009
- [92] Kuleshov, A. S.; Kozlov, A. V.; Mahkamov, K.: *Self-Ignition delay Prediction in PCCI direct injection diesel engines using multi-zone spray combustion model and detailed chemistry*. SAE Paper 2010-01-1960, 2010
- [93] Li, J.; Chae, J. O.; Lee, S. M.; Jeong, J. S.: *Modeling the Effects of Split Injection Scheme on Soot and NO Emissions of Direct Injection Diesel Engines by a Phenomenological Combustion Model*. SAE Paper 962062, 1996
- [94] Liu, S.; Hewson, J. C.; Chen, J. H.; Pitsch, H.: *Effect of strain rate on high-pressure nonpremixed n-heptane autoignition in counterflow*. In: Combustion and Flame 137 (2004), S. 320-339
- [95] Maiorana, G.; Sebastiano, G. R.; Ugaglia, C.: *Die Common-Rail-Motoren von Fiat*. In: MTZ 59 (1998), Nr. 9, S. 582-588
- [96] MAN AG (Hrsg.): *Partikelfilter für MAN-Linienomnibusse*. In: ATZ 91 (1989), Nr. 3, S. 134
- [97] Maßner, A.; Gärtner, U.; Kemmner, M.: *Herausforderungen beim Einsatz von Dieselpartikelfiltern in kombinierten Abgasnachbehandlungssystemen im Nutzfahrzeugbereich - Grundlegende Zusammenhänge der Partikelfilterauslegung und Betriebsstrategie*. 6. Internationales Forum Abgas- und Partikel-Emissionen, Ludwigsburg, 2010

- [98] Mauviot, G.; Albrecht, A.; Poinot, T. J.: *A New 0D Approach for Diesel Combustion Modeling Coupling Probability Density Function with Complex Chemistry*. SAE Paper 2006-01-3332, 2006
- [99] Meguerdichian, M.; Watson, N.: *Prediction of Mixture Formation and Heat Release in Diesel Engines*. SAE Paper 780225, 1978
- [100] Mehta, P. S.; Bhaskar, T.: *Prediction of Combustion and In-Cylinder Emissions in a Direct Injection Diesel Engine Using Multi-Process Models*. The Fifth International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA 2001), S.101-107
- [101] Mercedes-Benz (Hrsg.): *Mercedes-Benz Deutschland - Personenwagen*. Homepage der Daimler AG, http://www.mercedes-benz.de/content/germany/mpc/mpc_germany_website/de/home_mpc/passengercars.flash.html, Abgerufen am 29.10.2011 zwischen 17:00 Uhr und 17:30 Uhr
- [102] Merker, G. P.; Hohlbaum, B.; Rauscher, M.: *Two-Zone Model for Calculation of Nitrogen-Oxide Formation in Direct-Injection Diesel Engines*. SAE Paper 932454, 1993
- [103] Merker, G.; Schwarz, C.; Stiesch, G.; Otto, F.: *Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung*. 3. Auflage, Wiesbaden: Teubner Verlag, 2006, ISBN: 978-3-8351-0080-0
- [104] Meuer, H. W.: *The TOP500 Project: Looking Back Over 15 Years of Supercomputing Experience*. In: Informatik Spektrum 31 (2008), Nr. 3, S. 203-222
- [105] Millo, F.; Pautasso, E.; Zancanaro, S.; Delneri, D.: *Fuel injection and combustion integrated simulation for a marine diesel engine*. GT-Suite Users International Conference, Frankfurt a.M., 2008
- [106] Miyamachi, T.; Gruber, M.; Davesne, V.; Bowen, M.; Boukari, S.; Joly, L.; Scheurer, F.; Rogez, G.; Yamada, T. K.; Ohresser, P.; Beaurepaire, E.; Wulfhekel, W.: *Robust spin crossover and memristance across a single molecule*. Nature Communications (2012), Nr. 3, Artikel 938, DOI: 10.1038/ncomms1940, Verfügbar unter: <http://www.nature.com/ncomms/journal/v3/n7/pdf/ncomms1940.pdf>
- [107] Mollenhauer, K.; Tschöke, H.: *Handbuch Dieselmotoren*. 3. Auflage, Berlin: Springer Verlag, 2007, ISBN: 978-3-540-72164-2

- [108] Morel, T.; Wahiduzzaman, S.: *Modeling of Diesel Combustion and Emissions*. XXVI FISITA Congress, Praha, 1996
- [109] Moser, F. X.; Haas, E.; Schlögl, H.: *Zur Partikelemission von Nutzfahrzeug-Dieselmotoren*. In: MTZ 51 (1990), Nr. 5, S. 186-193
- [110] Munack, A.; Grope, N.; Ruschel, Y.; Schröder, O.; Krahl, J.: *Messung ultrafeiner Partikel im Abgas von Dieselmotoren beim Betrieb mit Biodiesel*. Abschlussbericht des Forschungsvorhabens mit den Kennzeichen 22007404 (FNR); 530/044 (UFOP); 2-TA-VDB (VDB), Braunschweig: Bundesforschungsanstalt für Landwirtschaft (FAL), 2007
- [111] Nakayama, S.; Ueda, M.; Inagaki, K.; Nakakita, K.; Fukuma, T.: *Toyota's Diesel Transient Simulation with an Innovative Combustion Model Adaptable to the Latest Combustion Concept*. 2. Tagung: Motorprozesssimulation und Aufladung, Berlin, 2007
- [112] Oberg, H.-J.: *Die Darstellung des Brennverlaufs eines schnelllaufenden Dieselmotors durch zwei überlagerte Vibe-Funktionen*. Braunschweig, Technische Universität Carolo-Wilhelmina, Fakultät Maschinenbau und Elektrotechnik, Dissertation, 1976
- [113] Ogink, R.: *Approximation of Detailed-Chemistry Modeling by a Simplified HCCI Combustion Model*. SAE-Paper 2005-24-037, 2005
- [114] Peck, R. S.: *Experimentelle Untersuchung und dynamische Simulation von Oxidationskatalysatoren und Diesel-Partikelfiltern*. Stuttgart, Universität, Fakultät Maschinenbau, Dissertation, 2007, <http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/2007/2958/pdf/rpdiss.pdf>
- [115] Peters, A.; Pütz, W.: *Der neue Vierzylinder-Dieselmotor OM611 mit Common-Rail-Einspritzung Teil 2: Verbrennung und Motormanagement*. In: MTZ 58 (1997), Nr. 12, S. 760-767
- [116] Peters, N.: *Technische Verbrennung*. Vorlesungsumdruck, Institut für Technische Verbrennung (ITV), RWTH Aachen, 2010, www.itv.rwth-aachen.de/index.php?id=27
- [117] Pirker, G.; Chmela, F.; Wimmer, A.: *ROHR Simulation for DI Diesel Engines Based on Sequential Combustion Mechanisms*. SAE Paper 2006-01-0654, 2006

- [118] Pischinger, F.: *Motorische Verbrennung*. Abschlussbericht Sonderforschungsbereich 224, RWTH Aachen, 2001, <http://www.sfb224.rwth-aachen.de/bericht.htm>
- [119] Pischinger, R.; Klell, M.; Sams, T.: *Thermodynamik der Verbrennungskraftmaschine*. 2. Auflage, Wien: Springer Verlag, 2002, ISBN: 3-211-83679-9
- [120] Pischinger, S.; Schnitzler, J.; Wiartalla, A.; Scholz, V.: *Untersuchungen zum Einsatz eines NO_x-Speicherkatalysators im Pkw-Dieselmotor*. In: MTZ 64 (2003), Nr. 3, S. 214-221
- [121] Pöttker, S.: *Optische Untersuchungen zum Einfluss synthetischer Kraftstoffe auf die homogene Kompressionszündung (HCCI)*. Hannover, Universität, Fakultät für Maschinenbau, Dissertation, 2005
- [122] Presse- und Informationsamt der Bundesregierung (Hrsg.): *Teurer für Stinker: die neue Kfz-Steuer*. Mitteilung vom 6.3.2009, <http://www.bundesregierung.de/Content/DE/Artikel/2009/01/2009-01-13-konjunkturpaket-neuregelung-kfz-steuer.html>, Abgerufen am 28.10.2011 um 12:52 Uhr
- [123] Rakopoulos, C. D.; Antonopoulos, K. A.; Rakopoulos, D. C.: *Multi-zone modeling of Diesel engine fuel spray development with vegetable oil, bio-diesel or Diesel fuels*. In: Energy Conversion and Management, Volume 47 (2006), Issues 11-12, Seite 1550-1573
- [124] Reinhardt, H.: *Modellierung Zündverzögerung Diesel*. Abschlussbericht zum FVV-Vorhaben 876, Heft 870, Frankfurt am Main: Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen, 2008
- [125] Rether, D.: *Implementierung und Untersuchung eines dieselmotorischen Strahlmodells*. Stuttgart, Universität, Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen, Diplomarbeit, 2008
- [126] Rether, D.; Grill, M.; Schmid, A.; Bargende, M.: *Quasi-Dimensional Modeling of CI-Combustion with Multiple Pilot- and Post Injections*. SAE-Paper 2010-01-0150, 2010
- [127] Rether, D.; Schmid, A.; Grill, M.; Bargende, M.: *Quasidimensionale Simulation der Dieselverbrennung mit Vor- und Nacheinspritzungen*. In: MTZ 71 (2010), Nr. 10, S. 742-748

- [128] Rether, D.; Lämmle, C.: *Modell zur Berechnung der Brennrate bei homogener und teilhomogener Dieselerbrennung*. Abschlussbericht zum FVV-Vorhaben 996, Heft 960, Frankfurt am Main: Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen, 2012
- [129] Riegler, U. G.: *Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung in Ottomotoren unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen*. Stuttgart, Universität, Fakultät Energietechnik, Dissertation, 1999, http://elib.uni-stuttgart.de/opus/volltexte/1999/548/pdf/1_diss.pdf
- [130] Rönitz, R.: *Chancen Der Direkteinspritzung Bei Schnelllaufenden PKW-Dieselmotoren Für Die Großserie*. XX Fisita Congress (Wien 1984), SAE P-143, Volume 3, S. 3.80-3.87, Warrendale: Society of Automotive Engineers, 1984, ISBN: 0-89883-705-7. – Alternativ auch Rönitz, R.: *Chances for Direct Injection of High-Speed Diesel Motors in Large-Scale Production of Personal Vehicles*. SAE-Paper 845090, 1984
- [131] Rudelt, J.; Hanitzsch, R.; Gaiser, G.; Braun, J.: *Abgasseitige Kraftstoffeinspritzung für aktive Partikelfilterregeneration*. In: MTZ 66 (2005), Nr. 12, S. 972-977
- [132] Rudolph, F.: *Die Suche nach dem Optimum*. In: MTZ Spezial „150 Jahre Rudolf Diesel“, S. 44-48, 2008
- [133] Schiffmann, W.; Bähring, H., Hönig, U.: *Technische Informatik 3*. 1. Auflage, Berlin: Springer Verlag, 2011, ISBN: 978-3-642-16811-6
- [134] Schloz, E.: *Untersuchungen zur homogenen Dieselerbrennung bei innerer Gemischbildung*. Karlsruhe, Universität (TH), Fakultät Maschinenbau, Dissertation, 2003, <http://digbib.ubka.uni-karlsruhe.de/volltexte/1742003>
- [135] Schmid, A.: *Wirkungsgradoptimaler Ottomotor II*. Abschlussbericht zum FVV-Vorhaben 994, Frankfurt am Main: Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen, Heft 926, 2011
- [136] Schnabel, W.: *Rußfilter für den Serieneinbau bei Dieselmotoren*. In: MTZ 47, Nr. 4, S. 138, 1986
- [137] Schommers, J.; Zygan, A.; Binz, R.; Eckert, D.; Paule, M.; Reichel, S.; Kempka, K.-H.: *Bluetec – Das Konzept für Dieselmotoren mit niedrigsten Emissionen*. In: MTZ 69 (2008), Nr. 5, S. 376-384

- [138] Schreiner, K.: *Untersuchungen zum Ersatzbrennverlauf und Wärmeübergang bei schnelllaufenden Hochleistungsdieselmotoren*. In: MTZ 54 (1993), Nr. 11, S. 554-563
- [139] Seguelong, T.; Naschke, W.: *Serieneinsatz eines Dieselpartikelfilters in Kombination mit einem im Kraftstoff gelösten Katalysator auf Ceriumbasis*. In: MTZ 63 (2002), Nr. 3, S. 186-191
- [140] Shawn, M.-M.; Haas, S.; Yann, G.; Bargende, M.; Rizzoni, G.; Berner, H.-J.: *Mixed-Mode Diesel HCCI/DI with External Mixture Preparation*. FISITA F2004V254, Barcelona, 2004
- [141] Signer, M.: *Partikelfiltersysteme – Erfahrung und Ausblick*. Tagungsbeitrag TAE Symposium Dieselmotorentchnik 1991, In: Fortschritt-Berichte VDI, VDI Reihe 12: Verkehrstechnik/Fahrzeugtechnik, Nr. 172, S. 108-122, Düsseldorf, VDI-Verlag, 1992, ISBN: 3-18-147212-3
- [142] Sitkei, G.: *Kraftstoffaufbereitung und Verbrennung bei Dieselmotoren*. Berlin: Springer-Verlag, 1964, Deutsche neubearbeitete Ausgabe des Buches A keverékképzés és égés lefolyása Diesel-motorokban, Budapest, Akadémiai Kiadó, 1960
- [143] Spicher, U.; Velji, A.; Anca, R.; Wagner, U.: *Homogene Dieselerverbrennung mit innerer und äußerer Gemischbildung*. 5. Dresdner Motorenkolloquium, 2003
- [144] Steinhilber, T. W.: *Einfluss der Wasser- oder Emulsionseinspritzung auf die homogene Dieselerverbrennung*. München, Technische Universität, Fakultät Maschinenwesen, Dissertation, 2007, <http://www.td.mw.tum.de/tum-td/de/forschung/dissertationen/download/P2007/steinhilber.pdf>
- [145] Steinparzer, F.; Kratochwill, H.; Mattes, W.; Steinmayr, T.: *Neuer Vierzylinder-Dieselmotor von BMW mit Common-Rail-Einspritzung*. In: MTZ 62 (2001), Nr. 11, S. 888-897
- [146] Stiesch, G.: *Phänomenologisches Multizonen-Modell der Verbrennung und Schadstoffbildung im Dieselmotor*. Hannover, Universität, Fachbereich Maschinenbau, Dissertation, 1999
- [147] Stiesch, G.; Merker, G. P.: *A Phenomenological Model for Accurate and Time Efficient Prediction of Heat Release and Exhaust Emissions in Direct-Injection Diesel Engines*. SAE Paper 1999-01-1535, 1999

- [148] Such, C. H.; Skipton-Carter, A.; Vogt, J. M.: *Heavy-Duty Engine Design and Operation for Euro IV Emissions*. International Forum on the Development of Internal Combustion Engine in China, Shanghai, 2007
- [149] Tanaka, S.; Ayala, F.; Keck, J. C.; Heywood, J. B.: *Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives*. In: *Combustion and Flame* 132 (2003), S. 219-239
- [150] Tatur, M.; Nanjundaswamy, H.; Tomazic, D.; Thornton, M.; Kolbeck, A.; Lamping, M.: *Erhöhter Biodieselanteil im Kraftstoff - Auswirkung auf Motoren und Abgasnachbehandlungssysteme*. In: *MTZ* 70 (2009), Nr. 1, S. 38-49
- [151] Thoma, M.: *GPA-Dieselerbrennung*. Abschlussbericht zum FVV-Vorhaben 778, Heft 788, Frankfurt am Main: Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen, 2004
- [152] Top 500 (Hrsg.): *Performance Development*. Homepage des Top500 Projekts, http://top500.org/lists/2011/06/performance_development, Abgerufen am 6.7.2011 um 18:15 Uhr
- [153] Tsurushima, T.: *A new skeletal PRF kinetic model for HCCI combustion*. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009), S. 2835-2841
- [154] Umweltbundesamt (Hrsg.): *Häufig gestellte Fragen zum Thema Stickstoffoxide (NOx) – und Antworten darauf*. Informationsblatt des Umweltbundesamts, www.umweltbundesamt.de/luft/schadstoffe/no.htm, 2011
- [155] van Basshuysen, R.; Stock, D.; Bauder, R.: *Audi Turbodieselmotor mit Direkteinspritzung Teil 1: Grundsatzentwicklung der dieselmotorischen Brennverfahren mit direkter Einspritzung zur Konzeptauswahl*. In: *MTZ* 50 (1989), Nr. 10, S. 458-465
- [156] van Basshuysen, R.; Stock, D.; Bauder, R.: *Audi Turbodieselmotor mit Direkteinspritzung Teil 3: Thermodynamikentwicklung und Fahrzeugergebnisse*. In: *MTZ* 51 (1990), Nr. 1, S. 4-11
- [157] Vibe, I. I.: *Brennverlauf und Kreisprozeß von Verbrennungsmotoren*. Berlin: VEB Verlag Technik, 1970
- [158] Volkswagen AG (Hrsg.): *Passat B5 Limousine/Variant*. Volkswagen Classic Fahrzeugpool, www.volkswagen-classic.de/web/guest/modelle/passat-b5-limousine-variant, Abgerufen am 10.6.2011 um 18:35 Uhr

- [159] Volkswagen AG (Hrsg.): *Volkswagen Deutschland*. Homepage der Volkswagen AG, <http://www.volkswagen.de/de.html>, Abgerufen am 28.10.2011 zwischen 11:30 Uhr und 12:30 Uhr
- [160] Warnatz, J.; Maas, U.; Dibble, R. W.: *Verbrennung*. 3. Auflage, Berlin: Springer Verlag, 2001, ISBN: 3-540-42128-9
- [161] Warth, M.; Obrecht, P.; Koch, T.; Boulouchos, K.: *Vorausberechnung von Brennverlauf, NO- und Russemissionen beim Dieselmotor – Optimierung und Validierung eines neuen Ansatzes*. 9. Tagung „Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors“, 2003
- [162] Weisser, G.; Boulouchos, K.: *NOEMI - Ein Werkzeug zur Vorabschätzung der Stickoxidemissionen direkteinspritzender Dieselmotoren*. 5. Tagung „Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors“, S. 23-50, 1995
- [163] Whitehouse, N. D.; Way, R. J. B.: *A Simple Method for the Calculation of Heat Release Rates in Diesel Engines Based on the Fuel Injection Rate*. SAE Paper 710134, 1971
- [164] Whitehouse, N. D.; Sareen B. K.: *Prediction of Heat Release in a Quiescent Chamber Diesel Engine Allowing for Fuel/Air Mixing*. SAE Paper 740084, 1974
- [165] Wojik, K.: *Weiterentwicklung der direkteinspritzenden Dieselmotoren für Personenkraftwagen*. In: MTZ 51 (1990), Nr. 2, S. 46-52
- [166] Woschni, G.; Anisitis, F.: *Eine Methode zur Vorausberechnung der Änderung des Brennverlaufs mittelschnelllaufender Dieselmotoren bei geänderten Betriebsbedingungen*. In: MTZ 34 (1973), Nr. 4, S. 106-115
- [167] Xiaoping, B.; Shu, H.; Dai, Z.; Yin, S.; Duan, C.: *A Multi-Zone Model for Prediction of DI Diesel Engine Combustion and Soot Emission*. SAE-Paper 941900, 1994
- [168] Yoshizaki, T.; Nishida, K.; Hiroyasu, H.: *Approach to Low NO_x and Smoke Emission Engines by Using Phenomenological Simulation*. SAE-Paper 930612, 1993
- [169] Zhang, Y.: *A Simplified Model for Predicting Evaporating Spray Mixing Process in D. I. Diesel Engine*. SAE-Paper 922228, 1992
- [170] Zheng, J.; Miller, D. L.; Cernansky, N. P.: *A Global Reaction Model for the HCCI Combustion Process*. SAE-Paper 2004-01-2950, 2004
- [171] Zima, S.: *Motorkolben*, 1. Auflage, Wiesbaden: Vieweg Verlag, 2005, ISBN: 3-528-03986-8

[172] Zwahr, S.; Günther, M.: *Einsatz der Ladungswechsel- und Prozesssimulation zur Bedatung aufgeladener Motoren*. In: *Motorprozesssimulation und Aufladung 2*, Haus der Technik Fachbuch, Renningen: Expert Verlag , 2007

7.2 **Überschlagsrechnung bezüglich der Amortisationszeit von Diesel-Pkw** Randbedingungen / Annahmen

- Es werden immer zwei Fahrzeuge des gleichen Modells mit möglichst leistungsgleichem Otto- und Dieselmotor verglichen.
- Berücksichtigt werden die unterschiedlichen Anschaffungspreise, die unterschiedliche Besteuerung der Fahrzeuge und die unterschiedlichen Kraftstoffverbräuche sowie Kraftstoffpreise.
- Die technischen Daten und Preise der Fahrzeuge wurden den im Internet angebotenen Unterlagen der jeweiligen Hersteller entnommen [19], [101], [159].
- Die Kfz-Steuer der jeweiligen Fahrzeuge wird auf Basis der 2009 verabschiedeten Neuregelung für das Jahr 2011 berechnet und für die nachfolgenden Jahre übernommen [122]:
 - Ottomotoren: 2 € je angefangene 100 cm³ Hubraum.
 - Dieselmotoren: 9,50 € je angefangene 100 cm³ Hubraum.
 - Bei beiden Motoren gibt es einen CO₂-Freibetrag von 120 g/km.
 - Für jedes zusätzliche Gramm CO₂-Ausstoß pro Kilometer müssen zusätzlich 2 € Steuer bezahlt werden.
- Zur Berechnung des Kraftstoffverbrauchs wird der Verbrauch im NEFZ herangezogen. Es wird von einer Jahresfahrleistung von 15000 km ausgegangen.
- Da die Kraftstoffpreise von vielen politischen und wirtschaftlichen Gegebenheiten beeinflusst werden – die nicht vorhersagbar sind – erfolgt die Abschätzung anhand der mittleren Kraftstoffpreise in der BRD im Oktober 2011, siehe [17]:
 - Kosten für 1 l Super-Benzin: 1,56 €
 - Kosten für 1 l Diesel: 1,48 €

Hersteller	Mercedes	BMW	BMW	VW	VW	Mercedes	BMW
Modell Ottomotor	E 250 BlueEFFICIENCY	118i	318i	Golf 1.2 TSI	Jetta 1.2 TSI BlueMotion	C 180 BlueEFFICIENCY	330i
Hubraum [cm³]	1796	1995	1995	1200	1200	1796	2996
Leistung [kW]	150	105	105	77	77	115	200
Verbrauch im NEFZ [l/100km]	7	6.1	6.3	5.7	5.3	7	7.4
CO2-Ausstoß im NEFZ [g/km]	162	143	146	134	123	163	173
Basispreis inklusive Mehrwertsteuer [€]	45845	24050	28960	18675	21600	34361	40700
Jährliche Kfz-Steuer [€]	120	86	92	52	30	122	166
Jährliche Kosten durch Kraftstoffverbrauch [€]	1638	1427	1474	1334	1240	1638	1732
Modell Dieselmotor	E 250 CDI BlueEFFICIENCY	118d	318d	Golf 1.6 TDI	Jetta 1.6 TDI BlueMotion	C 220 CDI BlueEFFICIENCY	335d
Hubraum [cm³]	2143	1995	1995	1600	1600	2143	2993
Leistung [kW]	150	105	105	77	77	125	210
Verbrauch im NEFZ [l/100km]	5.3	4.5	4.5	4.5	4.2	5.3	6.6
CO2-Ausstoß im NEFZ [g/km]	139	119	119	119	109	138	174
Basispreis inklusive Mehrwertsteuer [€]	45488	25600	31860	20825	23800	38526	46200
Jährliche Kfz-Steuer [€]	247	190	190	152	152	274	393
Jährliche Kosten durch Kraftstoffverbrauch [€]	1177	999	999	999	932	1177	1465
Anzahl der gefahren Kilometer bis zur Amortisierung [km]	0	72479	116288	141129	178558	204356	2099099
Anzahl der Jahre bis zur Amortisierung [Jahre]	0.0	4.8	7.8	9.4	11.9	13.6	139.9

Tabelle 7-1: Amortisierungsdauer verschiedener Diesel-Pkw

7.3 Überschlagsrechnung bezüglich Direkte Numerische Simulation

Anhand der von Chiodi [28] veröffentlichten Angaben bezüglich Diskretisierung und Rechenaufwand bei seinem 3D-CFD Ansatz und seinen Abschätzungen hinsichtlich DNS soll überschlagen werden, ab wann eine DNS der motorischen Verbrennung in vertretbarer Rechenzeit frühestens möglich sein könnte.

Notwendige Annahmen

- Die Zunahme an Rechenleistung bei Supercomputern ist vergleichbar mit der Entwicklung der letzten 18 Jahren. Daraus folgt, dass die Rechenleistung alle elf Jahre um das 1000-fache steigt, siehe [Abbildung 17](#). Es ist anzumerken, dass Meuer in seinem Ausblick den bisherigen Verlauf der Rechenleistung nur bis 2018 extrapoliert [104].
- Die Zunahme der Rechenleistung von Desktop-PCs ist wie bisher vergleichbar zu der Entwicklung der Rechenleistung von Supercomputern, siehe [Abbildung 17](#).
- Die Festplattenkapazität verdoppelt sich alle zwei Jahre. Dies ist nur durch gänzlich neue Ansätze zur Datenspeicherung erreichbar, bspw. [106].
- Bei der DNS ist die benötigte Rechenzeit umgekehrt proportional zu der Anzahl an verfügbaren Rechenkernen. (Stichwort: Parallelisierung)
- Der Rechenaufwand pro Zelle bei der DNS sei gleich, wie bei dem von Chiodi vorgestellten QuickSim-Ansatz.
- Sowohl der QuickSim-Ansatz, als auch die DNS, bestehen nur aus Gleitkommaoperationen.
- Die Angaben von Chiodi gelten für einen PC mit einer Rechenleistung von 10 GFlops. Dies entspricht ungefähr der Rechenleistung des AMD Sempron 140 [3], einem Einkernprozessor des unteren Leistungssegments im Jahre 2009, vgl. [36] S.169.
- Bei der Berechnung des Speicherbedarfs wird davon ausgegangen, dass Zustandsgrößen als Gleitkommazahlen mit einfacher Präzision (4 Byte) abgespeichert werden.
- Die Zustandsgröße wird für jede Zelle und für jeden Rechenschritt abgespeichert.

Jahr	2009	2020	2031	2042	2053	2064
Rechenleistung	10	10	10	10	10	10
Desktop-PC	GFlops	TFlops	PFlops	EFlops	ZFlops	YFlops
Festplattenkapazität	1.5 TB	68 TB	3 PB	278 PB	6,3 EB	300 EB

Tabelle 7-2: Entwicklung von Rechenleistung und Festplattenkapazität unter den angegebenen Annahmen

Anzahl der Zellen zur Diskretisierung des Brennraums in QuickSim:	50000
Anzahl der Rechenschritte bei der Berechnung eines ASP in QuickSim:	1500
Notwendig Zeit zur Berechnung eins ASP in QuickSim:	500000 s
Rechenzeit pro Zelle und Rechenschritt in QuickSim:	$6,67 \cdot 10^{-3}$ s
Anzahl der Gleitkommaoperationen zur Berechnung einer Zelle während eines Rechenschritts in QuickSim (Rechenaufwand):	$6,67 \cdot 10^7$
Benötigter Speicherbedarf pro Zustandsgröße und ASP in QuickSim:	300 MB
Anzahl der Zellen zur Diskretisierung des Brennraums bei DNS:	$1 \cdot 10^{13}$
Anzahl der Rechenschritte bei der Berechnung eines ASP mittels DNS:	$6 \cdot 10^6$
Anzahl der Gleitkommaoperationen bei der DNS eines ASP ($6,67 \cdot 10^7 \cdot 1 \cdot 10^{13} \cdot 6 \cdot 10^6$):	$4 \cdot 10^{27}$
Rechenzeit zur Durchführung einer DNS eines ASP bei einer angenommen Rechenleistung von 10 YFlops (10^{25} Flops):	400 s
Benötigter Speicherbedarf pro Zustandsgröße und ASP in QuickSim:	60 EB

Laut dieser Überschlagsrechnung, würde die direkt numerische Simulation eines Arbeitsspiels – auf einem Desktop-PC – im Jahr 2064 etwas weniger als sieben Minuten benötigen. Auf einer Desktop-Festplatte können die Werte von sechs Zustandsgrößen für alle Zellen und jeden Rechenschritt abgespeichert werden.