



Leitung: Prof. Dr. Friedrich Dinkelacker

## Modellierung der Flammenausbreitung und des Flammenlöschens im Gasmotor

Von der Fakultät für Maschinenbau der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover zur Erlangung des akademischen Grades Doktor-Ingenieur genehmigte Dissertation

von

#### Dipl.-Ing. Ansgar Ratzke

geboren am 20. Juli 1984

in Köln

2013

Erster Referent: Prof. Dr. Friedrich Dinkelacker Zweiter Referent: Prof. Dr.-Ing. Roland Scharf Tag der Promotion: 18. Dezember 2013

## Kurzfassung

Der Einsatz von Erdgas als Kraftstoff für Verbrennungsmotoren bietet gegenüber flüssigen fossilen Kraftstoffen den Vorteil einer ungefähr 20% geringeren Kohlenstoffdioxid-Emission. Allerdings stoßen Erdgas-Motoren eine hohe Menge Kohlenwasserstoffe unverbrannt aus, welche größtenteils aus dem Treibhausgas Methan bestehen. Zudem reduziert der unverbrannt bleibende Kraftstoff den Wirkungsgrad. Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Entwicklung von Berechnungsmethoden für die Flammenausbreitung und für die durch wandnahes Flammenlöschen ("Quenchen") unverbrannt bleibenden Kohlenwasserstoffe in Gasmotoren. Dies soll zukünftig zu einem Berechnungswerkzeug ausgebaut werden, das die Auslegung verbesserter Gasmotoren erlaubt.

Aus reaktionskinetischen Simulationen werden Flammenfrontdicken, adiabatische Flammentemperaturen und laminare Brenngeschwindigkeiten für motorisch relevante Bedingungen abgeleitet. Letztere fließen in ein thermisches Modell zur Berechnung des Flammenquenchabstands ein, welches aus vier entwickelten Modellvarianten durch Vergleich mit Messdaten ausgewählt wurde.

Die laminaren Brenngeschwindigkeiten sind ebenfalls wesentlich für ein neues zonales Zylindermodell zur Darstellung des Hochdruck- und Ladungswechselprozesses für direkt gezündete Methangasmotoren. Dieses beschreibt die Form der durch die Kolbenbewegung deformierten Flammenfront mithilfe einer Ellipsoidgeometrie. Es gibt damit die Flammenausbreitung und das Flammenlöschen physikalisch genauer wieder als herkömmliche Modelle, die eine hemisphärische Flammenfront postulieren. Die kurbelwinkelaufgelösten Ergebnisse des Zylindermodells werden durch Motorindizierdaten validiert. Die Kombination des Zylindermodells mit dem Flammenlöschmodell liefert zeitliche und räumliche Informationen der unverbrannten Gasmasse an den Brennraumwänden. Beispielsweise zeigt sich, dass die Steigerung der Abgasrückführ-Rate von 0 auf 22 % bei gleichbleibendem Verbrennungsschwerpunkt zu größeren Quenchabständen und zu einer langsameren Flammenausbreitung mit spätem Flammenlöschen an den Wänden führt. Hierdurch verdoppelt sich die Menge unverbrannt bleibenden Gases des wandnahen Bereichs.

#### Schlagwörter

Gasmotor, zonales Zylindermodell, wandnahes Flammenlöschen

### Abstract

#### Modelling the Flame Propagation and Flame Extinction in Gas Engines

The use of natural gas as a fuel for internal combustion engines instead of liquid fossil fuels leads a reduction of approximately 20% carbon dioxide emissions. However, natural gas engines emit a large amount of unburned hydrocarbons, mainly consisting of methane which is a greenhouse gas. In addition, the unburned fuel reduces the efficiency. The aim of this work is the development of computational methods for investigating the flame propagation and the near-wall flame extinction ("quenching"). This will be expanded in the future to a calculation tool that provides the design of enhanced gas engines.

The flame front thicknesses, the adiabatic flame temperatures and the laminar flame speeds for engine-relevant conditions are derived from reaction kinetic simulations. The flame speeds are integrated into a thermal model for calculating the quenching distance. The thermal model was chosen among four developed variants by comparison with measured data.

The laminar flame speed is also essential for a new zonal cylinder model which represents the high-pressure process and charge exchange for spark ignited methane gas engines. This cylinder model describes the shape of the flame surface by means of an ellipsoid geometry to include its deformation caused by the piston movement. Thus, the flame propagation and the flame extinction are depicted more accurately than in conventional models which postulate a hemispherical flame front. The crank angle resolved results of this model are validated by measured cylinder pressure curves. The combination of the cylinder model with the flame quenching model provides temporal and spatial information of the amount of unburned gas next to the combustion chamber walls. For example, the increase of recirculated exhaust gas from 0 to 22% leads to larger quenching distances and to slower flame propagation with late flame quenching. This doubles the amount of unburned gas from the wall region.

#### Keywords

gas engine, zonal cylinder model, flame quenching

## Danksagung

Die vorliegende Dissertation habe ich während meiner Anstellung als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Verbrennung (ITV) der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover im Zeitraum 2009 bis 2013 verfasst. Hierbei habe ich Unterstützung von vielen Menschen erfahren.

Besonders möchte ich mich bei Prof. Dr. Friedrich Dinkelacker, dem Leiter des ITV, für die fachliche Betreuung und persönliche Unterstützung bedanken. Herrn Prof. Dr.-Ing. Roland Scharf vom Institut für Kraftwerkstechnik und Wärmeübertragung (IKW) danke ich für die Übernahme des Korreferats und Herrn Prof. Dr.-Ing. Lutz Rissing, dem Leiter des Instituts für Mikroproduktionstechnik (IMPT), für die Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Die Daimler AG mit Sitz in Stuttgart stellte freundlicherweise Indizierdaten eines Versuchsmotors zur Validierung des zonalen Zylindermodells zur Verfügung. Besonders bei Dipl.-Ing. Tobias Schöffler möchte ich mich für seinen Einsatz bedanken.

Auch danke ich meinen Kollegen am ITV, die mir eine angenehme Promotionszeit mit freundschaftlichen und wissenschaftlichen Gesprächen bescherten. Für die inhaltliche Zusammenarbeit danke ich meinen Kollegen Dipl.-Wirtsch.-Ing. Christoph Hennecke und Kalyan Kuppa, M. Sc. Ebenfalls trugen Georg Butzbach, Anna Hillenbrand und Vikram Betageri durch studentische Arbeiten zu dieser Dissertation bei.

Schließlich gilt meiner Freundin Kerstin, meinen Freunden und meiner Familie besonders herzlicher Dank.

## Inhaltsverzeichnis

Kι	urzfas	sung		iii		
Ał	ostrac	t		v		
Da	anksag	gung		vii		
In	haltsv	verzeich	nis	xi		
Sy	mbol-	und A	bkürzungsverzeichnis	xiii		
1.	Einle	eitung		1		
	1.1.	Motiva	ation	1		
	1.2.	Zielset	zung	1		
		1.2.1.	Simulation der Flammenausbreitung	3		
		1.2.2.	Ursachen unverbrannter Kohlenwasserstoffe im Gasmotor	4		
	1.3.	Vorgel	nensweise	6		
2.	Lam	inare B	renngeschwindigkeit von Methan-Luft-Gemischen	9		
	2.1.	Grund	lagen	9		
	2.2. Stand der Forschung $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$					
		2.2.1.	Messung $\ldots$	10		
		2.2.2.	Numerische Simulation	11		
	2.3.	Reakti	onskinetische Simulation für Methan-Luft-Gemische bei			
		hohen	Drücken und Temperaturen	14		
		2.3.1.	Laminare Brenngeschwindigkeit	15		
		2.3.2.	Näherungsfunktion für die laminare Brenngeschwindigkeit	16		
		2.3.3.	Näherungsfunktion für die thermische laminare Flam-			
			menfrontdicke	21		
		2.3.4.	Näherungsfunktion für die adiabatische Flammentem-			
			peratur	23		

3.	Mod	lellierur	ng des Flammenlöschens an den Brennraumwänden	27					
3.1. Grundlagen $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$ $\ldots$									
		3.1.1.	Chemischer Ansatz	28					
		3.1.2.	Thermischer Ansatz	28					
	3.2.	Fronta	Frontales Flammenlöschen						
	3.3.	Seitlic	hes Flammenlöschen	30					
	3.4.	Flamn	nenlöschen im Spalt	32					
	3.5.	Entwi	cklung eines Flammenlöschmodells	32					
		3.5.1.	Beschreibung der CFD-Simulation	33					
		3.5.2.	Modellierung des Flammenlöschens auf Basis der CFD-						
			Simulation	36					
		3.5.3.	Variante I: Wandwärmestrom aus der CFD-Simulation	37					
		3.5.4.	Variante II: Wandwärmestrom aus der Wärmefreisetzung	37					
		3.5.5.	Variante III: Wandwärmestrom aus der CFD-Simulation						
			mit Berechnung der Péclet-Zahl	39					
		3.5.6.	Variante IV: Wandwärmestrom aus dem konstantem						
			dimensionslosem Wandwärmestrom	40					
		3.5.7.	Ergebnisse und Diskussion	40					
4.	Zona	ale Mod	lellierung der gasmotorischen Verbrennung	43					
	4.1.	Grund	llagen	43					
	4.2.	Stand der Forschung							
	4.3.	Beschi	reibung des zonalen Zylindermodells	46					
		4.3.1.	Vereinfachungen	50					
		4.3.2.	Flammenfrontfläche	51					
		4.3.3.	Brenngeschwindigkeit	56					
		4.3.4.	Flammenausbreitung	59					
		4.3.5.	Kolbenhubbewegung	66					
		4.3.6.	Ladungswechsel	68					
		4.3.7.	Indizierung	76					
		4.3.8.	Flammenlöschen an den Brennraumwänden	77					
	4.4.	Ergebi	nisse des zonalen Zylindermodells	80					
		4.4.1.	Untersuchte Betriebspunkte	80					
		4.4.2.	Kurbelwinkelaufgelöste Darstellung	82					
		4.4.3.	Indikatordiagramme	86					
		4.4.4.	Flammenlöschen an den Brennraumwänden	89					
5.	Zusa	ammenf	fassung und kritische Betrachtung der Ergebnisse	95					

6.	Ausblick	97
Lit	eraturverzeichnis	99
А.	Tabellen der laminaren Brenngeschwindigkeit	111
В.	Tabellen der thermischen laminaren Flammenfrontdicke	117
С.	Tabellen der adiabatischen Flammentemperatur	123
D.	Lebenslauf	129
E.	Eigene Publikationen und Tagungsbeiträge	131
F.	Betreute studentische Arbeiten	133

# Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

Formelzeichen					
Zeichen	Einheit	Bedeutung			
A	$m^2$	Oberfläche			
A	versch.	Parameter der Arrhenius-Gleichung			
b	_	Parameter der Arrhenius-Gleichung			
c	_	Beiwert			
$c_{\mathrm{p}}$	$\frac{J}{\text{kg K}}$	Spezifische Wärmekapazität bei			
	0	konstantem Druck			
e	m	Exzentrität			
$E_{\mathrm{A}}$	$\frac{\mathrm{J}}{\mathrm{mol}}$	Aktivierungsenergie			
Ex	_	Expansionsfaktor			
f	_	Deformationsfaktor der Ellipse / des Ellipsoids			
f	_	Elliptische Relaxationsfunktion des			
		$\zeta$ -f-Turbulenzmodells			
h	m	Höhe des Brennraums			
h	$\frac{J}{kg}$	Spezifische Enthalpie			
k	versch.	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante			
k	$\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^2}$	Spezifische turbulente kinetische Energie			
l	m	Länge			
Le	_	Lewis-Zahl			
M	$\frac{\text{kg}}{\text{mol}}$	Molmasse			
m	kg	Masse			
N	_	Iterationsvariable (natürliche Zahl)			
n	$\frac{1}{s}$	Motordrehzahl			
P	W	Leistung			
p	Pa	Druck			
Pe	_	Péclet-Zahl			
Q	J	Wärme			
r	m	Radius			

Formelzeichen					
Zeichen	Einheit	Bedeutung			
Re	_	Reynolds-Zahl			
S	m s	Brenngeschwindigkeit			
T	Κ	Temperatur			
t	S	Zeit			
u,v	$\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$	Strömungsgeschwindigkeit			
V	$\mathrm{m}^3$	Volumen			
x, y	m	Weg			
Y	kg kg	Massenanteil			
$lpha,eta,\gamma$	_	Parameter der Näherungsfunktion für			
		die laminare Brenngeschwindigkeit			
$\beta$	–, °KW	Kurbelwinkel im oberen Umkehrpunkt			
		des Kolbens			
δ	m	Dicke, Abstand			
ε	_	Kompressionsverhältnis			
ε	$\frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}^3}$	Dissipationsrate			
$\zeta$	_	Dimensionslose wandnormale Fluktuation der			
		Strömungsgeschwindigkeit des $\zeta$ -f-Modells			
$\eta$	kg m_s	Dynamische Viskosität			
$\eta$	_	Wirkungsgrad			
$\kappa$	_	Isentropenexponent			
$\lambda$	_	Luftverhältnis			
$\lambda$	$\frac{W}{m^2 K}$	Wärmeleitfähigkeit			
$\mu, u$	_	Parameter der Näherungsfunktion für			
		die thermische laminare Flammenfrontdicke			
$\chi,\psi$	_	Parameter der Näherungsfunktion für			
		die adiabatische Flammentemperatur			
ho	$\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$	Dichte			
$\Sigma$	$\frac{1}{m}$	Flammenfrontdichte			
au	S	Charakteristische Brennzeit			
$\Phi$	versch.	Beliebige Größe			
$\phi$	<u>kg</u> kg	Äquivalenzverhältnis			
arphi	_	Dimensionsloser Wandwärmestrom			
$\varphi$	–, °KW	Kurbelwinkel			

Indizes	
Zeichen	Bedeutung
0	Initialschritt des zonalen Modells
$1 \dots 4$	Schritte der Flammenausbreitungsrechnung
	des zonalen Modells
5	Schritt der Kolbenbewegungsrechnung des zonalen Modells
68	Schritte der Ladungswechselrechnung des zonalen Modells
ad	adiabatisch
AGR	Abgasrückführung
alt	vom vorherigen Zeitschritt
В	Bohrung
BR	brennraumseitig
CH	CH-Radikal
$CH_4$	Methan
D	Drossel
$\mathrm{FF}$	Flammenfront
G	Grenze
Grenz	Grenzwert
Н	Hilfsfunktion
h	Hub
HD	Hochdruck
$\mathrm{HT}$	Hochtemperatur
Ι	integral
i	indiziert
i	Zählvariable
Κ	Kolben
KA	kanalseitig
krit	kritisch
L	laminar
LB	Laufbuchse
m	Mittel
ND	Niederdruck
norm	Normbedingung
OH	OH-Radikal
OT	im oberen Totpunkt

Indizes				
Zeichen	Bedeutung			
Q	Quenchschicht / zum Quenchzeitpunkt			
RZ	Reaktionszone			
S	Spalt			
Т	Taylor			
Т	turbulent			
$^{\mathrm{th}}$	thermisch			
U	unverbrannt			
V	verbrannt			
W	Wand			
Ζ	Zylinder			
ZK	Zylinderkopf			
ZZP	zum Zündzeitpunkt			
Σ	gesamt			

Konstanten						
Zeichen	Wert	Bedeutung				
$H_{\rm U}$	$5 \cdot 10^7  \frac{\mathrm{J}}{\mathrm{kg}}$	Unterer Heizwert von Methan				
$l_{ m st}$	$17.2 \frac{\text{kg}}{\text{kg}}$	Spezifischer Mindestluftbedarf von Methan				
$R_{ m m}$	$8.314 \frac{J}{\text{mol K}}$	Universelle Gaskonstante				

mathematische Operatoren				
Zeichen	Bedeutung			
Δ	Differenz			
$\dot{\Box}$	zeitliche Ableitung			
	Reynolds-Mittelwert			
$\Box'$	Reynolds-Schwankungsgröße			
$\wedge$	Konjunktion ("und")			
$\lor$	Disjunktion ("oder")			

Abkürzungen					
Zeichen	Bedeutung				
AGR	Abgasrückführung				
AV	Auslassventil				
$\operatorname{CFD}$	Computational Fluid Dynamics				
$\operatorname{CFM}$	Coherent Flame Model				
$\mathrm{EV}$	Einlassventil				
FNR	Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V.				
FVV	Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e.V.				
GRI	Gas Research Institute				
GWP	Global Warming Potential				
ITV	Institut für Technische Verbrennung				
KW	Kurbelwinkel				
LIF	Laser-induzierte Fluoreszenz				
LOT	Oberer Totpunkt beim Ladungswechsel				
LVK	Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen				
NASA	National Aeronautics and Space Administration				
ОТ	Oberer Totpunkt				
PSR	Perfectly Stirred Reactor				
RANS	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen				
UHC	Unverbrannte Kohlenwasserstoffe				
UT	Unterer Totpunkt				
ZOT	Oberer Totpunkt nahe der Zündung				
ZZP	Zündzeitpunkt				

### 1. Einleitung

#### 1.1 Motivation

Die Verwendung von Erdgas als Brennstoff für Verbrennungskraftmaschinen hat gegenüber dem Einsatz flüssiger Kraftstoffe wie beispielsweise Benzin oder Dieselkraftstoff ökologisch den Vorteil, bei gleicher freigesetzter Energie weniger Kohlenstoffdioxid (CO<sub>2</sub>) zu verursachen. Die CO<sub>2</sub>-Einsparung von Erdgasmotoren gegenüber Benzin- und Dieselmotoren liegt ungefähr bei 20 bis 23 %. Grund dafür ist der vergleichsweise hohe Anteil von Wasserstoffatomen im Molekül des Hauptbestandteils Methan (CH<sub>4</sub>) und der damit relativ niedrige Anteil Kohlenstoff. Auch deshalb sind Erdgasmotoren als Großmotoren, Schiffsmotoren, in Blockheizkraftwerken und im Fahrzeugbereich von Interesse. Derzeit (2013, Prognose) werden in Deutschland etwa 7 650 stromerzeugende Biogasanlagen mit einer installierten elektrischen Leistung von 3 530 MW betrieben – im Jahr 2000 waren es nur 1 050 zumeist deutlich kleinere Anlagen mit einer Gesamtleistung von weniger als 40 MW [28]. Durch die Verwendung nachwachsender Rohstoffe arbeiten diese Kleinkraftwerke nahezu CO<sub>2</sub>-neutral.

Andererseits emittieren Gasmotoren typischerweise eine größere Menge unverbrannter Kohlenwasserstoffe (UHC), die zum größten Teil aus Methan bestehen, welches der Verbrennung entgeht. Die Klimaschädlichkeit (das sogenannte "Global Warming Potential", GWP) von Methan ist bei einem Betrachtungszeitraum von 100 Jahren 21-mal größer als die Wirkung derselben Menge Kohlendioxids [42]. Grundsätzlich stellt die Nachbehandlung des Abgases eine, wenngleich konstenintensive, Möglichkeit der Emissionsreduktion dar. Allerdings geht die UHC-Emission mit einer Minderung des Wirkungsgrades einher. Daher sind innermotorische Maßnahmen erstrebenswerter.

### 1.2 Zielsetzung

Um die Potentiale des erdgasbetriebenen Verbrennungsmotors besser ausschöpfen zu können, ist das Verständnis der Flammenausbreitung im Brennraum und der Flammenlöschvorgänge essentiell. Im Rahmen der hier dargelegten Arbeit werden diese Prozesse durch Verknüpfen verschiedener Modellierungsansätze – nämlich durch Simulation der Reaktionskinetik, durch numerische Strömungsund Verbrennungssimulation nach der Methode der Computational Fluid Dynamics (CFD) und durch quasidimensionale zonale Modelle – nachgebildet.

Die Verbrennungsmodellierung dient zum einen der Erhöhung des Verständnisses der innermotorischen Prozesse. Gleichzeitig wird sie zur Motorvorauslegung eingesetzt: Insbesondere mithilfe zonaler Zylindermodelle kann in kurzer Zeit der Einfluss einer Vielzahl variierter Betriebsparameter – bespielsweise der Last, der Gasart, der Stöchiometrie, der Inertgasbeimengung, der Aufladung, des Zündzeitpunkts, der Motordrehzahl, der Brennraumgeometrie und des Kompressionsverhältnisses – hinsichtlich relevanter Zielgrößen wie Leistung, Wirkungsgrad oder Emission bewertet werden. Hierbei ist die präzise Modellierung des Brennverlaufs, validiert durch Motorindizierdaten, von zentraler Bedeutung.

Die Untersuchungen in dieser Arbeit beschränken sich auf Gasmotoren (wobei das Erdgas vereinfachend als Methan angenommen wird) mit ottomotorischer Verbrennung und elektrischer Kerzenzündung im Hauptbrennraum. In der Praxis existieren noch andere Zündverfahren: Bei Vorkammermotoren wird ein über Schusskanäle mit dem Hauptbrennraum verbundenes kleines Volumen mithilfe einer zusätzlichen Brenngasversorgung in den zündfähigen Bereich gebracht. Innerhalb dieser Vorkammer findet eine Fremdzündung statt. Die Flamme tritt durch die Schusskanäle in den Hauptbrennraum über und ist in der Lage, auch recht magere Gemische zu entzünden.

Der Diesel-Gasmotor nutzt zur Entflammung des vorgemischten Gasgemisches im ungeteilten Brennraum eine Diesel-Einspritzung, die sich selbst entzündet. Der Diesel-Gasmotor arbeitet, anders als seine Bezeichnung vermuten lässt, nach dem Ottoprinzip. Jedoch lässt sich die typischerweise geringe Menge eingespritzten Dieselkraftstoffs (ca. 1 bis 15 % der Brennstoffmasse) auf bis zu 100 % erhöhen. Der Diesel-Gasmotor ist damit zweistofffähig [58].

Gas-Dieselmotoren unterscheiden sich nicht nur in der Zündart, sondern sogar im Brennverfahren, denn sie arbeiten nach dem Diesel-Prinzip: Sie sind luftverdichtend, selbstzündend und qualitätsgeregelt. In den kraftstoffrei verdichteten Brennraum wird Brenngas eingedüst, das sich durch zeitgleich oder nur wenig zeitversetzt eingespritzten Dieselkraftstoff entzündet [58].

#### 1.2.1 Simulation der Flammenausbreitung

Da im motorischen Brennraum turbulente Strömungsbedingungen vorherrschen, muss zur simulativen Darstellung der Flammenausbreitung neben dem thermischen Umsatz des vorliegenden Gasgemisches auch das Strömungsfeld beschrieben werden. Die Simulation des turbulenten Strömungsfeldes kann im Rahmen einer CFD-Simulation auf Basis Reynolds-gemittelter Navier-Stokes-Gleichungen (Reynolds Averaged Navier Stokes, RANS) durch Einbinden geeigneter Untermodelle für kleinskalige Wirbel geschehen. Die direkte Kopplung der Reaktionschemie in Form von Arrhenius-Gleichungen in den RANS-Ansatz ist jedoch nicht möglich, weil zum einen die in der RANS-Simulation gebildeten räumlich und zeitlich gemittelten Temperaturen generell ungeeignet sind, um die lokal hohen Temperaturgradienten im Bereich der Flammenfront abzubilden. Dies wäre notwendig, um den exponentiell von der Temperatur abhängigen Reaktionsraten gerecht zu werden. Zum anderen ist die Simulation der reaktionskinetischen Prozesse an sich schon rechenaufwändig, sodass eine Berücksichtigung der Reaktionskinetik innerhalb der CFD ohnehin nur im Rahmen stark reduzierter Reaktionsmechanismen erfolgen kann.

Beim sogenannten "Flamelet-Ansatz" ("Flamelet" bedeutet "Flämmchen") wird die gesamte Reaktionschemie einschließlich lokaler Diffusionsprozesse im Bereich der Flammenfront vom Strömungsfeld entkoppelt und als laminare Brenngeschwindigkeit  $s_{\rm L}$  zusammengefasst. Diese laminare Brenngeschwindigkeit hängt insbesondere von der Zusammensetzung des vorliegenden Gemisches, vom Druck und der Temperatur ab. Ferner ist auch die Streckung, das heißt die Krümmung des Flämmchens, relevant. In der Praxis wird die mikroskopische laminare Brenngeschwindigkeit in Form eines Kennfelds oder einer Näherungsfunktion in CFD-Verbrennungsmodelle eingebunden. RANS-geeignete Flamelet-Verbrennungsmodelle beschreiben die Topologie der als unendlich dünn angenommenen Flammenfront unter Einbringung des Strömungsfeldes. Sie entwickeln die mikroskopische laminare Brenngeschwindigkeit auf diese Weise zur makroskopischen turbulenten Brenngeschwindigkeit  $s_{\rm T}$ . Grundsätzlich besteht zwischen der sich mit der laminaren Brenngeschwindigkeit ausbreitenden mikroskopischen Flammenfrontfläche  $A_{\rm FF,T}$  und der sich mit der turbulenten Brenngeschwindigkeit ausbreitenden gemittelten Flammenfrontfläche  $A_{\rm FF}$  aufgrund der Massenkontinuität die Beziehung

$$s_{\rm L} A_{\rm FF,T} = s_{\rm T} \overline{A_{\rm FF}}, \tag{1.1}$$

vgl. Abb. 1.1. In Verbrennungsmotoren ist das Strömungsfeld sehr turbulent, sodass die makroskopische Brenngeschwindigkeit ein Vielfaches der laminaren Brenngeschwindigkeit beträgt.

Bei zonalen Zylindermodellen zur Beschreibung der innermotorischen Flammenausbreitung wird auf die lokale Auflösung des Strömungsfeldes bewusst verzichtet, um den Rechenaufwand drastisch zu senken. Auch hier kann der Flamelet-Ansatz angewandt werden, wenngleich die benötigten Parameter zur Beschreibung der Turbulenz (z. B. die turbulente kinetische Energie und das integrale Längenmaß der Wirbelstrukturen) nur von stark vereinfachenden Submodellen bereitgestellt werden. Beide Vorgehensweisen – die RANS-Modellierung und auch die zonalen Modelle – benötigen bei Verwendung des Flamelet-Ansatzes die laminare Brenngeschwindigkeit als fundamentale Größe.

### 1.2.2 Ursachen unverbrannter Kohlenwasserstoffe im Gasmotor

Die eingangs angesprochene Problematik der oft hohen Menge ausgestoßener unverbrannter Kohlenwasserstoffe bei Erdgasmotoren hat diverse innermotorische Ursachen. Als UHC-Quellen sind insbesondere bekannt:

- das Flammenlöschen an kalten Brennraumwänden (sogenanntes "Flammenquenchen"), vgl. [11], [21], [43], [67], [78],
- schmale Spalte des Brennraums, welche von der Flamme nicht oder nur teilweise erfasst werden, vgl. [1], [2], [8], [31], [50], [79], [87], [90], [91],
- die Absorption von Kohlenwasserstoffen in den Schmierölfilm während der Verdichtung mit der anschließenden Desorption des Gases während des Expansionshubs, sowie Ablagerungen an der Wand, vgl. [73], [82],
- direktes Überströmen unverbrannten Gasgemisches aus dem Einlass- in den Auslasskanal durch Ventilüberschneidung, vgl. [43],
- Gemischinhomogenität und Fehlzündungen, vgl. [73], [92],
- und gegebenenfalls lokales Flammenlöschen durch sehr hohe lokale Turbulenz, vgl. [23].

Die aufgeführten Quellen sind in Abb. 1.2 dargestellt, weitere werden in [38] genannt. Jede genannte Quelle kann kaum durch Messungen quantifiziert werden,



Abbildung 1.1.: Abstraktion einer realen Flamme (hier dargestellt ist das OH-LIF-Signal ("Laser-induzierte Fluoreszenz") einer Laserschnitt-Momentaufnahme durch eine Methan-Brenner-Flamme aus [17], [22]) durch den Flamelet-Ansatz zu einer unendlich dünnen, stark gefalteten Flammenfront (rot), die sich lokal mit der laminaren Brenngeschwindigkeit ausbreitet. Makroskopisch ergibt sich eine ungefaltete Flammenfront (grün), die sich mit einer entsprechend höheren turbulenten Brenngeschwindigkeit  $s_{\rm T}$  bewegt.



Abbildung 1.2.: Schematische Darstellung möglicher Quellen unverbrannter Kohlenwasserstoffe

da der hohe Druck, die hohe Temperatur und die geringe Zugänglichkeit des Brennraums direkte Messungen am Motor erschweren. Gerade deshalb ist für die Entwicklung emissionsärmerer Motoren die modellhafte Nachbildung der Ursachen unverbrannter Kohlenwasserstoffe erstrebenswert. In der hier dargelegten Arbeit wird auf das Flammenlöschen an kalten Brennraumwänden eingegangen. Im Rahmen eines Forschungsprojektes, das zu gleichen Teilen von der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) e. V. und der Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe (FNR) e. V. getragen und vom Institut für Technische Verbrennung (ITV) der Leibniz Universität Hannover in Kooperation mit dem Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen (LVK) der Technischen Universität München derzeit bearbeitet wird, werden auch weitere Ursachen von UHC-Emissionen bei Erd- und Biogas-Ottomotoren untersucht.

### 1.3 Vorgehensweise

Entsprechend der Abfolge der zu modellierenden Prozesse im Gasmotor wird im zweiten Kapitel die laminare Methan-Luft-Flamme mithilfe eindimensionaler reaktionskinetischer Rechnungen untersucht. Der Fokus liegt dabei in der Auswertung der für Flamelet-Modelle wichtigen laminaren Brenngeschwindigkeit. Die in der Literatur verfügbaren Werte der Brenngeschwindigkeit erfassen nur einen Teil der motorischen Bedingungen in Bezug auf den Druck, die Temperatur, die Stöchiometrie und Inertgasbeimengung. Aus den im Rahmen der vorliegenden Arbeit erzielten Ergebnissen für Hochdruck und Hochtemperatur wird ein halbempirischer Zusammenhang zwischen der laminaren Brenngeschwindigkeit eines stöchiometrischen Methan-Luft-Gemisches zum Druck, der Temperatur und der Inertgasbeimengung abgeleitet. In diesem Zusammenhang werden auch die thermische laminare Flammenfrontdicke und die adiabatische Flammentemperatur untersucht und Korrelationen erstellt.

Im dritten Kapitel wird ein Modell von Boust et al. [15] zur Beschreibung des frontalen Flammenlöschens an kalten Wänden vorgestellt. Das thermische Flammenlöschmodell bilanziert Wärmeströme in der wandnahen Gasschicht zum Zeitpunkt des Quenchens. Es werden im Rahmen dieser Arbeit vier eigene Varianten dieses thermischen Modells abgeleitet, um Flammenlöschabstände abzuschätzen. Zur Validierung dieser Flammenlöschmodelle werden CFD-Simulationen einer einfachen Geometrie, welche einer Konstant-Volumen-Kammer entspricht, herangezogen. Die so erzielten Ergebnisse der vier Varianten des Flammenlöschmodells werden einander gegenübergestellt und die belastbarste Variante wird mit Messungen von Labuda et al. [45] und mit reaktionskinetischen Simulationen von Westbrook et al. [88] verglichen.

Im vierten Kapitel wird der Aufbau eines zonalen Zylindermodells für einen Methangas-Motor schrittweise erläutert. Dieses Modell wurde in einer graphischen Programmiersprache realisiert und ist modular aufgebaut. Es beschreibt sowohl die innermotorische Flammenausbreitung unter Berücksichtigung der Deformation der Flammenfront durch die Kolbenhubbewegung als auch den Ladungswechsel, was die Modellierung der im Brennraum verbleibenden Restgase einschließt. In das zonale Modell fließen die Erkenntnisse bezüglich der laminaren Brenngeschwindigkeit aus den reaktionskinetischen Simulationen ein. Auch das Flammenlöschen an der kalten Brennraumwand wird im Rahmen von Submodellen eingebunden. Das zonale Modell wird mithilfe gemessener Indizierdaten validiert. Die ellipsoidförmig angenäherte Flammenfront, die detaillierte Berücksichtigung der Restgase und das implementierte Flammenlöschmodell stellen Neuheiten gegenüber in der Literatur verfügbaren zonalen Zylindermodellen dar.

Abschließend werden die erzielten Erkenntnisse zusammengefasst und kritisch betrachtet. Hieraus wird ein Ausblick für zukünftige Arbeiten abgeleitet.

Um die Anzahl inhaltlicher Sprünge gering zu halten, werden weitere Grundlagen und Stände der Forschung in den entsprechend betitelten Abschnitten zu Beginn der betroffenen Kapitel dargestellt.

# 2. Laminare Brenngeschwindigkeit von Methan-Luft-Gemischen

### 2.1 Grundlagen

Die laminare Brenngeschwindigkeit ist eine fundamentale Größe bei der physiknahen Berechnung von Flammenausbreitungen. In dieser Arbeit wird sie sowohl im Flammenlöschmodell, Kap. 3, wie auch im zonalen Verbrennungsmodell, Kap. 4, benötigt. Die laminare Brenngeschwindigkeit gibt die Geschwindigkeit des Voranschreitens der mikroskopischen Flammenfront an. In ihr werden die sich überlagernden Prozesse der Reaktionschemie, der Wärmefreisetzung und der Diffusionsprozesse zusammengefasst [68]. Sie hängt von dem Brennstoff (hier: Methan), dem Oxidanten (hier: Luftsauerstoff), dem Verbrennungsluftverhältnis, sowie dem Druck und der Temperatur des unverbrannten Gemisches ab. Ferner verringert Inertgasbeimengung, im Verbrennungsmotor realisiert durch Abgasrückführung (AGR), die laminare Brenngeschwindigkeit. Auch wird sie durch Flammenstreckung, das heißt die zeitliche Änderung der Flammenoberfläche, beeinträchtigt. Dies wird in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht untersucht.

Für die motorische Methanverbrennung sind laminare Brenngeschwindigkeiten für folgende Randbedingungen interessant:

- $p = 3 \dots 20$  MPa (entspricht  $p = 30 \dots 200$  bar)
- $T_{\rm U} = 400 \dots 1500 \,{\rm K}$
- $\phi = 0.4...1.1$  (entspricht  $\lambda = 2.5...0.9$ )

Im internationalen Raum wird zur Beschreibung der Stöchiometrie meistens anstelle des Luftverhältnisses  $\lambda$  dessen Kehrwert, das Äquivalenzverhältnis  $\phi$ , verwendet.

Es gibt grundsätzlich zwei Möglichkeiten, die laminare Brenngeschwindigkeit zu bestimmen: Zum einen kann sie gemessen werden. Hierzu werden in der Regel Konstant-Volumen-Kammern (Constant Volume Bombs) oder laminare Brenner, teilweise in Kombination mit optischen Messtechniken, verwendet. Alternativ kann die laminare Brenngeschwindigkeit durch numerische Simulation der Reaktionskinetik ermittelt werden. Dazu wird die Oxidation auf Basis der Elementarreaktionen für ein gegebenes Gemisch bei gegebenen Randbedingungen (Druck und Temperatur) simuliert. In beiden Fällen werden aus den Ergebnissen oft Näherungsfunktionen gebildet, die in einem gewissen Druck-, Temperatur- und Stöchiometriebereich gültig sind.

### 2.2 Stand der Forschung

#### 2.2.1 Messung

Die in der Literatur verfügbaren Messdaten der laminaren Brenngeschwindigkeiten beziehen sich zumeist nur auf atmosphärische Bedingungen, selten sind Messwerte über 1 MPa. Eine aktuelle Übersicht aus dem Jahre 2012 bieten Ranzi et al. [68], auch auf Andrews und Bradley [3] sowie Lämmle [46] sei hingewiesen. Die Tab. 2.1 fasst Literaturquellen für gemessene laminare Brenngeschwindigkeiten von Methan bei erhöhtem Druck zusammen, welche in Konstant-Volumen-Kammern ermittelt wurden. Lediglich Eberius und Kick [25] verwendeten einen Brenner mit konischem Flammenkegel, an dem sie Flammen oberhalb von 1 MPa jedoch nur bei fetter Verbrennung stabilisieren konnten.

Eine Formulierung von Metghalchi und Keck [57] für die Abhängigkeit der laminaren Brenngeschwindigkeit vom Druck, von der Temperatur und der

Autoren	Jahr	Druck	Temperatur	Stöchio-	AGR
		/ MPa	/ K	metrie $\phi$	/ %
Eberius et al. [25]	1992	0.110.0	413	1.11.4	0
Elia et al. $[26]$	2001	$0.075 \dots 7.0$	$298 \dots 550$	$0.8 \dots 1.2$	$0 \dots 15$
Gu et al. [33]	2000	$0.1 \dots 1.0$	$300 \dots 400$	$0.8 \dots 1.2$	0
Liao et al. $[49]$	2004	$0.05 \dots 0.15$	$300 \dots 400$	$0.7 \dots 1.2$	0
Rozenchan et al. [71]	2002	$0.1 \dots 6.0$	298	$0.8 \dots 1.3$	0

**Tabelle 2.1.:** Literaturübersicht zu Messdaten der laminaren Brenngeschwindigkeit von Methan bei erhöhtem Druck

AGR-Rate hat weite Verbreitung gefunden. Sie lautet

$$s_{\rm L} = s_{\rm L,norm} \left(1 - 2.1 \ Y_{\rm AGR}\right) \left(\frac{T}{T_{\rm norm}}\right)^{\alpha} \left(\frac{p}{p_{\rm norm}}\right)^{\beta}.$$
 (2.1)

Hierin ist  $s_{\text{L,norm}}$  die laminare Brenngeschwindigkeit bei Normbedingungen ( $p_{\text{norm}} = 0.1 \text{ MPa}, T_{\text{norm}} = 300 \text{ K}$ ), welche vom Kraftstoff und dem Äquivalenzverhältnis abhängt. Die Exponenten  $\alpha$  und  $\beta$  seien nach Metghalchi und Keck ebenfalls nur vom Kraftstoff und vom Äquivalenzverhältnis abhängig. Metghalchi und Keck verwendeten zur Messung der Brenngeschwindigkeiten eine Konstant-Volumen-Kammer mit Äquivalenzverhältnissen  $\phi = 0.8$  bis 1.5, Drücken p = 0.04 bis 5 MPa, Temperaturen T = 298 bis 700 K und AGR-Raten  $Y_{\text{AGR}} = 0$  bis 20 %. Als Kraftstoffe kamen Methanol, Isooktan und Indolene, ein Kraftstoffgemisch, zum Einsatz. Eine Methanflamme wurde aber nicht untersucht. Insofern sind die Relationen von Metghalchi und Keck für die gasmotorische Verbrennung nicht hilfreich.

#### 2.2.2 Numerische Simulation

Die Berechnung der laminaren Brenngeschwindigkeit kann auf Basis reaktionskinetischer Simulation erfolgen. In diesem Ansatz wird die globale Reaktionsgleichung des Methans,

$$CH_4 + 2 O_2 \rightarrow 2 H_2O + CO_2,$$
 (2.2)

und auftretende Nebenreaktionen – z. B. mit dem Luftstickstoff – in Elementarreaktionen zerlegt. Die Arrhenius-Gleichungen dieser Elementarreaktionen liegen der Simulation zugrunde. Sie geben die jeweiligen Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten k als Funktion der Temperatur an,

$$k = A T^b \cdot e^{-\frac{E_A}{R_{\rm m}T}}.$$
(2.3)

Hierin bezeichnen A und b Parameter,  $E_A$  die Aktivierungsenergie der Reaktion,  $R_m$  die universelle Gaskonstante und T die Temperatur. Die Reaktionsgeschwindigkeit ist exponentiell abhängig von der Temperatur. Hinzu kommt bei einigen Reaktionen eine (deutlich geringere) Temperaturabhängigkeit des präexponentiellen Faktors ( $A T^b$ ). A, b und die Aktivierungsenergie  $E_A$  sind die drei Parameter, welche die Kinetik einer Elementarreaktion eindeutig beschreiben und als Datensätze vieler Elementarreaktionen zu Reaktionsmechanismen gebündelt werden. Weitere Grundlagen zur Reaktionskinetik können Warnatz, Maas und Dibble [86] entnommen werden.

Bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen beschränkt man sich in der Praxis auf Elementarreaktionen bis hin zu einer definierten maximalen Moleküllänge. Dies begründet sich in der Annahme, dass längerkettige Moleküle eine untergeordnete Rolle bei der Reaktion spielen. Detaillierten Reaktionsmechanismen berücksichtigen möglichst viele oder sogar alle ("vollständige Mechanismen") Elementarreaktionen bis hin zu dieser Moleküllänge. Zu den detaillierten Mechanismen für die Methanverbrennung gehören beispielsweise der GRI-Mech 3.0 [75] mit 325 Elementarreaktionen der 53 wichtigsten Spezies (bis zu Molekülen mit maximal drei C-Atomen; bis zu Molekülen mit maximal zwei C-Atomen ist er vollständig), der LEEDS 1.5 [41] mit 175 Elementarreaktionen und 37 Spezies (maximal vier C-Atome) und ein von Ranzi et al. [68] entwickelter Mechanismus mit über 8 000 Elementarreaktionen und über 250 Spezies mit bis zu 16 C-Atomen.

Reduzierte Reaktionsmechanismen (eine für die Methanverbrennung relevante Auswahl wird von Slavinskaya et al. in [74] dargestellt, ferner sei auf Smooke [76] verwiesen) beschränken sich dagegen auf wenige, für das Ergebnis wichtige Reaktionen. Dadurch wird die Zahl der nötigen Reaktionsparameter und die Simulationszeit gesenkt. Gleichzeitig wird jedoch das Simulationsergebnis ungenauer und der Gültigkeitsbereich des Reaktionsmechanismus eingeschränkt. Aus diesen Gründen konzentriert sich diese Arbeit im Folgenden auf die detaillierte Reaktionskinetik.

Es existiert eine Vielzahl von Reaktionsmechanismen. Einen gewissen Standard für die detaillierte reaktionskinetische Simulation der Methanverbrennung bildet der öffentlich zugängliche C<sub>3</sub>-Mechanismus GRI-Mech 3.0. Er kann im Internet [75] eingesehen werden. Der Reaktionsmechanismus ist optimiert innerhalb eines Temperaturbereichs von 1000 bis 2500 K, eines Druckbereichs von 0.013 bis 1.0 MPa und innerhalb eines Äquivalenzverhältnisses  $\phi$  von 0.1 bis 5 [75]. Detaillierte Mechanismen basieren auf den physikalischen Grundlagenmodellen der chemischen Reaktion, sodass Ergebnisse innerhalb der angegebenen Grenzen recht präzise ausfallen. Zudem sind sie in einem gewissen Rahmen extrapolationsfähig.

Für die chemischen Reaktionen ist nicht allein der Reaktionsmechanismus von Bedeutung. Bereits 1883 teilten Mallard und Le Chatelier [52] den Verbrennungsvorgang in eine Vorwärmzone und eine Reaktionszone ein. Dabei dominierte in ihrer thermischen Theorie innerhalb der Vorwärmzone Wärmekonduktion bis zur Zündtemperatur. Zel'dovich und Frank-Kamenetskii [94] entwickelten 1938 hierauf aufbauend die Diffusionstheorie, nach der zusätzlich zur Konduktion auch Stoffdiffusionsprozesse für den Wärmetransport relevant sind.

Heute üblich sind detaillierte eindimensional ortsaufgelöste Berechnungen der diffusiven Transportvorgänge sowohl der Wärme als auch des Stofftransports der auftretenden chemischen Spezies. Die thermodynamischen Stoffeigenschaften werden beispielsweise mittels parametrisierter Polynome nach [16] und [54] berücksichtigt. Die Kombination der reaktionskinetischen Modelle mit denen der Wärme- und Stoffdiffusion wird in Programmpaketen wie Chemkin [72], Cosilab [70] oder Cantera [29] numerisch berechnet. Hierbei kommen implizite Lösungsverfahren [86] oder moderne Prädiktor-Korrektor-Methoden zum Einsatz, um die auftretenden sehr steifen chemischen Differentialgleichungen zu lösen.

Die Tab. 2.2 zeigt eine Auswahl von veröffentlichten Ergebnissen reaktionskinetischer Simulationen der laminaren Brenngeschwindigkeit von Methan bei hohem Druck. Die Arbeit von Marchionni et al. [53] stützt sich auf den GRI-Mech 3.0 unter Berücksichtigung von Realgaseffekten. Dabei stellte sich heraus, dass die Berücksichtigung des realen Gases insbesondere durch veränderte spezifische Wärmekapazitäten zu tieferen laminaren Brenngeschwindigkeiten führt als bei Annahme idealen Gases. Bis 4.0 MPa liegt der Unterschied unter 6%, erhöht sich jedoch bis 15.0 MPa auf 17%. Die Simulationen von Marchionni et al. decken zwar einen sehr weiten Druckbereich ab, jedoch nur bei Raumtemperatur und ohne Inertgasbeimengung. Erheblich relevanter für die Untersuchung von Verbrennungsmotoren ist daher die Arbeit von Bougrine

Autoren	Jahr	Druck	Temperatur	Stöchio-	AGR
		/ MPa	/ K	metrie $\phi$	/ %
Bougrine et al. [14]	2011	0.111	300900	0.61.3	030
Göttgens et al. $[30]$	1992	$0.1 \dots 4.0$	298800	$0.4 \dots 1.0$	0
Marchionni et al. [53]	2007	$0.1 \dots 15$	298	0.81.2	0
Müller et al. $[59]$	1997	$0.1 \dots 4.0$	298800	0.61.0	0
Ranzi et al. [68]	2012	$0.1 \dots 2.0$	300	0.61.35	0
Witt et al. $[89]$	2000	0.13.0	$298 \dots 823$	$0.5 \dots 1.3$	0

**Tabelle 2.2.:** Literaturübersicht zu reaktionskinetischen Simulationen der lami-naren Brenngeschwindigkeit von Methan bei erhöhtem Druck

et al. [14]. Mithilfe des GRI-Mech3.0wurden hierin Methanflammen bis $11\,{\rm MPa}$ und  $900\,{\rm K}$  simuliert.

Andere genannte Autoren (Müller, Bollig und Peters [59] sowie Göttgens, Mauß und Peters [30] mit dem in [62] veröffentlichten detaillierten Mechanismus; Ranzi et al. [68] mit einem eigenen detaillierten Mechanismus; Witt und Griebel [89] mit dem GRI-Mech 3.0) untersuchten die Methanverbrennung numerisch nur bis zu moderaten Drücken von maximal 4.0 MPa und ohne Berücksichtigung von Inertgasbeimengung.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass in der Literatur gemessene Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit von Methan bis ungefähr p = 7 MPa,  $T_{\rm U} = 550$  K und  $\phi = 0.8$  existieren. Ergebnisse reaktionskinetischer Simulationen reichen bis p = 11 MPa,  $T_{\rm U} = 900$  K und  $\phi = 0.6$ . Für die Simulation der motorischen Methangasverbrennung müssen alle drei Bereiche erweitert werden. Gleichzeitig sind Inertgasbeimengungen insbesondere für stöchiometrisch betriebene Motoren von Bedeutung. Daher werden im Folgenden Ergebnisse selbst durchgeführter reaktionskinetischer Simulationen vorgestellt.

## 2.3 Reaktionskinetische Simulation für Methan-Luft-Gemische bei hohen Drücken und Temperaturen

Zur eindimensionalen Simulation der isobaren Verbrennung von Methan-Luft-Gemischen wird in dieser Arbeit der detaillierte Reaktionsmechanismus GRI-Mech 3.0 [75] mit den zugehörigen thermodynamischen Daten in das Simulationstool "Cosilab" (Rotexo [70]) eingebunden. Erste Simulationen wurden im Rahmen einer Studienarbeit durch Hillenbrand [39] durchgeführt. Sie werden im Bereich p = 0.1 bis 20.0 MPa,  $T_{\rm U} = 300$  bis 1500 K und  $\phi = 0.4$  bis 1.1 ergänzt. Für den stöchiometrischen Fall werden zudem Inertgasbeimengungen von 0 bis 30 Massenprozent untersucht, wobei das Inertgas stets zu 75 Massenprozent aus Stickstoff (N<sub>2</sub>) und zu 25 Massenprozent aus Kohlenstoffdioxid (CO<sub>2</sub>) besteht. Es konnten nicht für alle Punkte des genannten Kennfeldes Ergebnisse generiert werden: Insbesondere bei hoher Temperatur und gleichzeitig erhöhtem Druck, sowie im Fall magerer Flammen sind einige Rechnungen nicht konvergiert.

#### 2.3.1 Laminare Brenngeschwindigkeit

Zur Validierung sind in Abb. 2.1 ausgewählte eigene Simulationsergebnisse der ungestreckten laminaren Brenngeschwindigkeit den Näherungsfunktionen verschiedener Autoren gegenübergestellt. Der Gültigkeitsbereich jener Näherungsfunktionen ist teilweise stark eingeschränkt, sodass der Vergleich nicht im gesamten Umfang des generierten Kennfeldes erfolgt. Qualitativ zeigen die Funktionen aller Autoren eine sinkende laminare Brenngeschwindigkeit bei Druckerhöhung und eine steigende laminare Brenngeschwindigkeit bei Temperaturerhöhung. Quantitativ überschätzen Müller et al. offensichtlich den Druckeinfluss. Magere Gemische brennen langsamer. Dies wird von allen Autoren auch quantitativ vergleichbar wiedergegeben.

Während es sich im Fall der Autoren Bougrine et al. [14], Müller, Bollig und Peters [59] und Witt und Griebel [89] um Näherungsfunktionen auf Basis numerischer Ergebnisse handelt, spiegelt die Approximation von Elia, Ulinski und Metghalchi [26] Ergebnisse aus Messungen an einer Konstant-Volumen-Kammer wider. Die gemessenen Brenngeschwindigkeiten von Elia et al. liegen bei höherem Druck leicht unter den hier gezeigten Simulationswerten, insgesamt stimmen die Ergebnisse jedoch gut überein.

Die Abb. 2.2 zeigt die simulierten laminaren Brenngeschwindigkeiten als Funktion des Druckes für einen deutlich weiteren Wertebereich. Auch der Einfluss von Abgasrückführung (Inertgasbeimengung) ist abgebildet. Es stellt sich heraus, dass der Druckeinfluss bei nur leicht erhöhtem Druck bis ungefähr 5 MPa zunächst groß ist. Im Hochdruckbereich spielt er dann kaum mehr eine Rolle – die laminare Brenngeschwindigkeit nähert sich einem stationärem Endwert. Grund für die Reduktion der Druckabhängigkeit von  $s_{\rm L}$ im Hochdruckbereich ist die Annäherung der Globalreaktion an ein Geschwindigkeitsgesetz erster Ordnung, da die Konzentration der Stoßpartner so hoch ist, dass nicht mehr die stoßabhängige Aktivierung des Moleküls den dominierenden Einfluss auf die Reaktionsgeschwindigkeit hat (vgl. [86]). Einen deutlichen Hinweis für diese Interpretation bietet Abb. 2.3: Die Graphen weisen bei ungefähr 5 MPa einen Wechsel der Steigung ihres sonst linearen Verlaufs auf. Aufgrund der logarithmischen Skalierung entspricht dieser lineare Verlauf einer Potenz der Druckabhängigkeit.

In Abb. 2.4 sind dieselben laminaren Brenngeschwindigkeiten als Funktion der Temperatur des unverbrannten Gasgemisches zu sehen. Mit höherer Temperatur steigt generell auch die laminare Brenngeschwindigkeit. Der Einfluss



**Abbildung 2.1.:** Laminare Brenngeschwindigkeit von Methan-Luft-Gemischen aus reaktionskinetischer Simulation im Bereich 0.1 bis 11 MPa für 300 und 500 K zusammen mit Näherungsfunktionen verschiedener Autoren [14], [26], [59], [89] für stöchiometrische (oben) und magere Verbrennung (unten).

der Temperatur ist stets groß, da Reaktionsraten stark temperaturabhängig sind.

Die Abb. 2.5 zeigt schließlich die laminare Brenngeschwindigkeit als Funktion des Äquivalenzverhältnisses. Diese Abhängigkeit verläuft anders als die zuvor genannten Zusammenhänge als Einzige nicht monoton. In der Regel ist die Brenngeschwindigkeit bei stöchiometrischer Verbrennung am höchsten, bei hohem Druck ist dies bei leicht fetter Verbrennung der Fall.

### 2.3.2 Näherungsfunktion für die laminare Brenngeschwindigkeit

Die Untersuchung der numerisch ermittelten Brenngeschwindigkeiten zeigte, dass der semi-empirische Ansatz nach Metghalchi und Keck, Gl. (2.1), im Fall einer stöchiometrischen Methan-Luft-Verbrennung die Druck- und Temperaturabhängigkeit im Hochdruck-Hochtemperatur-Bereich qualitativ unpräzise wiedergibt. Am besten werden der Temperaturexponent  $\alpha = 1.75$  und der



Abbildung 2.2.: Laminare Brenngeschwindigkeit von Methan-Luft-Gemischen aus reaktionskinetischer Simulation im Bereich 0.1 bis 20 MPa für 300 und 1100 K, dargestellt für verschiedene Äquivalenzverhältnisse (oben) und Abgasrückführ-Raten (unten).



**Abbildung 2.3.:** Doppelt-logarithmische Darstellung der laminaren Brenngeschwindigkeit von Methan-Luft-Gemischen aus reaktionskinetischer Simulation im Bereich 0.1 bis 20 MPa für 300 K.



Abbildung 2.4.: Laminare Brenngeschwindigkeit von Methan-Luft-Gemischen aus reaktionskinetischer Simulation im Bereich 300 bis 1100 K für 0.1 und 10 MPa, dargestellt für verschiedene Äquivalenzverhältnisse (oben) und Abgasrückführ-Raten (unten).



**Abbildung 2.5.:** Laminare Brenngeschwindigkeit von Methan-Luft-Gemischen aus reaktionskinetischer Simulation im Bereich  $\phi = 0.4$  bis 1.1 für 300 und 1100 K, dargestellt für verschiedene Drücke.
Druckexponent  $\beta = -0.34$  gewählt, allerdings wird insbesondere der Einfluss der Temperatur unterschätzt. Die naheliegende Vermutung, die laminare Brenngeschwindigkeit hänge exponentiell von der Temperatur ab, überschätzt den Temperatureinfluss jedoch. Die Kombination beider Abhängigkeitsformen führt zu der im Rahmen dieser Arbeit entwickelten Näherungsfunktion

$$s_{\rm L} = s_{\rm L,norm} \cdot (1 - \gamma Y_{\rm AGR}) \\ \cdot \left(\frac{T}{T_{\rm norm}}\right)^{\alpha_1 + \alpha_3} \cdot e^{\alpha_2 \frac{T - T_{\rm norm}}{T_{\rm norm}}} \cdot \left(\frac{p}{p_{\rm norm}}\right)^{\beta_1} \cdot e^{\beta_2 \frac{p - p_{\rm norm}}{p_{\rm norm}}}.$$
(2.4)

Die Zerlegung der Temperatur- beziehungsweise der Druckabhängigkeit in eine Monomform und eine Exponentialform erfolgt hier durch Aufteilung der Exponenten  $\alpha$  zu  $\alpha_1$  und  $\alpha_2$  beziehungsweise  $\beta$  zu  $\beta_1$  und  $\beta_2$ . Allerdings hängt die Gewichtung bei der Aufteilung des Temperaturexponenten  $\alpha$  wiederum vom Druck ab (für die Aufteilung des Druckexponenten  $\beta$  existiert eine Temperaturabhängigkeit). Zudem nimmt mit steigendem Druck der Temperatureinfluss insgesamt zu, was durch den Additivterm  $\alpha_3$  berücksichtigt wird. Durch Optimierung anhand der vier Kanten der zweidimensionalen *p*-*T*-Abhängigkeit von 0.1 bis 20.0 MPa und 300 bis 1100 K ergibt sich

$$\alpha_1 = \alpha_{11} \left( 1 - \alpha_{12} \ln \left( \frac{p}{p_{\text{norm}}} \right) \right), \tag{2.5}$$

$$\alpha_2 = \ln\left(\left(\frac{T_{\rm HT}}{T_{\rm norm}}\right)^{-\alpha_1} \cdot \frac{s_{\rm L,HT}}{s_{\rm L,norm}}\right) \cdot \frac{T_{\rm norm}}{(T_{\rm HT} - T_{\rm norm})} , \qquad (2.6)$$

$$\alpha_3 = \alpha_{31} \ln \left(\frac{p}{p_{\text{norm}}}\right),\tag{2.7}$$

$$\beta_1 = \beta_{11} \left( 1 - \beta_{12} \ln \left( \frac{T}{T_{\text{norm}}} \right) \right), \qquad (2.8)$$

$$\beta_2 = \ln\left(\left(\frac{p_{\rm HD}}{p_{\rm norm}}\right)^{-\beta_1} \cdot \frac{s_{\rm L,HD}}{s_{\rm L,norm}}\right) \cdot \frac{p_{\rm norm}}{(p_{\rm HD} - p_{\rm norm})} , \qquad (2.9)$$

$$\gamma = \gamma_1 \left( 1 - \gamma_2 \frac{T - T_{\text{norm}}}{T_{\text{norm}}} \right) \cdot \left( 1 - \gamma_3 Y_{\text{AGR}} \right), \qquad (2.10)$$

mit den in Tab. 2.3 aufgeführten konstanten Parametern. Der Gültigkeitsbereich der Näherungsfunktion der laminaren Brenngeschwindigkeit für stöchiometrische Methan-Luftgemische liegt für den Druck bei 0.1 bis 20.0 MPa und für die Temperatur des unverbrannten Gemisches bei 300 bis 1500 K. Trotz der hohen Dynamik der Näherungsfunktion für die laminare Brenngeschwindigkeit von 0.065 bis 10.7  $\frac{m}{s}$  beträgt die maximale Abweichung zu den numerisch

Parameter	Wert	Parameter	Wert	Parameter	Wert
$\alpha_{11}$	1.2	$\gamma_1$	3.2	$T_{\rm norm}$	$300\mathrm{K}$
$\alpha_{12}$	0.07	$\gamma_2$	0.16	$p_{ m norm}$	$0.1\mathrm{MPa}$
$\alpha_{31}$	0.047	$\gamma_3$	0.5	$s_{ m L,norm}$	$0.381  \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$
$\beta_{11}$	-0.47	$T_{\rm HT}$	$1100\mathrm{K}$	$s_{ m L,HT}$	$4.822  \frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}}$
$\beta_{12}$	0.19	$p_{ m HD}$	$20\mathrm{MPa}$	$s_{ m L,HD}$	$0.0648  \frac{\text{m}}{\text{s}}$

**Tabelle 2.3.:** Parameter der N\u00e4herungsfunktion f\u00fcr die laminare Brenngeschwindigkeit



**Abbildung 2.6.:** Laminare Brenngeschwindigkeit von stöchiometrischen Methan-Luft-Gemischen aus reaktionskinetischen Simulationen im Bereich 0.1 bis 20 MPa für verschiedene Temperaturen zusammen mit einer eigenen Näherungsfunktion.



Abbildung 2.7.: Flächige Darstellung der Näherungsfunktion für die laminare Brenngeschwindigkeit bei stöchiometrischer Verbrennung, mit 0, 10, 20 und 30 % Abgasrückführung (von oben nach unten). Linien gleicher laminarer Brenngeschwindigkeit sind gestrichelt dargestellt.

ermittelten Brenngeschwindigkeiten ohne Abgasrückführung stets weniger als 9%, vgl. Abb. 2.6. Die Abweichung wird bei vorhandener Abgasrückführung teilweise deutlich größer, insbesondere bei Drücken unter 5 MPa und bei mehr als 20% Inertgas-Anteil: Bei 20% AGR erreicht die Näherungsfunktion im ungünstigsten Fall eine Abweichung von 33%. Abb. 2.7 zeigt die Approximation für den gesamten Gültigkeitsbereich als Funktion des Drucks und der Temperatur (in flächiger Darstellung) für AGR-Raten von 0 bis 30%.

Eine Erweiterung zur Berücksichtigung des Äquivalenzverhältnisses brächte eine weitere Dimension inklusive ihrer wechselseitigen Einflüsse zur Druck-, Temperatur- und AGR-Raten-Abhängigkeit mit sich. Eine solche vierdimensionale Näherungsfunktion mit hinreichender Genauigkeit im gesamten motorisch relevanten Bereich wäre sehr umfangreich (vgl. z. B. [14] mit Polynomen bis zur fünften Ordnung) und wird daher hier nicht entwickelt. Der Vorteil gegenüber einem Kennfeld ist dann ohnehin geringer, weil zu umfangreichen Formelsystemen die physikalische Zusammenhänge nicht mehr angesehen werden können und Polynome hoher Grade außerhalb des Gültigkeitsbereichs meistens oszillieren. Tabellen der numerisch ermittelten laminaren Brenngeschwindigkeit befinden sich im Anhang im Kap. A.

#### 2.3.3 Näherungsfunktion für die thermische laminare Flammenfrontdicke

Die Abb. 2.8 zeigt schematisch das Temperaturprofil einer laminaren Flammenfront für ein Methan-Luft-Gemisch. Anhand des Temperaturverlaufs wird die thermische laminare Flammenfrontdicke  $\delta_{L,th}$  definiert: Eine mögliche Definition setzt sie gleich mit dem Abstand zwischen der 5 %- und der 95 %-Marke des Temperaturprofils. Anhand automatisiert ausgewerteter numerischer Simulationen zeigte sich, dass die thermische laminare Flammenfrontdicke proportional zu  $(p/p_{norm})^{-0.8}$  skaliert (die tabellierten Ergebnisse der numerischen Simulationen befinden sich im Kap. B des Anhangs). Bei atmosphärischem Druck ist der Einfluss der Temperatur unerheblich, bei hohem Druck verkleinert eine Temperaturerhöhung die Flammenfrontdicke. Ursache hierfür sind vermutlich die Dissoziations- und Rekombinationsreaktionen (Reaktionen dritter Ordnung, also mit mindestens drei beteiligten Stoßpartnern). Bei hohem Druck ist für deren Reaktionsgeschwindigkeit nicht mehr die von der Konzentration der Stoßpartner abhängige Aktivierung des Moleküls geschwindigkeitsbestimmend, sondern der temperaturabhängige Zerfall des aktivierten Teilchens, vgl.



Abbildung 2.8.: Einteilung des Temperaturprofils einer laminare Flammenfront basierend auf Theorien von Mallard und Le Chatelier [52] sowie Zel'dovich und Frank-Kamenetskii [94]. Oben dargestellt ist die Definition der laminaren Flammenfrontdicke anhand der Temperaturkurve. Unten zu sehen sind zwei Definitionen der Reaktionszonendicke anhand des OH- beziehungsweise des CH-Radikals [23].

Parameter	Wert	Parameter	Wert
$\mu_1$	0.225	$T_{\rm norm}$	$300\mathrm{K}$
$\mu_2$	-0.6	$p_{ m norm}$	$0.1\mathrm{MPa}$
ν	-0.8	$\delta_{ m L,th,norm}$	$1.0\mathrm{mm}$

**Tabelle 2.4.:** Parameter der Näherungsfunktion für die thermische laminare Flammenfrontdicke

[86]. Für den Fall eines stöchiometrischen Methan-Luft-Gemisches ohne weitere Inertgasbeimengung beschreibt die im Rahmen dieser Arbeit hergeleitete Korrelation

$$\delta_{\rm L,th} = \delta_{\rm L,th,norm} \cdot \left( \mu_1 \frac{T - T_{\rm norm}}{T_{\rm norm}} \left( \left( \frac{p}{p_{\rm norm}} \right)^{\mu_2} - 1 \right) + 1 \right) \cdot \left( \frac{p}{p_{\rm norm}} \right)^{\nu} (2.11)$$

mit den in Tab. 2.4 angegebenen Parametern die thermische laminare Flammenfrontdicke. Sie gilt im Bereich 0.1 bis 20 MPa und 300 bis 1500 K und ist in Abb. 2.9 dargestellt.

Die Dicke der Reaktionszone kann anhand von Radikalkonzentrationen abgeschätzt werden. Dinkelacker et al. [23] definierten eine Reaktionszonenbreite für das CH-Radikal  $\delta_{\rm CH}$  als Abstand zwischen je einem Punkt auf der steigenden und auf der fallenden Flanke des CH-Konzentrationsprofils, welche beim halben Konzentrationsmaximum des Radikals liegen, vgl. Abb. 2.8 unten. Im Fall des OH-Radikals wählten sie für  $\delta_{\rm OH}$  die Schnittpunkte der maximalen Steigungstangente des OH-Konzentrationsprofils mit der Nulllinie einerseits und dem Maximalwert andererseits. Diese Definitionen von  $\delta_{\rm CH}$  und  $\delta_{\rm OH}$ wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit ebenfalls zur automatisierten Auswertung umgesetzt. Hierbei zeigt sich, dass im Fall einer stöchiometrischen Methan-Luft-Flamme weitestgehend unabhängig von Druck und Temperatur  $\delta_{\rm OH} \approx 1.5 \, \delta_{\rm CH}$  und  $\delta_{\rm OH} \approx 0.2 \, \delta_{\rm L,th}$  gilt. Auch bei leicht mageren Flammen und bei geringer Inertgas-Beimengung treffen diese Zusammenhänge zu.

## 2.3.4 Näherungsfunktion für die adiabatische Flammentemperatur

Als adiabatische Flammentemperatur bezeichnet man die theoretische Maximaltemperatur des verbrannten Gases bei isobarer Verbrennung. Sie wird erreicht, wenn das reagierende Gas keine Wärme abführt. Bei rechnerischer Abschätzung muss die während der Verbrennung signifikante Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität berücksichtigt werden. Zudem liegt das Reaktionsgleichgewicht nicht vollständig auf der Produktseite, was insbesondere bei hohen Temperaturen bedeutsam ist. Mithilfe der Ergebnisse reaktionskinetischer Simulationen wurde in dieser Arbeit für die adiabatische Flammentemperatur im Gültigkeitsbereich 0.1 bis 20 MPa und 300 bis 1500 K für den Fall der stöchiometrischen Verbrennung eines Methan-Luft-Gemisches ohne weitere Inertgasbeimengung die Korrelation

$$T_{\rm ad} = T + \chi_1 \left(\frac{p}{p_{\rm norm}}\right)^{\chi_2} \left(T - T_{\rm norm}\right) + T_{\rm Grenz} \left(1 - \psi \left(\frac{p}{p_{\rm norm}}\right)^{-1}\right) \quad (2.12)$$

aufgestellt. Die zugehörigen Parameter sind in Tab. 2.5 aufgeführt. Die Abb. 2.10 zeigt diese Näherungsfunktion. Der durch die Exothermie verursachte Temperaturanstieg während der Verbrennung liegt bei Normbedingung bei 1680 K. Bei höheren Temperaturen steigt die Wärmekapazität des Gases und das Reaktionsgleichgewicht verschiebt sich in Richtung der Eduktseite, sodass bei einer Temperatur für das unverbrannte Gas von 1500 K der Temperaturanstieg durch die Reaktion nur noch etwa 1000 K beträgt. In einem geringerem Maße ist die adiabatische Flammentemperatur auch vom Druck abhängig, weil diese die Kollisionswahrscheinlichkeit von Reaktionspartnern beeinträchtigt. Bei Drücken unterhalb von 0.5 MPa ist der dargestellte Druckeinfluss jedoch etwas überbewertet, weil hier einige Reaktionen vergleichsweise langsam verlaufen, weshalb das berechnete Temperaturprofil auf der verbrannten Seite nicht ganz seinen stationären Endwert erreicht hat.

Im Anhang dieser Arbeit befinden sich auch für die adiabatische Flammentemperatur Tabellenwerte im Kap. C.

Parameter	Wert	Parameter	Wert
$\chi_1$	-0.567	$\psi$	0.16
$\chi_2$	-0.094	$T_{\rm Grenz}$	$2005\mathrm{K}$

 

 Tabelle 2.5.: Parameter der N\u00e4herungsfunktion f\u00fcr die adiabatische Flammentemperatur



Abbildung 2.9.: Flächige Darstellung der Näherungsfunktion für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei stöchiometrischer Verbrennung ohne Abgasrückführung. Bis 50 µm sind Linien gleicher Flammenfrontdicke gestrichelt dargestellt.



Abbildung 2.10.: Flächige Darstellung der Näherungsfunktion für die adiabatische Flammentemperatur bei stöchiometrischer Verbrennung ohne Abgasrückführung.

# 3. Modellierung des Flammenlöschens an den Brennraumwänden

# 3.1 Grundlagen

In diesem Kapitel wird ein thermisches Modell zur Beschreibung des Flammenlöschens an den Brennraumwänden, sogenanntes Quenchen, vorgestellt. Die Brennraumwand beeinflusst in zweierlei Hinsicht das angrenzende Gas: Zum einen wird innerhalb der Strömungsgrenzschicht das turbulente Strömungsfeld des Fluids mit geringerem Abstand zur Wand zunehmend laminar. Daher können laminare Flammenlöschmodelle in der Regel auch für turbulente Strömungsfelder in Gasmotoren angewendet werden. Zum anderen reduziert sich innerhalb der thermischen Grenzschicht die Temperatur des anliegenden Gases (im Fall einer vergleichsweise kalten Brennraumwand). Es findet insbesondere bei Annäherung der Flammenfront eine hohe Wärmeabfuhr in die Wand statt. Hierdurch wird die Temperatur der sich ausbreitenden Flammenfront gesenkt, sodass die Reaktionsraten gemindert werden. Schließlich wird ein so hoher Teil der freigesetzten Energie abgeführt, dass notwendige Vorreaktionen nicht mehr stattfinden und die Flamme nahe der Wand erlischt ohne diese zu berühren. Bei Gasmotoren geschieht dies typischerweise in einem Abstand von 20 bis 100 µm (für Methan: Labuda et al. [45]; für Propan: Lavoie [47]), abhängig vom Auftreffwinkel der Flammenfront, von der Wandtemperatur sowie der Stöchiometrie, der Inertgasbeimengung, dem Druck und der Temperatur der Zylinderfüllung. Niedrigere Wandtemperaturen erhöhen den Wärmeverlust und somit den Quenchabstand. Untersuchungen von Sotton et al. [77] zeigen, dass die Wandtemperatur während des Quenchens nur um ungefähr 2K ansteigt. Magere Gemische und hohe Inertgasanteile führen aufgrund der geringeren Wärmefreisetzung zu größeren Quenchabständen. Druck und Temperatur der Zylinderfüllung sind im Kolbenmotor voneinander abhängig. Hier zeigt sich, dass eine höhere Kompression den Quenchabstand reduziert, weil die zugleich erhöhte laminare Brenngeschwindigkeit und die höhere Dichte des umgesetzten

Gases eine stärkere Wärmefreisetzung der Flammenfront verursachen.

Das Methan in der Gasschicht, das der Hauptverbrennung durch Wandquenchen entgeht, führt jedoch nicht unmittelbar zur UHC-Emission. Vielmehr unterliegt es Diffusionsprozessen in die angrenzende heiße Gasmasse und insbesondere dort der Nachoxidation. Welcher Anteil des unverbrannten Kraftstoffs auf diese Weise oxidiert, wurde und wird kontrovers diskutiert (Blint und Bechtel [11], Daniel [21], Popp und Baum [67]) und bedarf weiterer Untersuchungen. Die Nachoxidation ist jedoch nicht Gegenstand der hier dargestellten Flammenlöschmodelle.

#### 3.1.1 Chemischer Ansatz

Zur simulativen Untersuchung des Flammenlöschens an kalten Wänden können die detaillierten reaktionskinetischen Berechnungen angewandt werden, wie sie im vorherigen Kapitel erläutert wurden. Die kalte Wand tritt in solchen eindimensionalen Simulationen als Randbedingung auf der Seite unverbrannter Gasmasse auf und beeinträchtigt so die Umsetzungsraten der berücksichtigten Elementarreaktionen. Nachteil dieser Herangehensweise ist der vergleichsweise hohe Aufwand, weil das Simulationsergebnis stets auf eine Wandtemperatur, einen Gasdruck und eine Gaszusammensetzung beschränkt ist, weshalb gegebenenfalls eine Vielzahl solcher Berechnungen durchgeführt werden muss. Westbrook et al. [88] leiteten aus ihren Ergebnissen reaktionskinetischer Simulationen für ein stöchiometrisches Methan-Luft-Gemisch bei einer Wandtemperatur von  $T_{\rm W} = 300 \,{\rm K}$  für den Druckbereich von 0.1 bis 4 MPa folgenden Zusammenhang für den Quenchabstand  $\delta_{\rm Q}$  bei frontalem Auftreffen der Flammenfront ab:

$$\frac{\delta_{\rm Q}}{\rm m} = 0.32 \cdot \left(\frac{p}{\rm Pa}\right)^{-0.56}.\tag{3.1}$$

#### 3.1.2 Thermischer Ansatz

Eine alternative Herangehensweise stellt die Bilanzierung der beim Flammenlöschen auftretenden wandnahen Wärmeströme dar. Solche thermischen Modelle sind allgemeingültig in Bezug auf den Brennstoff, die Stöchiometrie, Inertgasanteile, den Gasdruck und die Wandtemperatur. Allerdings bedürfen sie eines Abgleichs mit den belastbareren Ergebnissen reaktionskinetischer Simulationen oder mit Messungen. Zudem muss die laminare Brenngeschwindigkeit des untersuchten Gemisches bekannt sein, was insbesondere bei motorischen Bedingungen nicht stets gegeben ist.

Dennoch eignen sich diese thermischen Modelle besonders für die Kombination mit CFD-Simulationen oder zonalen Modellen des Brennraums von Kolbenmotoren. Daher wird im Folgenden ein thermisches Flammenlöschmodell für laminare Flammen nach Boust et al. [15] beschrieben. Von diesem Modell werden unterschiedliche Varianten entwickelt und im Anschluss an eine CFD-Simulation angewandt. Eine Bewertung erfolgt durch den Abgleich mit reaktionskinetischen Simulationen von Westbrook et al. [88] und mit experimentellen Ergebnissen von Labuda et al. [45]. Im Kap. 4 wird das thermische Flammenlöschmodell schließlich in ein zonales Zylindermodell eingebunden.

## 3.2 Frontales Flammenlöschen

Boust et al. [15] veröffentlichten ein thermisches Modell für das frontale Löschen laminarer Flammen an kalten Wänden, dargestellt in Abb. 3.1. In diesem Modell erlischt die Flammenfront, sobald der Wandwärmestrom den Wert des Wärmestroms durch die Schicht unverbrannten Gases erreicht,

$$\dot{Q}_{\rm W} = \dot{Q}_{\rm U}.\tag{3.2}$$

Der Wandwärmestrom  $\dot{Q}_{\rm W}$  bezeichnet den vom Temperaturfeld der wandnahen Grenzschicht verursachten Energieverlust in die Wand. Er hängt nicht unmittelbar vom Wandmaterial ab, sondern von dessen Temperatur, und ist nicht identisch mit dem konduktiven Wärmetransport durch die feste Wand. Die Wandwärmestromdichte (also der flächenbezogene Wandwärmestrom) erreicht ihr Maximum im Augenblick des Flammenlöschens, wenn die Flamme der Wand am nächsten ist. Die Wärmefreisetzung der Flamme beträgt im Falle stöchiometrischer und magerer Gemische zu diesem Zeitpunkt

$$\dot{Q}_{\Sigma} = Y_{\rm CH_4} \cdot H_{\rm U} \cdot s_{\rm L} \cdot \rho_{\rm U,Q} \cdot A_{\rm Q}, \qquad (3.3)$$

mit dem Kraftstoffmassenanteil  $Y_{\text{CH}_4}$  und dem unteren Heizwert des Methans  $H_{\text{U}}$ . Ferner bezeichnet  $s_{\text{L}}$  die laminare Brenngeschwindigkeit,  $\rho_{\text{U},\text{Q}}$  die Dichte des unverbrannten Gases nahe der Wand und  $A_{\text{Q}}$  die gequenchte Fläche. Dieser freigesetzte Wärmestrom wird in einen Wärmestrom  $\dot{Q}_{\text{FF}}$ , welcher in der Flammenfront verbleibt und die Temperatur der Reaktionszone erhöht, und in einen Wärmestrom  $\dot{Q}_{\text{U}}$  durch die Vorwärmzone und unverbrannte Gasschicht

aufgeteilt. Boust et al. betrachten zum Zeitpunkt des Flammenlöschens die thermische Grenzschicht der Zylinderwand vereint mit dem Temperaturanstieg der Flammenfront zu einem linearen Anstieg, siehe Abb. 3.2. In diesem Fall ist der konduktive Wärmestrom durch die unverbrannte Gasschicht [15]

$$\dot{Q}_{\rm U} = \frac{\lambda_{\rm Q} \left( T_{\rm V} - T_{\rm W} \right) A_{\rm Q}}{\delta_{\rm Q}},\tag{3.4}$$

worin  $\lambda_{\rm Q}$  die Wärmeleitfähigkeit der gequenchten Gasschicht und  $\delta_{\rm Q}$  den Quenchabstand der Flamme zur Wand bezeichnet.  $T_{\rm V}$  und  $T_{\rm W}$  sind die Temperatur des verbrannten Gases beziehungsweise der Wand. Gl. (3.4) aufgelöst zum Quenchabstand ergibt unter Berücksichtigung der Gl. (3.2)

$$\delta_{\mathbf{Q}} = \frac{\lambda_{\mathbf{Q}} \left( T_{\mathbf{V}} - T_{\mathbf{W}} \right) A_{\mathbf{Q}}}{\dot{Q}_{\mathbf{W}}}.$$
(3.5)

Zur Abschätzung des Quenchabstands muss also der Wandwärmestrom und die vom Quenchen betroffene Wandfläche, oder alternativ die Wandwärmestromdichte  $\dot{Q}_{\rm W}/A_{\rm Q}$  zum Quenchzeitpunkt bekannt sein.

#### 3.3 Seitliches Flammenlöschen

Die Flammenfront trifft die Zylinderwand nicht unbedingt frontal. Seitliches Flammenlöschen kann zu höheren Quenchabständen führen. In der Regel ist der Quenchabstand geringer als die Dicke der Grenzschicht, sodass die Flamme gestreckt wird, weil die sich vermindernde Turbulenz unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Flamme zur Folge hat, vgl. Abb. 3.3. Hinzu kommt, dass die laminare Brenngeschwindigkeit innerhalb der thermischen Grenzschicht kleiner ist. Bellenoue et al. [9] zeigten, dass der Quenchabstand im Fall seitlichen Löschens von stöchiometrischen Methanflammen an einer nichtpolierten Stahlwand (bei Drücken bis maximal 0.15 MPa) 1.25- bis 1.45-mal über dem frontalen Löschabstand liegt. Im Fall eines Propan-Luft-Gemisches fallen die Ergebnisse ähnlich aus [44]. Messungen der C<sub>2</sub>-Spezieskonzentration von Cleary und Farrell [19] dagegen zeigen für stöchiometrische Methanflammen bei atmosphärischem Druck, dass zwischen frontalem Flammenlöschen und seitlichem Flammenlöschen kein wesentlicher Unterschied der Quenchabstände besteht. Bei höher gewählten Wandtemperaturen liegt der frontale Quenchabstand in ihren Messungen sogar über dem der seitlichen Konfiguration.



Abbildung 3.1.: Modellvorstellung des Flammenlöschens bei frontalem Wandauftreffen nach Boust et al. [15]



Abbildung 3.2.: Temperaturverlauf im Rahmen der Modellvorstellung des Flammenlöschens bei frontalem Wandauftreffen nach Boust et al. [15]



**Abbildung 3.3.:** Modellvorstellung des seitlichen Flammenlöschens an einer Wand nach [15]



Abbildung 3.4.: Modellvorstellung des Flammenlöschens am oder im Spalt

# 3.4 Flammenlöschen im Spalt

Im Brennraum eines Motors ist auch das Flammenlöschen in Spalten relevant, wie zum Beispiel im Feuerstegspalt zwischen Kolben und Zylinderlaufbuchse, oder im Spalt an der Zylinderkopfdichtung zwischen Laufbuchse und Zylinderkopf. Dies wurde in der Master-Arbeit von Betageri [10] untersucht. Für Flammenlöschen in Spalten gilt, dass zunächst eine Fallunterscheidung durchzuführen ist, siehe Abb. 3.4: Ist die Spaltbreite  $\delta_S$  groß im Vergleich zum Quenchabstand für eine Zwei-Wände-Konfiguration, so tritt die Flammenfront in den Spalt ein und erlischt jeweils seitlich. Ist der Spalt schmaler, überlagern sich die beiden thermischen Grenzschichten der Wände so stark, dass kein Flammeneintritt in den Spalt stattfindet. Dann bleibt das gesamte Spaltvolumen unverbrannt. Ein praktikabler Ansatz zur Feststellung, welcher Fall vorliegt, wurde von Lavoie in [47] vorgeschlagen. Seine experimentellen Befunde legen nahe, dass die Flamme in den Spalt eintritt, wenn der Spalt mehr als fünf mal so breit wie der Quenchabstand für die frontale Konfiguration ist.

Die Fälle des seitlichen Flammenlöschens und des Flammenlöschens im Spalt werden in dieser Arbeit jedoch nicht weiter vertieft. Stattdessen wird das thermische Modell des frontalen Flammenlöschens erweitert, indem im folgenden Abschnitt vier Varianten hiervon untersucht werden.

# 3.5 Entwicklung eines Flammenlöschmodells

Aus den Modellierungsvorschlägen von Boust et al. [15] zum frontalen Flammenlöschen werden vier neue Varianten zur Abschätzung des Quenchabstands abgeleitet. Für einen quantitativen Vergleich werden Messungen des Quenchabstands von Labuda et al. [45] herangezogen, die sie in einer mit einem stöchiometrischen Methan-Luft-Gemisch gefüllten Brennkammer konstanten Volumens vornahmen. In der vorliegenden Arbeit werden CFD-Simulationen für eine identische Geometrie durchgeführt, was zuvor teilweise in der Bachelorarbeit von Butzbach [18] und in einer gemeinsamen Publikation [69] veröffentlicht wurde. Dazu werden die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen in Kombination mit Verbrennungsmodellen gelöst. Die Ausgabewerte der CFD-Simulation dienen als Eingangswerte für die vier Berechnungsvarianten. Ziel ist, das geeignetste Flammenlöschmodell zur Abschätzung des Quenchabstandes bei motorischen Bedingungen zu finden.

#### 3.5.1 Beschreibung der CFD-Simulation

Die Brennkammer von Labuda et al. verfügt über eine quadratische Grundfläche von  $50 \text{ mm} \times 50 \text{ mm}$ , ihre Höhe beträgt 30 mm. Der Zündort liegt exakt in der Mitte dieses Volumens.

Das strukturierte CFD-Rechennetz nutzt die Symmetrie der Brennkammer in allen drei Raumrichtungen. Daher hat es Kantenlängen von  $25 \text{ mm} \times 25 \text{ mm} \times 15 \text{ mm}$  und der Zündort befindet sich in der Ecke, in der sich alle drei Symmetrieebenen treffen. Abb. 3.5 zeigt die Position zweier Flächen auf den Brennraumwänden, an denen der Verlauf der durch die CFD-Simulation ermittelten Wandwärmestromdichten überwacht wird: Die Oberfläche "Sensor" ist an dem Ort platziert, an dem Labuda et al. einen elektrischen Sensor anbrachten, mit dem sie den Quenchabstand bestimmten. Die Oberfläche "Wandsegment" ist eine größere Fläche, die dem Zündort fern ist, um Flammenquenchen bei fortgeschrittener Verbrennung und daher größeren Drücken zu untersuchen.

Das Rechennetz besteht aus  $32 \times 32 \times 24$  quaderförmigen Zellen; ihre Größe beträgt ungefähr  $0.8 \text{ mm} \times 0.8 \text{ mm} \times 0.6 \text{ mm}$ . Dieses Netz wird in der Nähe der Wand zweifach verfeinert, wie in Abb. 3.6 zu sehen ist. Dies führt insgesamt zu etwa 305 000 Zellen. Die Netzunabhängigkeit wurde durch einen Vergleich mit einem Netz aus 1.35 Millionen Zellen bestätigt.

Die CFD-Simulationen werden mit dem Programm "AVL Fire" [6] für eine Zeitspanne von 30 ms durchgeführt. Eine Studie der Zeitschrittweite ergab, dass während des Verbrennungsprozesses (4.8 bis 25.2 ms) die Zeitschrittweite auf  $\Delta t = 0.15$  ms reduziert werden sollte. Vor und nach der Verbrennung sind  $\Delta t = 0.3$  ms ausreichend. Insgesamt werden 169 Zeitschritte simuliert.

Zur Darstellung der Turbulenz wird das  $\zeta$ -f-Turbulenzmodell (eine Variante des drei Erhaltungsgleichungen umfassenden  $\overline{v^2}$ -f-Modells [24]) angewandt. In diesem Turbulenzmodell wird die wandnormale Geschwindigkeitsfluktuation der Strömung  $\overline{v^2}$  mit der turbulenten kinetischen Energie k normalisiert. Insbesondere verbessert die elliptische Relaxationsfunktion f die Vorhersagegenauigkeit in Wandnähe im Vergleich zum weitverbreiteten k- $\varepsilon$ -Turbulenzmodell, welches auf nur zwei Erhaltungsgleichungen basiert und isotrope Wirbel annimmt. Details des  $\zeta$ -f-Turbulenzmodells sind in [34] und [66] zu finden. Die turbulente kinetische Energie zu Beginn der Simulation wird auf einen sehr geringen Wert von  $k = 10^{-4} \text{ m}^2 \text{ s}^{-2}$  festgelegt.

Eine Variante des Coherent Flame Model (CFM) wird für die Verbrennungs-

modellierung eingesetzt. Das Coherent Flame Model folgt dem Flamelet-Ansatz und beschreibt die Topologie der Flammenfront mithilfe der sogenannten Flammenfrontdichte  $\Sigma$ . Details zu diesem Verbrennungsmodell können [20] und [65] entnommen werden. Die laminare Brenngeschwindigkeit des stöchiometrischen Methan-Luft-Gemisches wird in jeder Simulation auf einen konstanten Wert festgesetzt. Diese Werte werden aus zuvor mit dem Programm "Cosilab" [70] durchgeführten reaktionskinetischen Simulationen abgeleitet, welche im Kap. 2 beschrieben wurden. Der Zündzeitpunkt ist gegenüber dem Beginn der CFD-Simulation um 5 ms verzögert, um ein vollentwickeltes Temperaturprofil in der Wandgrenzschicht zu gewährleisten. Diese Wandgrenzschicht wird mithilfe des Compound-Wall-Treatment-Modells von Popovac und Hanjalić modelliert, das die Integration der Grundgleichungen des  $\zeta$ -f-Turbulenzmodells zur Wand mit den sogenannten generalisierten Wandfunktionen kombiniert (für Details sei auf [66] verwiesen). Die Wände selbst werden als isotherm mit der konstanten Temperatur von 293 K betrachtet, wie es dem experimentellen Aufbau von Labuda et al. entspricht.

Es werden CFD-Simulationen für verschiedene Initialdrücke durchgeführt (0.3, 0.6, 0.9, 1.8, 2.7, 3.6 und 4.5 MPa), wohingegen die Initialtemperatur der Kammerfüllung stets 820 K beträgt. Die von der CFD-Simulation bestimmte Wärmefreisetzung und der Druckverlauf sind für den Initialdruck von 0.3 MPa in Abb. 3.7 dargestellt.

Darüber hinaus zeigt das nebenstehende Diagramm, Abb. 3.8, die von der CFD-Simulation ermittelten Wandwärmestromdichten für denselben Initialdruck. In den Verläufen ist zu Beginn der Simulation ein Abfall der Wandwärmestromdichten erkennbar. Dieser wird durch den Aufbau der thermischen Grenzschicht an den Wänden verursacht. Der Aufbauprozess ist Folge des Temperaturunterschieds zwischen der homogen initialisierten Temperatur der Kammerfüllung und der Wandtemperatur, und dauert an, bis sich ein thermisches Gleichgewicht an den Wänden eingestellt hat. Dieser Prozess ist zum Zeitpunkt des untersuchten Flammenlöschens abgeschlossen.

Die Wandwärmestromdichte der beobachteten Fläche "Sensor" weist ein klares Maximum bei t = 11 ms, also 6 ms nach der Zündung, auf. Die Flamme erlischt zu diesem Zeitpunkt an der "Sensor"-Fläche. Der anschließende Abfall der Wärmestromdichte begründet sich auch hier im Aufbau einer neuen thermischen Grenzschicht. Die für das "Wandsegment" überwachte Wärmestromdichte erreicht ihr Maximum später, aufgrund der größeren Entfernung dieser Fläche zum Zündort. Außerdem fällt das Maximum flacher aus, weil die



Abbildung 3.5.: Die CFD-Simulationsdomäne



Abbildung 3.6.: Das Rechennetz wird nahe der Wand zweimal verfeinert.



**Abbildung 3.7.:** Wärmefreisetzung und Brennraumdruck der CFD-Simulation für den Initialdruck von 0.3 MPa



Abbildung 3.8.: Wandwärmestromdichten der Flächen "Sensor" und "Wandsegment" der CFD-Simulation für den Initialdruck von 0.3 MPa

Flamme auf diese deutlich größere Fläche innerhalb einer breiteren Zeitspanne trifft.

# 3.5.2 Modellierung des Flammenlöschens auf Basis der CFD-Simulation

Wenn die Flamme sich den kalten Kammerwänden nähert, wird sie in einem bestimmten Abstand aufgrund von Wärmeverlust erlöschen. Zur Abschätzung dieses Abstands wird der im Abschn. 3.2 beschriebene thermische Modellansatz von Boust et al. [15] angewandt. Hierzu wird Gl. (3.5) für frontales Flammenquenchen verwendet:

$$\delta_{\mathbf{Q}} = \frac{\lambda_{\mathbf{Q}} \left( T_{\mathbf{V}} - T_{\mathbf{W}} \right) A_{\mathbf{Q}}}{\dot{Q}_{\mathbf{W}}}.$$
(3.6)

Die Temperatur des verbrannten Gases nahe der Wand wird mithilfe des Kraftstoffmassenanteils  $Y_{\text{CH}_4}$ , dem unteren Heizwert  $H_{\text{U}}$  und der spezifischen isobaren Wärmekapazität  $c_{\text{P}}$  aus der Temperatur der wandnahen unverbrannten Gasmasse  $T_{\text{U},\text{Q}}$  abgeschätzt:

$$T_{\rm V} = T_{\rm U,Q} + \frac{Y_{\rm CH_4} \cdot H_{\rm U}}{c_{\rm P}}.$$
 (3.7)

Die Temperatur der wandnahen unverbrannten Gasmasse wird dabei mit der Wandtemperatur gleichgesetzt,

$$T_{\rm U,Q} = T_{\rm W}.\tag{3.8}$$

In den folgenden Abschnitten wird die Gleichung für frontales Flammenquenchen, Gl. (3.6), mit vier unterschiedlichen Annahmen für den Wandwärmestrom zum Quenchzeitpunkt  $\dot{Q}_W$  umgesetzt. Der Druck zum Zeitpunkt des Flammenquenchens reicht von 0.6 bis 16 MPa. Der von der CFD-Simulation bereitgestellte Verlauf der Wandwärmestromdichte wird in allen vier Fällen zur Bestimmung des Zeitpunkts des Flammenlöschens an der entsprechenden Wand herangezogen. Der Spitzenwert dieses Verlaufs wird allerdings nur in der ersten und dritten vorgestellten Variante direkt zur Berechnung des Wandwärmestroms eingesetzt.

#### 3.5.3 Variante I: Wandwärmestrom aus der CFD-Simulation

In dem ersten Berechnungsansatz wird der Quenchabstand mittels der im CFD-Software-Paket implementierten Berechnung der lokalen Wandwärmestromdichte bestimmt. Das hinterlegte Modell des Wandeinflusses ist in [66] beschrieben. Die so gewonnenen Ergebnisse der Gl. (3.6) sind in Abb. 3.9 für den genannten Quenchdruckbereich abgebildet. Beide untersuchten Flächen zeigen eine Abnahme des Quenchabstands mit zunehmenden Druck. Die modellierten Quenchabstände der beiden untersuchten Oberflächen unterscheiden sich je nach der Größe der Flächen. Sie liegen im Bereich von 90 bis 198 µm beziehungsweise von 113 bis 353 µm. Unterschiedliche Quenchabstände für die untersuchten Flächen entsprechen nicht der Erwartung, dies wird später diskutiert.

#### 3.5.4 Variante II: Wandwärmestrom aus der Wärmefreisetzung

Bei motorischen Bedingungen ist die Grenzschicht zumeist nicht vollständig laminar, was die Brenngeschwindigkeit und somit die Wärmefreisetzung in Gl. (3.3) erhöht. Gleichzeitig ist die Annahme rein konduktiver Wärmeübertragung durch die unverbrannte Gasschicht in Gl. (3.4) nicht zutreffend. Um zumindest die zweite Annahme zu relativieren, wird die dimensionslose Péclet-Zahl eingeführt, die allgemein als Quotient aus Konvektion zu Diffusion definiert ist. Im Augenblick des Flammenlöschens wird diese Péclet-Zahl  $Pe_{\rm Q}$  herangezogen, um eine erhöhte Wärmeübertragung durch die Schicht gequenchten Gases  $\dot{Q}_{\rm U}$  aufgrund von Wärmekonvektion abzuschätzen.  $Pe_{\rm Q}$  ist bei vollständiger Laminarität null, andernfalls ist sie größer. Die Gleichung für den Quenchabstand ändert sich nun zu

$$\delta_{\mathbf{Q}} = \frac{\left(Pe_{\mathbf{Q}}+1\right) \cdot \lambda_{\mathbf{Q}} \left(T_{\mathbf{V}}-T_{\mathbf{W}}\right) A_{\mathbf{Q}}}{\dot{Q}_{\mathbf{W}}}.$$
(3.9)

Um diese Gleichung von der flächenabhängigen Wärmestromdichte der CFD-Simulation zu entkoppeln, wird in einem ersten Versuch der Wandwärmeverlust mit der Wärmefreisetzung der Flamme gleichgesetzt,  $\dot{Q}_{W} = \dot{Q}_{\Sigma}$ . Dies führt



**Abbildung 3.9.:** Variante I der Berechnung der Quenchabstände mithilfe der maximalen Wandwärmestromdichte aus der CFD-Simulation



Abbildung 3.10.: Variante II der Berechnung der Quenchabstände mithilfe des maximalen Wandwärmestroms abgeleitet aus der Wärmefreisetzung der Flammenfront für verschiedene Péclet-Zahlen



Abbildung 3.11.: Variante III der Berechnung der Quenchabstände mithilfe der maximalen Wandwärmestromdichte aus der CFD-Simulation in Kombination mit einer Péclet-Zahl-Abschätzung



Abbildung 3.12.: Variante IV der Berechnung der Quenchabstände mithilfe des maximalen Wandwärmestroms abgeleitet aus der Wärmefreisetzung der Flammenfront und einem dimensionslosem Wandwärmestrom

zur flächenunabhängigen Formulierung

$$\delta_{\rm Q} = \frac{(Pe_{\rm Q} + 1) \cdot \lambda_{\rm Q} (T_{\rm V} - T_{\rm W})}{Y_{\rm CH_4} H_{\rm U} s_{\rm L} \rho_{\rm U,Q}}.$$
(3.10)

Abb. 3.10 zeigt das Ergebnis dieser Gleichung für den laminaren Fall ( $Pe_Q = 0$ ) und für den von Lavoie [47] vorgeschlagenen Wert  $Pe_Q = 7$ . Das Vermeiden der Wärmestromdichten der CFD-Simulation führt zu Quenchabständen, welche unabhängig von der untersuchten Fläche sind. Dieser zweite Berechnungsansatz liefert geringere Werte im laminaren Fall (6 bis 78 µm) als im leicht turbulenten Fall mit  $Pe_Q = 7$  (50 bis 620 µm).

#### 3.5.5 Variante III: Wandwärmestrom aus der CFD-Simulation mit Berechnung der Péclet-Zahl

Die Gl. (3.9) wird in dieser dritten Variante mit der Wandwärmestromdichte der CFD-Simulation kombiniert. Dabei wird der Vorschlag von Boust et al. [15] aufgegriffen, die Péclet-Zahl als Verhältnis von Wärmefreisetzung der Flamme zum Wandwärmestrom zu interpretieren:

$$(Pe_{\rm Q}+1) = \frac{\dot{Q}_{\Sigma}}{\dot{Q}_{\rm W}}.$$
(3.11)

Im Gegensatz zum Berechnungsansatz II liefert Gl. (3.11) für jeden Betriebspunkt unterschiedliche Werte für die Péclet-Zahl. Einsetzen der Gl. (3.11) in Gl. (3.9) führt zu einer Gleichung für den Quenchabstand, der quadratisch vom Wandwärmestrom abhängt:

$$\delta_{\rm Q} = \lambda_{\rm Q} \left( T_{\rm V} - T_{\rm W} \right) A_{\rm Q} \frac{\dot{Q}_{\Sigma}}{\dot{Q}_{\rm W}^2} \,. \tag{3.12}$$

Abb. 3.11 verdeutlicht, dass diese Abhängigkeit ein großer Nachteil ist, wenn der Wandwärmestrom zum Quenchzeitpunkt nicht genau bekannt ist. Dieser dritte Berechnungsansatz liefert deutlich größere Quenchabstände als die anderen Varianten, und es wird keine Minderung mit zunehmenden Druck erzielt.

#### 3.5.6 Variante IV: Wandwärmestrom aus dem konstantem dimensionslosem Wandwärmestrom

Das Verhältnis aus dem Wärmestrom in die Wand zur Wärmefreisetzung der Flamme zum Quenchzeitpunkt

$$\varphi_{\rm Q} = \frac{\dot{Q}_{\rm W}}{\dot{Q}_{\Sigma}} \tag{3.13}$$

wird "dimensionsloser Wandwärmestrom" genannt. Die Messungen von Labuda et al. ergaben Werte von  $\varphi_{\rm Q} = 0.2$ , unabhängig vom Druck innerhalb eines Bereichs von 2 bis 15 MPa [45]. Sotton et al. schlagen  $\varphi_{\rm Q} = 0.2$  bis 0.3 [77], Vosen et al.  $\varphi_{\rm Q} = 0.3$  bis 0.35 [85] und Lu et al.  $\varphi_{\rm Q} = 0.35$  bis 0.4 [51] bei geringerem Druck vor. Das bedeutet, dass die Methanflamme erlischt, wenn sie 20 bis 40 % ihrer freigesetzten Wärme in die Wand verliert. Diese Erkenntnis wird in der vierten Berechnungsvariante aufgegriffen. Das Einsetzen der Gl. (3.13) in Gl. (3.6) liefert

$$\delta_{\mathbf{Q}} = \frac{\lambda_{\mathbf{Q}} \left( T_{\mathbf{V}} - T_{\mathbf{W}} \right)}{\varphi_{\mathbf{Q}} \cdot Y_{\mathbf{CH}_4} \ H_{\mathbf{U}} \ s_{\mathbf{L}} \ \rho_{\mathbf{U},\mathbf{Q}}}.$$
(3.14)

Das Ergebnis dieser Gleichung ist in Abb. 3.12 für  $\varphi_{\rm Q} = 0.2$  und  $\varphi_{\rm Q} = 0.4$  dargestellt. Die Quenchabstände reichen von 31 bis 390 µm beziehungsweise von 16 bis 195 µm. Das qualitative Verhalten dieser Variante ist identisch zu dem der Variante II, in welchem die Péclet-Zahl eingeführt wurde, weil ihre Gleichungen des Quenchabstands mathematisch gleich sind. Die Absolutwerte sind dieselben, wenn  $\varphi_{\rm Q} = (Pe_{\rm Q} + 1)^{-1}$  ist, vgl. [15].

#### 3.5.7 Ergebnisse und Diskussion

Die Berechnungsvarianten I und III des thermischen Flammenlöschmodells basieren auf den Wandwärmestromdichten der CFD-Simulation. Die Spitzenwerte der Wandwärmestromdichten sind zum Zeitpunkt des Flammenlöschens zu niedrig, weil die zeitliche Auflösung der RANS-Simulation nicht ausreicht, um dieses kurzzeitige Phänomen wiederzugeben. Diese Tatsache wird mit größerer betrachteter Fläche verstärkt, wie aus Abb. 3.8 hervorgeht, insbesondere bei hohen Drücken. Die niedrigen Wandwärmestromdichten der CFD-Simulation ergeben große Quenchabstände. In der Berechnungsvariante III, in der das Quadrat der Wandwärmestromdichte gebildet wird, verursacht dies zudem eine qualitativ falsche Druckabhängigkeit.

Ein Vergleich der Quenchabstände aller vier Berechnungsvarianten zeigt, dass die Variante IV mit  $\varphi_{\rm Q} = 0.4$  (dies entspricht der mathematisch gleichen Variante II mit  $Pe_{\rm Q} = 1.5$ ) am besten mit experimentellen Untersuchungen von Labuda et al. [45] übereinstimmt. Abb. 3.13 zeigt diese beste Lösung und die Korrelation, welche Westbrook et al. [88] mithilfe reaktionskinetischer Simulationen fanden, Gl. (3.1). Diese reaktionskinetischen Simulationen führten Westbrook et al. im Druckbereich von 0.1 bis 4 MPa durch, die Darstellung ist daher im Hochdruckbereich extrapoliert.

In allen drei Fällen verringert sich der Quenchabstand mit zunehmendem Druck. Die Ergebnisse des thermischen Modells decken sich mit denen der reaktionskinetischen Simulationen im niedrigeren Druckbereich bis 4 MPa. Bei höherem Druck liefert das thermische Modell kleinere Quenchabstände, die jedoch den Messungen von Labuda et al. entsprechen. Ein großer Vorteil des thermischen Modellierungsansatzes gegenüber der Korrelation von Westbrook et al. ist dessen Universalität bezüglich der Wandtemperatur, dem gewählten Brennstoff und dessen Stöchiometrie.

Bei hohem Brennraumdruck ist der Quenchabstand zwar geringer, nichtsdestotrotz befindet sich bei hohem Druck in der gequenchten Gasschicht mehr unverbrannte Kraftstoffmasse aufgrund der höheren Gasdichte. Ob daher Flammenlöschen im späteren Verlauf des Expansionstaktes (also bei niedrigem Druck) bei einem Verbrennungsmotor Wirkungsgrad- und Emissionsvorteile gegenüber frühem Flammenlöschen bietet, ist fraglich. Erlischt die Flamme frühzeitig im Expansionstakt, stehen dem unverbrannt bleibenden Gas mehr



**Abbildung 3.13.:** Die Berechnungsvariante ( $\varphi_{\rm Q} = 0.4 / Pe_{\rm Q} = 1.5$ ) für den Quenchabstand, welche am besten mit Messungen von Labuda et al. [45] und mit reaktionskinetischen Simulationen von Westbrook et al. [88] übereinstimmt.



**Abbildung 3.14.:** Flammenquenchabstand als Funktion der Wandtemperatur berechnet mithilfe des thermischen Modells für 0.6 MPa.

Zeit und – erheblich relevanter – höhere Temperaturen zur Nachoxidation zur Verfügung. Daher werden an dieser Stelle zukünftig reaktionskinetische Untersuchungen notwendig.

Einfacher zu beurteilen ist die Abhängigkeit des Quenchabstands zur Wandtemperatur. Sie fließt im thermischen Modell einerseits direkt als Temperaturdifferenz ein, wie aus Gl. (3.14) hervorgeht, da sie für die Wärmeübertragung durch die Quenchschicht relevant ist. Andererseits beeinträchtigt die Wandtemperatur die Wärmeleitfähigkeit der wandnahen Gasschicht, wie auch die im Nenner stehende Dichte und die laminare Brenngeschwindigkeit. Insgesamt zeigt sich erwartungsgemäß mit steigender Wandtemperatur eine Abnahme des Quenchabstands, Abb. 3.14. Im Sinne eines möglichst vollständigen Ausbrands in Wandnähe (und auch im Sinne einer vollständigeren Nachoxidation) sind daher möglichst heiße Brennraumwände wünschenswert.

# 4. Zonale Modellierung der gasmotorischen Verbrennung

# 4.1 Grundlagen

Die Simulation innermotorischer Verbrennungsvorgänge kann in unterschiedlichen Detaillierungsgraden geschehen. Merker und Schwarz [55] haben die benötigte Rechenzeit verschiedener Modellierungsansätze gegenüber ihrer Modelltiefe aufgetragen, Abb. 4.1.

Im thermodynamischen Modell mit einer typischen Rechenzeit von Sekundenbruchteilen wird der Brennraum als homogen betrachtet. Die Kraftstoffumsetzung findet innerhalb eines einzigen Rechenschritts oder mithilfe empirischer Brennverläufe statt. Solche Modelle werden beispielsweise eingesetzt, wenn der Brennraum als Komponente in einer Luftpfadsimulation implementiert wird oder wenn die Verbrennung in Echtzeit in einem Motorsteuergerät berechnet werden soll.



Abbildung 4.1.: Gegenüberstellung verschiedener Modellierungsansätze der innermotorischen Verbrennung nach Merker und Schwarz [55]

Die instationäre dreidimensionale Strömungssimulation (3D-CFD) mit eingebetteten Verbrennungsmodellen bietet die höchste Detaillierungsstufe. Die Rechendauer einer einzigen Verbrennung von der Zündung bis zum Erlöschen der Flamme liegt zumeist im Bereich einiger Stunden bis Tage. Solche Simulationen finden in der Forschung und Entwicklung Anwendung, wenn lokale innermotorische Vorgänge beleuchtet werden sollen.

Zonale Modelle befinden sich den Rechenaufwand und die Modelltiefe betreffend zwischen dem thermodynamischen und dem CFD-Ansatz. Einige Modellteile haben einen beschreibenden Charakter, weswegen sich die Bezeichnung "phänomenologische Modelle" etabliert hat. Bei solchen Ansätzen wird der Brennraum in eine begrenzte Zahl von Volumina unterteilt, innerhalb der die beschreibenden Zustandsgrößen wie Druck, Temperatur und Gemischzusammensetzung als homogen betrachtet werden. Anders als in der CFD-Simulation werden bei den zonalen Modellen die Randflächen der Kontrollvolumina zuweilen verschoben. So kann zum Beispiel der Brennraum eines Ottomotors in eine Zone verbrannter und eine Zone unverbrannter Gasmasse unterteilt werden, welche die sich ausbreitende Flammenfront trennt [55].

Zonale Modelle bilden einen Kompromiss aus Modelltiefe und Rechenaufwand, der üblicherweise im Bereich weniger Sekunden, teilweise auch darunter, liegt. Sie sind allerdings nicht in der Lage, komplexe Geometrien oder lokale Turbulenz wiederzugeben. Einsatzgebiete sind beispielsweise Simulationen der Schadstoffbildung [55], Voruntersuchungen zur Auslegung der Brennraumgeometrie, sowie ebenfalls als Anwendungen für Motorsteuergeräte.

#### 4.2 Stand der Forschung

In der Literatur lassen sich einige zonale Verbrennungsmodelle für Ottomotoren finden. So beschreiben Merker und Schwarz [55] und Heywood [38] allgemeine Modellierungsansätze für die ottomotorische Verbrennung. Verhelst und Sheppard [84] liefern eine Übersicht über Komponenten zonaler Modelle für Ottomotoren von diversen Arbeitsgruppen.

Die implementierten Submodelle der vorgemischten Verbrennung lassen sich meistens dem "Entrainment"- ("Einzug") oder dem "Flamelet"-Ansatz zuordnen [38]. Bei den Entrainment-Modellen wird zunächst der Flammenfront unverbrannte Masse zugeführt,

$$\dot{m}_{\rm Eintritt} = \rho_{\rm U} \ A_{\rm FF} \ s_{\rm T},\tag{4.1}$$

worin  $\rho_{\rm U}$  die Dichte des unverbrannten Gases,  $A_{\rm FF}$  die Fläche der makroskopischen Flammenfront und  $s_{\rm T}$  die turbulente Brenngeschwindigkeit bezeichnet, vgl. [38], [55], [84]. Die zugeführte Masse verbrennt daraufhin,

$$\dot{m}_{\text{Verbrennung}} = \frac{m_{\text{Eintritt}} - m_{\text{Verbrennung}}}{\tau},\tag{4.2}$$

innerhalb einer vom Turbulenzfeld und der Reaktionskinetik abhängigen charakteristischen Zeit  $\tau$ . Diese wird oft als Quotient der Taylor-Länge  $l_{\rm T}$  und der laminaren Brenngeschwindigkeit  $s_{\rm L}$  angegeben:

$$\tau = \frac{l_{\rm T}}{s_{\rm L}}.\tag{4.3}$$

Die Taylorlänge liegt zwischen dem Durchmesser der größten (integrales Längenmaß) und der kleinsten Wirbel (Kolmogorov-Länge) und beschreibt den Weg, welchen ein Kolmogorov-Wirbel innerhalb seiner Umdrehungszeit durch den Transport in einem größten Wirbel integralen Maßes zurücklegt [64]. Den Entrainment-Ansatz verfolgen die Modelle von Auer [4], Blizard und Keck [12], Grill [32], Perini et al. [61] und Tabaczynski et al. [80].

Beim Flamelet-Ansatz wird auf die Trennung des Entrainment-Vorgangs vom Verbrennungsprozess verzichtet. Die Flammenfront wird als unendlich dünn angenommen und die Umsetzung des Brennstoffs erfolgt konsequenterweise unendlich schnell. Der Vorteil dieses Ansatzes ist, dass die Turbulenz nur durch die turbulente Brenngeschwindigkeit auf den Verbrennungsprozess einwirkt, und nicht zusätzlich durch eine charakteristische Zeit oder eine turbulente Länge. Allerdings hat der Flamelet-Ansatz in zonalen Modellen den Nachteil, bei Kontakt der Flammenfront mit Brennraumwänden noch weniger weich verlaufende Wärmefreisetzungsraten zu errechnen. Grundsätzlich berechnen zonale Modelle zu kantige Brennverläufe durch das sofortige Erlöschen der modellierten Flammenfront an den Wänden. Der Flamelet-Ansatz wurde beispielsweise von van Essen et al. [27] und von Lämmle [46] gewählt und wird auch in der vorliegenden Arbeit verfolgt.

Auer und Wachtmeister haben ein umfangreiches Modell eines Gasmotors mit Vorkammer aufgebaut, vgl. [4], [5]. Viele Vorgänge werden hierin durch empirische Zusammenhänge beschrieben, beispielsweise Schadstoffbildungsprozesse oder die Form der Flammenkeulen, die sich durch das aus der Vorkammer in den Hauptbrennraum übertretende Gas ausbilden, und ihre Wirkung auf die Kraftstoffumsetzung. Der Einfluss der Kolbenbewegung auf die Verbrennung wird vereinfacht berücksichtigt, indem Kennlinien der Flammenfrontfläche über dem volumetrischen Umsetzungsgrad für verschiedene Kolbenpositionen hinterlegt werden. Unberücksichtigt bleibt dabei die Deformation der Flammenfrontfläche durch die Kolbenbewegung, für die unter anderem auch der Zündzeitpunkt relevant ist. Stattdessen wird die Flammenfront durchgängig als hemisphärisch angenommen [4]. Auch andere Autoren zonaler Modelle für Ottomotoren wie Blizard und Keck [12], Grill [32], Lämmle [46] und Perini et al. [61] hinterlegen Kennlinien für eine hemisphärische Flammenfrontfläche, wie es bereits von Heywood [38] vorgeschlagen wurde. Bei hoher Kolbengeschwindigkeit verglichen zur Flammenausbreitung kann diese Vereinfachung dazu führen, dass der Kolben im Expansionstakt der Flammenfront wegeilt – ein Effekt, der in der Realität nicht auftritt.

Moderne Vier- und Fünfventilmotoren verfügen meistens über eine mittig angebrachte Zündkerze, um einen zügigen Verbrennungsvorgang zu erzielen. Speziell für diese Zündkerzenposition liefern zonale Modelle jedoch Brennund Druckverläufe, die sich stark von gemessenen Daten unterscheiden. Im idealisierten Fall der zonalen Modelle erreicht die Flammenfront die Zylinderlaufbuchse allerorts nahezu gleichzeitig. In der Realität bewirken nicht berücksichtigte Effekte (Gemischinhomogenität, Strömungsvorgänge u. v. m.), dass die Flamme nicht zeitgleich auf diese Brennraumwand trifft. Außerdem wird die Flamme bei Annäherung an die Laufbuchse zunehmend laminar, was den Ausbrand zusätzlich verzögert. Um diesen Effekten zu begegnen, schlägt Grill [32] vor, auch bei tatsächlich zentraler Lage der Zündkerze, diese im Modell etwa 2 bis 10 mm exzentrisch anzuordnen. Auer [4] greift diesen Vorschlag auf. Die Exzentrität der Zündkerze führt allerdings zu einer aufwendigen Berechnung der Flammenoberfläche sobald die Flammenfront die Laufbuchse erreicht: Das bereits verbrannte Volumen wird in axialer Richtung des Brennraums räumlich diskretisiert, also in eine hohe Zahl exzentrischer flacher Scheiben unterteilt.

#### 4.3 Beschreibung des zonalen Zylindermodells

Im Rahmen der hier vorgelegten Arbeit wird das Modell eines ottomotorischen Gasmotors mit Kerzenzündung vorgestellt, welches in der grafischen Programmierumgebung Matlab/Simulink [81] umgesetzt wurde. Dieses Modell verarbeitet die auftretenden Erhaltungsgleichungen, indem es sie zeitlich diskretisiert. Die Zeitschrittweite wird während der Simulation konstant gehalten. Die Ergebnisse zum Ende eines Zeitschritts bilden die Eingangswerte des darauffolgenden Schritts. Es zeigt sich, dass für die Simulation aller vier Takte ungefähr 8000 Zeitschritte angemessen sind. Zur Berechnung benötigt ein herkömmlicher Desktop-PC ungefähr zehn Sekunden.

Der Aufbau des zonalen Modells wurde im Rahmen studentischer Arbeiten von Hennecke ([36], [37]) begonnen und in dieser Arbeit fortgesetzt. Das Ziel war die Schaffung eines Modells mit einem möglichst hohen Anteil physikalisch basierter Zusammenhänge und möglichst weniger empirischer Korrelationen. Hierdurch wird die Fähigkeit zur Extrapolation auf weitere Motorgeometrien und -betriebspunkte gewährleistet. Gleichzeitig werden Einblicke in physikalische Teilprozesse ermöglicht, die empirische Modelle prinzipiell nicht bieten. Die Vielzahl der zu modellierenden physikalischen Phänomene wurde voneinander logisch getrennt und dann einzeln in Subsystemen in den Quellcode eingebunden, wo sie innerhalb eines jeden Zeitschritts sequentiell ablaufen, vgl. Abb. 4.2. Durch dieses Vorgehen bleiben die einzelnen Gleichungen kompakt und der Quellcode übersichtlich. Außerdem können einzelne Programmteile auf einfache Weise substituiert werden. Bevor die Modellansätze im einzelnen besprochen werden, wird die wesentliche Modellierungs-Idee vorgestellt.

Zu Beginn eines jeden Zeitschritts werden die Flammenfrontfläche und die aktuelle Brenngeschwindigkeit bestimmt. Anders als in den zuvor diskutierten Quellen wird dabei nicht von einer hemisphärischen Flammenfront ausgegangen. Stattdessen wird die Deformation der Flammenfront durch die Kolbenbewegung berücksichtigt. Diese physikalisch korrektere Beschreibung der Flammenfront wirkt sich insbesondere positiv auf die Darstellung des Flammenauftreffens auf die Zylinderlaufbuchse aus. Der Abstand des Zündfunkens zum Zylinderkopf kann frei gewählt werden. Die bereits angesprochene Forderung nach einem verzögerten Brennstoffumsatz beim Auftreffen der Flammenfront an der Zylinderlaufbuchse wird durch die Modellierung eines laminaren Ausbrands erfüllt. Hierzu wird die Geschwindigkeit der Flammenfront allmählich bis zur laminaren Brenngeschwindigkeit zurückgeführt.



**Abbildung 4.2.:** Im zonalen Modell werden innerhalb eines Zeitschritts gleichzeitig ablaufende Prozesse sequentiell verarbeitet.

Eine essentielle Eingangsgröße des zonalen Modells ist die laminare Brenngeschwindigkeit. Sie wird in Form der Näherung aus Kap. 2, Gl. (2.4), welche aus den Ergebnissen der reaktionskinetischen Simulationen abgeleitet wurde, implementiert. Aus der laminaren Brenngeschwindigkeit  $s_{\rm L}$  wird mithilfe eines druckabhängigen Zusammenhangs nach Muppala et al. [60] die turbulente Brenngeschwindigkeit  $s_{\rm T}$  ermittelt. Die enthaltene Druckabhängigkeit ist für den motorischen Bereich von besonderer Bedeutung, zumal sich andere Zusammenhänge für die turbulente Brenngeschwindigkeit, die in der Literatur vorgeschlagen sind, in der Regel auf eine atmosphärische Verbrennung beschränken.

Zur Simulation der Flammenausbreitung unterteilt das entworfene Modell den Brennraum in Zonen, Abb. 4.3, die durch die Zustandsgrößen Druck, Temperatur, Masse und Volumen beschrieben werden. Zu Beginn eines Zeitschritts wird die unverbrannte von der verbrannten Gasmasse unterschieden. Die Verbrennung findet ausschließlich in einer dritten Zone, der Reaktionszone statt, welche die unverbrannte von der verbrannten Gasmasse trennt. Das Modell bildet diese dritte Zone zu Beginn eines Zeitschritts aus der unverbrannten Zone neu. Sie ergibt sich aus der Multiplikation der aktuellen makroskopischen Flammenfrontfläche  $A_{\rm FF}$  mit der makroskopischen Brenngeschwindigkeit *s* und der Zeitschrittweite des Modells  $\Delta t$ .

Auch innerhalb der Subsysteme werden Teilprozesse sequentiell bearbeitet. So wird beispielsweise die Expansion der reagierenden Gasmasse nicht durch



Abbildung 4.3.: Das zonale Modell eines Gasmotors umfasst dessen Brennraum, welcher durch den Zylinderkopf, die Zylinderlaufbuchse und den Kolben begrenzt wird.

einen "Expansionsfaktor" *Ex* berücksichtigt (wie es von Heywood [38] sowie Merker und Schwarz [55] vorgeschlagen und z. B. von Auer [4] und Lämmle [46] umgesetzt wurde), sondern fließt in Form einer nachträglichen Kompression der Reaktionszone ein, deren Verbrennung zuvor als isobar angenommen wurde.

Die Kolbenbewegung streckt oder staucht die Zylinderfüllung. Dadurch verändert sie einerseits den Druck und die Temperatur der Gasmasse. Andererseits beeinflusst die Kolbenbewegung die Form der Flammenfront, die in diesem Modell als Ellipsoid angenommen wird. Gleichzeitig verschiebt die Kolbenbewegung den Mittelpunkt dieses Ellipsoids, sodass er nicht mehr mit dem Ort des Zündfunkens zusammenfällt. Alle genannten Phänomene werden im vorliegenden Modell berücksichtigt.

Während des Ladungswechsels werden Strömungvorgänge durch Ein- und Auslassventile modelliert. Hierzu wird eine stationäre Strömung durch eine isenthalpe Drossel angenommen. Die durchströmte Querschnittsfläche eines jeden Ventils ergibt sich aus dessen Ventilhubkurve, die der Anwender frei vorgeben kann. Motoraufladung wird im vorgestellten Modell durch Anpassung des Drucks und der Temperatur im Einlass- und Auslasskanal nachgebildet.

Ein wichtiges Detail des Ladungswechsels stellt das im Zylinder verbleibende verbrannte Restgas dar. Dieses wird im Modell vor der nächsten Zündung mit dem angesaugten Frischgas vermengt und erhöht dadurch den Inertgasanteil – die sogenannte innere Abgasrückführung wird also berücksichtigt. Die angesaugte Gasmasse kann beliebig aus den Komponenten Stickstoff  $(N_2)$ , Sauerstoff  $(O_2)$ , Methan  $(CH_4)$ , Wasser  $(H_2O)$  und Kohlenstoffdioxid  $(CO_2)$  zusammengestellt werden. Daher lässt sich auch der Einfluss einer externen Abgasrückführung untersuchen. Durch geeignete Wahl der Komponenten, insbesondere durch Erhöhung der CO<sub>2</sub>-Konzentration, können auch Biogase dargestellt werden. Das Zylindermodell ist sowohl für magere und stöchiometrische, als auch für fette Gemische gültig.

Schließlich wird das im vorherigen Kapitel beschriebene thermische Modell zum Flammenlöschen an den Brennraumwänden ("Quenchen") nach Boust et al. [15] implementiert. Mithilfe der hierin berechneten Quenchabstände kann unter Verwendung weiterer Größen des zonalen Modells auf die Menge unverbrannten Methans an den Wänden – einschließlich dessen räumlicher und zeitlicher Verteilung – geschlossen werden. Auch hierbei ist die Beachtung der Flammenfrontdeformation durch den bewegten Kolben essentiell.

Nachfolgend werden die modellhaften Vereinfachungen erläutert und dann die wesentlichen Subsysteme der Simulation im Detail beschrieben.

#### 4.3.1 Vereinfachungen

Im zonalen Modell werden folgende vereinfachende Annahmen getroffen:

- 1. Das Gasgemisch im Brennraum verhält sich wie ein ideales Gas.
- 2. Die Reaktion des Gemisches verläuft ideal, das heißt ohne Nebenprodukte.
- 3. Der Druck ist im Brennraum ortsunabhängig. Die Temperaturen werden für jede Zone jedoch einzeln berechnet.
- 4. Die Zonen beinhalten ideal durchmischtes Gas.
- 5. Die Turbulenz der Zylinderfüllung ist homogen und wird durch einfache phänomenologische Zusammenhänge aus der Brennraumgeometrie und der Motordrehzahl abgeleitet.
- 6. Die Zonen verhalten sich adiabat. Das heißt, es findet kein Wärmetransport zwischen den Zonen und durch die Zylinderwände statt.
- 7. Die spezifischen Wärmekapazitäten der Gasgemische werden als ideal, also nur temperaturabhängig, mithilfe der parametrisierten NASA-Polynome nach [16] und [54] aller beteiligten Spezies berechnet. Für die dynamischen Viskositäten der Gasgemische werden druck- und temperaturabhängige Werte für Luft aus [83] angenommen.
- 8. Der Brennraum ist dicht, Blow-By-Verluste bleiben unberücksichtigt.
- 9. Die Form des Brennraums entspricht einem geraden Kreiszylinder.
- 10. Die Zündkerze ist mittig im Brennraum angebracht. Der Zündfunke befindet sich demnach auf der Rotationssymmetrieachse des Kreiszylinders, darf aber Abstand zum Zylinderkopf haben.
- 11. Der Zündkeim hat die Form einer Kugel oder eines Rotationsellipsoids mit wählbaren geometrischen Parametern.
- Die Zündung erfolgt unter laminaren Umständen und geht dann in eine turbulente Verbrennung über. Hier wird ein druckabhängiger Ansatz zur Berechnung der turbulenten Brenngeschwindigkeit nach Muppala et al.
   [60] eingesetzt.

- 13. Der laminare Ausbrand bei Annäherung der Flammenfront an die Zylinderlaufbuchse wird als Übergang von einer turbulenten zu einer laminaren Verbrennung dargestellt.
- 14. Für den Ladungswechsel werden isenthalpe Drosseln als Ein- und Auslassventile angenommen.
- 15. Das zonale Modell umfasst nicht den Einlass- und Auslasskanal. Daher sind die Drücke und Temperaturen jenseits der Ventile konstant.
- 16. An den Drosseln werden gasdynamische Trägheiten nicht modelliert, stattdessen wird die stationäre Ausströmfunktion  $\Psi$  angewandt.

#### 4.3.2 Flammenfrontfläche

#### Die Flammenfrontfläche als Ellipsoid

Zu Beginn eines jeden Zeitschritts des zonalen Modells wird der Brennraum in nur zwei Volumina unterteilt: in die Zone des unverbrannten Gasgemisches und in die des verbrannten Gasgemisches. Für die Zone der verbrannten Gasmasse wird die Form eines Rotationsellipsoids angenommen, von dem Teile durch die Brennraumwände abgeschnitten sind. Diese Annahme ist nicht vollständig zutreffend, weil die reine Flammenausbreitung (ohne Kolbenbewegung) durch Ellipsoide nicht exakt wiedergegeben wird: Es lässt sich keine Schale konstanter Dicke zwischen zwei Ellipsoiden konstruieren – abgesehen vom Spezialfall einer Kugel. Ist das Ellipsoid allerdings nicht stark gestaucht oder gestreckt, so lassen sich Schalen konstruieren, die in guter Näherung parallele Oberflächen aufweisen.

Zugunsten der Übersicht wird in allen Abbildungen eine zweidimensionale Schnittansicht des rotationssymmetrischen Brennraums gewählt. In Abb. 4.4 entspricht die Geometrie der Flammenfront daher einem Ellipsenabschnitt. Auch rechnerisch wird zunächst ein zweidimensionaler Vorgang beschrieben. Die Übertragung in das Räumliche erfolgt später durch Rotation um die x-Achse.

Die Ellipse wird durch zwei veränderliche Parameter beschrieben: Durch den Radius r, welcher allein vom Flammenfortschritt abhängt, sowie durch den Deformationsfaktor f, der zudem durch die Kolbenbewegung verändert wird. Der Mittelpunkt der Ellipse liegt nur zum Zündzeitpunkt im Zündort. Der Koordinatenursprung wird auf den Mittelpunkt der Ellipse gelegt, er verändert



**Abbildung 4.4.:** Die Form der verbrannten Zone entspricht der Geometrie eines Rotationsellipsoids, im zweidimensionalen Raum einer Ellipse.

somit während der Kolbenbewegung seinen Abstand zum Zylinderkopf. Die allgemeine Gleichung dieser Ellipse lautet

$$y(x) = \sqrt{r^2 - \left(\frac{x}{f}\right)^2} \qquad \text{mit } 0 < f < \infty.$$

$$(4.4)$$

Wandkontakte der Flammenfront

Die Flammenfront stößt im Verlauf ihrer Ausbreitung an die Brennraumwände, siehe Abb. 4.5. Um die Oberfläche der Flammenfront und das Volumen des verbrannten Gases vollständig zu beschreiben, reicht daher die Kenntnis der Ellipsenparameter r und f nicht aus. Es müssen ferner die x-Koordinaten des Zylinderkopfs  $x_{\rm ZK}$ , des Wandauftreffens der Flammenfront auf die Zylinderlaufbuchse  $x_{\rm LB1}$  und  $x_{\rm LB2}$  sowie der Kolbenoberfläche  $x_{\rm K}$  bekannt sein.

Die Höhe des Brennraums h ist eine Funktion der Zeit, die sich aus der Kolbenbewegung ergibt. Die Funktion der Brennraumhöhe ist also vorzugeben,



Abbildung 4.5.: Bei fortgeschrittener Verbrennung müssen die umgebenden Brennraumwände berücksichtigt werden.

worauf im Abschn. 4.3.5 "Kolbenhubbewegung" näher eingegangen wird. Zum Zündzeitpunkt  $t_{\text{ZZP}}$  beträgt die Brennraumhöhe  $h_{\text{ZZP}} = h(t_{\text{ZZP}})$ . Hieraus kann auf die *x*-Koordinate des Zylinderkopfs  $x_{\text{ZK}}$  geschlossen werden

$$x_{\rm ZK} = \frac{h}{h_{\rm ZZP}} \cdot x_{\rm ZK, ZZP},\tag{4.5}$$

wobei  $x_{ZK,ZZP} = x_{ZK} (t_{ZZP})$  der Abstand des Zylinderkopfs vom Zündkeimmittelpunkt zum Zündzeitpunkt ist und ein negatives Vorzeichen trägt. Die x-Koordinate der Kolbenoberfläche  $x_K$  kann auf die gleiche Weise oder mithilfe von  $x_{ZK}$  ermittelt werden,

$$x_{\rm K} = \frac{h}{h_{\rm ZZP}} \cdot x_{\rm K, ZZP} = h + x_{\rm ZK}.$$
(4.6)

Die Orte des Wandauftreffens der Flammenfront auf die Laufbuchse  $x_{\text{LB1}}$  und  $x_{\text{LB2}}$  ergeben sich mithilfe der Ellipsen-Gl. (4.4) bei eingesetztem Brennraumradius  $r_{\text{B}}$  zu

$$r_{\rm B} = \sqrt{r^2 - \left(\frac{x_{\rm LB}}{f}\right)^2} \tag{4.7}$$

$$\Leftrightarrow x_{\rm LB1} = -f\sqrt{r^2 - r_{\rm B}^2} \tag{4.8}$$

$$\wedge x_{\text{LB2}} = +f\sqrt{r^2 - r_{\text{B}}^2}.$$
 (4.9)

Dies gilt für den Fall, dass die Diskriminante  $r^2 - r_B^2 > 0$  und somit  $r > r_B$  ist, andernfalls berührt die Flammenfront noch nicht die Zylinderlaufbuchse.

Aus den Orten des Kontakts der Flammenfront mit den Brennraumwänden  $x_{\text{ZK}}$ ,  $x_{\text{LB1}}$ ,  $x_{\text{LB2}}$  und  $x_{\text{K}}$  lassen sich die Grenzen der abschnittsweise definierten Funktion der Flammenfront finden. Diese dienen später auch als Integrationsgrenzen für die Rotation dieser Funktion:

$$x_{G1} = \begin{cases} x_{ZK} & \text{falls } -f \cdot r < x_{ZK}, \\ -f \cdot r & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$x_{G2} = \begin{cases} \max(x_{ZK}, x_{LB1}) & \text{falls } r > r_B, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$$(4.10)$$

$$x_{G3} = \begin{cases} \min(x_{K}, x_{LB2}) & \text{falls } r > r_{B}, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

$$x_{G4} = \begin{cases} x_{K} & \text{falls } f \cdot r > x_{K}, \\ f \cdot r & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$(4.12)$$

Nun kann die Funktion der Flammenfront  $y_{FF}(x)$  gebildet werden. Im zweidimensionalen Raum ist sie linienförmig, vgl. Abb. 4.5:

$$y_{\rm FF}(x) = \begin{cases} \sqrt{r^2 - \left(\frac{x}{f}\right)^2} & \text{falls } x_{\rm G1} \le x \le x_{\rm G2} \text{ oder } x_{\rm G3} \le x \le x_{\rm G4}, \\ \text{n. d.} & \text{sonst.} \end{cases}$$

$$(4.14)$$

In gleicher Weise wird eine Funktion  $y_{\rm V}(x)$  gebildet, welche die Zone verbrannter Gasmasse außen umschließt. In dieser wird zusätzlich der Funktionsabschnitt berücksichtigt, in dem die Flamme an der Zylinderlaufbuchse erloschen ist:

$$y_{\rm V}(x) = \begin{cases} \sqrt{r^2 - \left(\frac{x}{f}\right)^2} & \text{falls } x_{\rm G1} \le x \le x_{\rm G2} \text{ oder } x_{\rm G3} \le x \le x_{\rm G4}, \\ r_{\rm B} & \text{falls } x_{\rm G2} < x < x_{\rm G3}, \\ \text{n. d.} & \text{sonst.} \end{cases}$$
(4.15)

Rotation der Funktionen  $y_{\rm FF}(x)$  und  $y_{\rm V}(x)$ 

Die definierten Abschnitte der Funktion der Flammenfront  $y_{FF}(x)$  werden um die *x*-Achse rotiert, um die Mantelfläche des zugehörigen Rotationskörpers zu erhalten, vgl. [56]. Die Mantelfläche entspricht der makroskopischen Flammenfrontoberfläche:

$$A_{\rm FF} = 2 \ \pi \left( \int_{x_{\rm G1}}^{x_{\rm G2}} y_{\rm FF}(x) \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\mathrm{d}y_{\rm FF}}{\mathrm{d}x}\right)^2} \, \mathrm{d}x + \int_{x_{\rm G3}}^{x_{\rm G4}} y_{\rm FF}(x) \cdot \sqrt{1 + \left(\frac{\mathrm{d}y_{\rm FF}}{\mathrm{d}x}\right)^2} \, \mathrm{d}x \right)$$
$$= 2 \ \pi \left( -A_{\rm H}(x_{\rm G1}) + A_{\rm H}(x_{\rm G2}) - A_{\rm H}(x_{\rm G3}) + A_{\rm H}(x_{\rm G4}) \right).$$
(4.16)

Die Stammfunktion  $A_{\rm H}(x)$  der Integrale ist [56]

$$A_{\rm H}(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left( x \sqrt{r^2 + f_{\rm H} x^2} + \frac{r^2}{\sqrt{f_{\rm H}}} \, \operatorname{arsinh}\left(\frac{\sqrt{f_{\rm H}} x}{r}\right) \right) & \text{falls } f < 1, \\ r \cdot x & \text{falls } f = 1, \\ \frac{1}{2} \left( x \sqrt{r^2 - f_{\rm H} x^2} + \frac{r^2}{\sqrt{f_{\rm H}}} \, \operatorname{arcsin}\left(\frac{\sqrt{f_{\rm H}} x}{r}\right) \right) & \text{falls } f > 1, \end{cases}$$

$$(4.17)$$
mit  $f_{\rm H} = \left| \frac{1}{f^2} \left( \frac{1}{f^2} - 1 \right) \right|.$
In ähnlicher Weise wird durch Rotieren der Funktion  $y_V(x)$  um die x-Achse das Volumen der verbrannten Gasmasse errechnet. Der Bereich zwischen  $x_{G2}$ und  $x_{G3}$  ist ein Kreiszylinder. Dieser ist unendlich flach ( $x_{G2} = x_{G3} = 0$ ), wenn die Flamme die Zylinderlaufbuchse noch nicht berührt hat. Maximal umfasst dieser Zylinder den gesamten Brennraum ( $x_{G2} = x_{ZK}, x_{G3} = x_K$ ), wenn die Flamme bereits jeden Ort der Kammer überstrichen hat. Das Volumen des verbrannten Gases ergibt sich zu

$$V_{\rm V} = \pi \left( \int_{x_{\rm G1}}^{x_{\rm G2}} y_{\rm V}^2(x) \, \mathrm{d}x + \int_{x_{\rm G2}}^{x_{\rm G3}} y_{\rm V}^2(x) \, \mathrm{d}x + \int_{x_{\rm G3}}^{x_{\rm G4}} y_{\rm V}^2(x) \, \mathrm{d}x \right)$$
  
=  $\pi \left( -V_{\rm H}(x_{\rm G1}) + V_{\rm H}(x_{\rm G2}) + r_{\rm B}^2 (x_{\rm G3} - x_{\rm G2}) - V_{\rm H}(x_{\rm G3}) + V_{\rm H}(x_{\rm G4}) \right)$   
mit  $V_{\rm H}(x) = r^2 x - \frac{1}{3f^2} x^3.$  (4.18)

Abb. 4.6 zeigt die Flammenfrontfläche, deren Form in diesem Modell als Ellipsoidoberfläche berechnet wird, im Vergleich zu der weit verbreiteten Annahme einer hemisphärischen Form, welche den Einfluss der Kolbenbewegung vernachlässigt. Bei rascher Verbrennung im Vergleich zur Kolbengeschwindigkeit ist der Unterschied beider Annahmen gering. Daher wurde zur Verdeutlichung an dieser Stelle eine langsame Verbrennung mit geringer Turbulenz simuliert. Die Flammenfrontfläche ist als Funktion des Radius r dargestellt. Sie steigt in beiden Fällen in vergleichbarer Weise bis zu ihrem Maximum an. Durch das Auftreffen der Flammenfront auf die Zylinderlaufbuchse bei r = 55 mm fällt ihre Fläche im Fall einer Ellipsoidform daraufhin steil ab. Zu diesem Zeitpunkt



Abbildung 4.6.: Die Flammenfrontfläche modelliert als Ellipsoidoberfläche im Vergleich zur der Annahme einer hemisphärischen Form, dargestellt als Funktion des Ausbreitungsradius (links) und als maßstäblicher Schnitt durch den Brennraum (rechts)

wurde die Flammenfront durch die Kolbenbewegung in vertikaler Richtung bereits stark gestreckt und deshalb erlischt sie innerhalb eines vergleichsweise kurzen Zeitraums frontal an der Wand. Anders verhält sich die Flammenfront bei der Annahme einer hemisphärischen Form: Die Flamme breitet sich nach dem Auftreffen an der Laufbuchse weiterhin von oben nach unten durch den Brennraum aus. Im dargestellten Fall holt die voranschreitende hemisphärische Flammenfront den sich beschleunigenden Kolben noch ein, sodass der Brennraum vollständig von der Flamme erfasst wird. Wäre die Verbrennung noch langsamer, könnte der Kolben der hemisphärisch modellierten Flammenfront sogar forteilen.

Auf Grundlage der in diesem Abschnitt gezeigten Zusammenhänge können die Flammenfrontfläche  $A_{\rm FF}$  und das Volumen verbrannter Gasmasse  $V_{\rm V}$  bestimmt werden, wenn der Radius r und die Deformation f des zugehörigen Ellipsoids bekannt sind. In den folgenden Abschnitten wird daher erläutert, wie mithilfe der laminaren und turbulenten Brenngeschwindigkeit die Flammenausbreitung dargestellt und somit auf den Radius r geschlossen werden kann. Im Anschluss wird gezeigt, wie die Hubbewegung des Kolbens den Deformationsfaktor f festlegt.

# 4.3.3 Brenngeschwindigkeit

Die Brenngeschwindigkeit beschreibt die Ausbreitungsgeschwindigkeit einer Flamme in einem offenen System. Im Fall des Gasmotors handelt es sich jedoch um ein geschlossenes System. Hier ist die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme  $\dot{r}$  größer als die Brenngeschwindigkeit s, weil das Gasvolumen bedingt durch den Temperaturanstieg während der Verbrennung expandiert. Somit wird die Flamme zusätzlich vorangetrieben. Nichtsdestotrotz wird die Brenngeschwindigkeit benötigt, um anschließend die Ausbreitungsgeschwindigkeit berechnen zu können.

Die Brenngeschwindigkeit ist stark abhängig von der Turbulenz des Strömungsfeldes. Zudem hängt diese turbulente Brenngeschwindigkeit  $s_{\rm T}$  von weiteren Größen ab, insbesondere der laminaren Brenngeschwindigkeit  $s_{\rm L}$ , die vom Strömungsfeld unabhängig ist und als Stoffeigenschaft des Gasgemisches aufgefasst werden kann. Muppala et al. [60] ermittelten experimentell für magere Methan-, Ethylen- und Propan-Gas-Flammen den Zusammenhang

$$s_{\rm T} = s_{\rm L} \cdot \left( 1 + \frac{0.46}{Le} \cdot Re_{\rm T}^{0.25} \cdot \left(\frac{u'}{s_{\rm L}}\right)^{0.3} \cdot \left(\frac{p}{10^5 \,{\rm Pa}}\right)^{0.2} \right), \tag{4.19}$$

in dem neben der Turbulenz in Form der turbulenten Reynolds-Zahl  $Re_{\rm T}$ und des turbulenten Schwankungsterms u' auch eine Abhängigkeit vom Druck berücksichtigt wird. Die Lewis-Zahl *Le* ist das Verhältnis der Wärmeleitfähigkeit zur Stoffdiffusion und für Methan typischerweise *Le*  $\approx 0.98$  [35]. Für die ungestreckte laminare Brenngeschwindigkeit werden im zonalen Modell die im Kap. 2 reaktionskinetisch berechneten Werte in Form der Approximation Gl. (2.4) verwendet.

Da zonale Verbrennungsmodelle das turbulente Strömungsfeld nicht lokal berechnen, wird der turbulente Schwankungsterm u' im vorliegenden Modell als Konstante vom Benutzer vorgegeben. Für den turbulenten Schwankungsterm kann als erste Abschätzung die halbe mittlere Kolbengeschwindigkeit verwendet werden [64]. Weitere Ansätze zur Modellierung des Schwankungsterms in zonalen Modellen sind in [55] aufgeführt. Tatsächlich ist dieser Parameter jedoch weitgehend unbekannt und kann zur Kontrolle der Flammenausbreitungsgeschwindigkeit herangezogen werden. Vom turbulenten Schwankungsterm u'wird auf die turbulente Reynolds-Zahl geschlossen,

$$Re_{\rm T} = \frac{u' \rho_{\rm U} l_{\rm I}}{\eta_{\rm U}},\tag{4.20}$$

wobei  $\rho_{\rm U}$  die Dichte und  $\eta_{\rm U}$  die dynamische Viskosität der unverbrannten Gasmasse bezeichnet. Das integrale Längenmaß  $l_{\rm I}$  entspricht dem Durchmesser der größten auftretenden Wirbel des Strömungsfeldes. Bei Kolbenmaschinen wird für Kolbenpositionen nahe des oberen Totpunktes 10 bis 20 % des Abstands der Kolbenoberfläche zum Zylinderkopf [64] angenommen, was im vorliegenden Modell auch umgesetzt wurde. Alternative Modellierungsansätze finden sich erneut in [55].

Unmittelbar nach der Zündung unterliegt die Flammenausbreitung zunächst dem chemischen Zündverzug von ungefähr 1 ms Dauer [40], [63]. Anschließend ist der Zündkeim klein im Vergleich zu den Wirbeln des Strömungsfeldes. Die Flammenausbreitung erfolgt daher weitestgehend laminar, wird mit steigendem Keimdurchmesser jedoch turbulenter. Um diesen Vorgang zu berücksichtigen, wurde im zonalen Modell die simple Annahme eines linearen Anstiegs der



**Abbildung 4.7.:** Modellierte Brenngeschwindigkeit s(r) kurz nach der Zündung und am Ende der Verbrennung bei Annäherung an die Zylinderlaufbuchse

Brenngeschwindigkeit aus [5] übernommen, vgl. auch Abb. 4.7:

$$s(r) = \begin{cases} s_{\rm L} = s_{\rm L}(\text{Brennstoff}, \phi, p, T, Y_{\rm AGR}) & \text{falls } r \leq r_{\rm L}, \\ s_{\rm Trans} = \frac{s_{\rm T} - s_{\rm L}}{r_{\rm T} - r_{\rm L}} (r - r_{\rm L}) + s_{\rm L} & \text{falls } r_{\rm L} < r < r_{\rm T}, \\ s_{\rm T} = s_{\rm L} \left( 1 + \frac{0.46}{Le} Re_{\rm T}^{0.25} \left( \frac{u'}{s_{\rm L}} \right)^{0.3} \left( \frac{p}{10^5 \, \text{Pa}} \right)^{0.2} \right) & \text{falls } r \geq r_{\rm T}. \end{cases}$$

$$(4.21)$$

Der Radius  $r_{\rm L}$  des Übergangs von der laminaren zur transienten Brenngeschwindigkeit liegt im Bereich der kleinsten Wirbelstrukturen und kann daher mit der Kolmogorov-Länge gleichgesetzt werden. Für dieses zonale Modell ausreichend ist jedoch,  $r_{\rm L} = 0$  zu setzen. Ist die Zone verbrannten Gases größer als das integrale Längenmaß ( $r_{\rm T} \approx l_{\rm I}$ ), also größer als der Durchmesser der größten Wirbel, so ist die Verbrennung vollständig turbulent.

Am Ende des Verbrennungsvorgangs nähert sich die Flammenfront der Zylinderlaufbuchse. Mit kleiner werdendem Wandabstand wird die Flammenausbreitung zunehmend laminar. Dieser Effekt wird in gleicher Weise durch einen linearen transienten Übergang modelliert:

$$s(r) = \begin{cases} s_{\rm T} & \text{falls } r \leq (r_{\rm B} - r_{\rm T}), \\ s_{\rm Trans} = -\frac{s_{\rm T} - s_{\rm L}}{r_{\rm T} - r_{\rm L}} \left( r - (r_{\rm B} - r_{\rm L}) \right) + s_{\rm L} & \text{falls } (r_{\rm B} - r_{\rm T}) < r < (r_{\rm B} - r_{\rm L}), \\ s_{\rm L} & \text{falls } r \geq (r_{\rm B} - r_{\rm L}). \end{cases}$$

$$(4.22)$$

Im Modell findet die Verminderung der Brenngeschwindigkeit an jedem Ort der Flammenfront gleichermaßen statt. Daher bleibt für die Flammenfront



Abbildung 4.8.: Berechnung der Flammenausbreitung mit und ohne Berücksichtigung des Laminarisierens der Flammenfront bei Annäherung an die Zylinderlaufbuchse. ZZP: Zündzeitpunkt. ZOT: Oberer Totpunkt nahe der Zündung.

die Form eines Ellipsoids erhalten. Weil zur Bestimmung des Flammen-Wand-Abstands der Radius des Ellipsoids r – und somit dessen maximale Ausdehnung in radialer Brennraumrichtung – herangezogen wird, werden zurückliegende Teile der Front bereits bei größerer Entfernung zur Laufbuchse verzögert. Deswegen erstreckt sich der Ausbrand speziell in den Winkeln des Brennraums über einen längeren Zeitraum. In Abb. 4.8 wird dieser Effekt insbesondere im zeitlichen Verlauf der Brenngeschwindigkeit deutlich.

# 4.3.4 Flammenausbreitung

Die Berechnung der Flammenausbreitung erfolgt in vier sequentiellen Schritten innerhalb eines jeden simulierten Zeitintervalls, die Hubbewegung des Kolbens wird in einem fünften Schritt berücksichtigt. In Tab. 4.1 auf der nächsten Seite sind diese Rechenschritte in Bildern und mit den zugehörigen Gleichungen dargestellt. Befindet sich hier keine Angabe, so wird der Wert der betroffenen Zustandsgröße aus dem vorangegangenen Schritt unverändert übernommen.

Im ersten Schritt wird – ausgehend von einer reinen Zwei-Zonen-Vorstellung – zunächst eine Reaktionszone mithilfe der aktuellen Brenngeschwindigkeit *s* ermittelt. Im zweiten Schritt reagiert diese isobar, wodurch ihr Volumen steigt.

	0	1	2
	Ausgangs-	Brenn-	Isobare
	situation	fortschritt	Verbrennung
		s	
$p_{\rm Z}$	$= p_{\mathrm{Z,alt}}$		
$V_{\rm Z}$	$=V_{ m Z,alt}$		
$m_{ m RZ}$	= 0	Gl.(4.25)	
$V_{\rm RZ}$	= 0	Gl.(4.23)	Gl.(4.32)
$T_{\rm RZ}$	$= T_{\mathrm{U,alt}}$		Gl.(4.31)
$m_{ m U}$	$= m_{\mathrm{U,alt}}$	Gl.(4.26)	
$V_{\mathrm{U}}$	$= V_{\mathrm{U,alt}}$	Gl.(4.24)	
$T_{\mathrm{U}}$	$= T_{\mathrm{U,alt}}$		
$m_{ m V}$	$= m_{ m V,alt}$		
$V_{\rm V}$	$=V_{ m V,alt}$		
$T_{\rm V}$	$=T_{\rm V,alt}$		

	3	4	5
	Adiabatische	Zusammen-	Kolbenhub-
	Kompression	führung	bewegung
$p_{\rm Z}$	Gl. (4.38)		Gl. (4.56)
$V_{\rm Z}$			Gl.(4.53)
$m_{ m RZ}$		Gl.(4.43)	
$V_{\rm RZ}$	Gl.(4.34)	Gl.(4.42)	
$T_{\rm RZ}$	Gl.(4.39)		
$m_{ m U}$			
$V_{\rm U}$	Gl.(4.35)		Gl.(4.54)
$T_{\rm U}$	Gl.(4.40)		Gl.(4.57)
$m_{ m V}$		Gl.(4.45)	
$V_{\rm V}$	Gl.(4.36)	Gl.(4.44)	Gl.(4.55)
$T_{\rm V}$	Gl.(4.41)	Gl.(4.46)	Gl.(4.58)

Tabelle 4.1.: Übersicht der Gleichungen zur Berechnung der Flammenausbreitung

Im dritten Schritt wird die Dichteänderung durch die Verbrennung und die damit verbundene Kompression des Gases berücksichtigt. Hier werden daher alle drei Zonen derart komprimiert, dass die Summe ihrer Volumina wieder dem Brennraumvolumen entspricht. Schließlich wird im vierten Schritt die Reaktionszone in die Zone verbrannten Gases eingemischt. Der sich bewegende Kolben deformiert diese beiden verbleibenden Zonen. Die vier Schritte zur Berechnung der Flammenausbreitung werden im Folgenden erläutert.

### Schritt 0: Ausgangssituation

Zu Beginn der Berechnung liegen die Zustandsgrößen der unverbrannten und der verbrannten Gasmasse aus dem vorherigen Zeitschritt vor. Dies sind der Druck  $p_{Z,alt}$ , die Volumina  $V_{V,alt}$  und  $V_{U,alt} = V_Z - V_{V,alt}$ , die Massen  $m_{V,alt}$  und  $m_{U,alt} = m_Z - m_{V,alt}$  sowie die Temperaturen  $T_{U,alt}$  und  $T_{V,alt}$ . Die Temperatur der später gebildeten Reaktionszone wird mit der Temperatur des unverbrannten Gasgemisches initialisiert. Die Masse der Zylinderfüllung  $m_Z$ bleibt während der Flammenausbreitung konstant. Das Brennraumvolumen  $V_Z$ ergibt sich zwangsläufig aus den geometrischen Parametern des Brennraums unter Berücksichtigung der Kolbenposition. Ferner sind die Flammenfrontfläche  $A_{\rm FF}$  und die Brenngeschwindigkeit *s* bekannt.

#### Schritt 1: Brennfortschritt

Während sich die Flammenfront mit der Brenngeschwindigkeit s ausbreitet, überstreicht sie innerhalb der Zeitschrittweite  $\Delta t$  das Volumen der Reaktionszone

$$V_{\rm RZ,1} = A_{\rm FF} \cdot s \cdot \Delta t. \tag{4.23}$$

Entsprechend vermindert sich das Volumen der unverbrannten Zone zu

$$V_{\rm U,1} = V_{\rm U,0} - V_{\rm RZ,1}.\tag{4.24}$$

Innerhalb des Volumens der Reaktionszone befindet sich die Masse

$$m_{\rm RZ,1} = V_{\rm RZ,1} \cdot \rho_{\rm U,1},$$
 (4.25)

wobei  $\rho_{\mathrm{U},1}$  die Dichte des unverbrannten Gasgemisches ist. Diese Dichte ist aufgrund des idealen Gasgesetzes durch die Zustandsgrößen  $p_{\mathrm{Z},0}$  und  $T_{\mathrm{U},0}$  des vorherigen Zeitschritts festgelegt. Hieraus ergibt sich die Masse der unverbrannten Zone,

$$m_{\rm U,1} = m_{\rm Z} - m_{\rm V,0} - m_{\rm RZ,1}.$$
(4.26)

Die Massen aller drei Zonen bleiben bis zum Ende des dritten Schritts unverändert, auch wenn sich die Volumina der Zonen ändern.

Der Massenstrom aus der Zone unverbrannten Gasmisches in die Reaktionszone  $\dot{m}_{\rm RZ}$  ist demnach

$$\dot{m}_{\rm RZ} = A_{\rm FF} \cdot s \cdot \rho_{\rm U,1}. \tag{4.27}$$

Er setzt den Wärmestrom

$$\dot{Q} = \dot{m}_{\rm RZ} \cdot H_{\rm U,Gemisch} \tag{4.28}$$

frei. Der untere Heizwert des unverbrannten Gasgemisches wird mithilfe des unteren Heizwertes des Kraftstoffs  $H_{\rm U}$ , seinem spezifischen Mindestluftbedarf  $l_{\rm st}$ , dem vorliegenden Äquivalenzverhältnis  $\phi$  und der Abgasrückführrate  $Y_{\rm AGR}$  berechnet:

$$H_{\rm U,Gemisch} = \begin{cases} H_{\rm U} \frac{\phi}{l_{\rm st}+\phi} \left(1-Y_{\rm AGR}\right) & \text{falls } \phi \le 1.0 \text{ (mageres Gemisch)}, \\ H_{\rm U} \frac{1}{l_{\rm st}+\phi} \left(1-Y_{\rm AGR}\right) & \text{falls } \phi > 1.0 \text{ (fettes Gemisch)}. \end{cases}$$

$$(4.29)$$

#### Schritt 2: Isobare Verbrennung

Die durch die Reaktion freigesetzte Wärme bewirkt in diesem zweiten Schritt eine Volumen- und Temperaturerhöhung der Reaktionszone. Dieser Vorgang wird zunächst als isobar angenommen. Der Temperaturanstieg – und in einem geringeren Maße auch die Veränderung der Spezieszusammensetzung – führen dazu, dass sich die Wärmekapazität des Gases während der Reaktion ändert, Abb. 4.9. Um die Temperatur der Reaktionszone zu bestimmen, wird daher die spezifische Enthalpie des unverbrannten Gasgemisches  $h_{\rm U}$  mit der spezifischen Enthalpie des reagierten Gemisches  $h_{\rm V}$  verglichen. Beide Enthalpiekurven können bei bekannter Gaszusammensetzung aus [16], [54] abgeleitet werden. Es gilt:

$$h_{\rm U}(T_{\rm RZ,0}) = h_{\rm V}(T^*_{\rm RZ,2}).$$
 (4.30)



**Abbildung 4.9.:** Weil sich die Wärmekapazität des Gases (hier: Methan-Luft-Gemisch mit  $\phi = 1.0$ ) bei der Verbrennung deutlich ändert, wird als Zwischenschritt zur Bestimmung des Temperaturanstiegs die Enthalpie der Gasmassen verglichen.

Die Temperatur der Reaktionszone  $T^*_{\text{RZ},2}$  kann nun mit wenigen Iterationen bestimmt werden. Sie liegt typischerweise ungefähr 100 K oberhalb der adiabatischen Flammentemperatur, weil nicht berücksichtigt wurde, dass das Reaktionsgleichgewicht insbesondere bei hohen Temperaturen nicht nahe der Produktseite liegt. Daher wird die Temperatur der Reaktionszone mithilfe eines Verbrennungsbeiwerts  $c_{\text{Verbrennung}}$  gemindert:

$$T_{\rm RZ,2} = T_{\rm RZ,0} + c_{\rm Verbrennung} \cdot \left( T_{\rm RZ,2}^* - T_{\rm RZ,0} \right).$$
(4.31)

Der empirische Faktor  $c_{\text{Verbrennung}}$  fasst die unvollkommene Reaktion und den Wandwärmeverlust zusammen. Durch einen Abgleich mit einer Druckverlaufsanalyse zeigt sich, dass er nahe 0.8 liegt. Zukünftig sind an dieser Stelle physikalische Submodelle wünschenswert.

Durch den Temperaturanstieg der reagierenden Gasmasse von  $T_{\rm RZ,0}$  zu  $T_{\rm RZ,2}$  vergrößert sich zugleich dessen Volumen zu

$$V_{\rm RZ,2} = V_{\rm RZ,1} \cdot \frac{T_{\rm RZ,2}}{T_{\rm RZ,0}} \cdot \frac{M_{\rm U}}{M_{\rm V}}.$$
(4.32)

Im speziellen Fall von Methan bleibt die Stoffmenge während des Oxidationsprozesses unverändert, die Molmasse des unverbrannten Gemisches  $M_{\rm U}$ ist gleich der Molmasse des verbrannten Gemisches  $M_{\rm V}$ . Bei vielen anderen Kraftstoffen muss dieser Effekt jedoch berücksichtigt werden.

Von der isobaren Verbrennung ist zunächst allein die Reaktionszone betroffen. Die Zustandsgrößen der beiden anderen Zonen bleiben unberührt. Dies bewirkt, dass die Summe der Volumina aller drei Zonen größer als das Brennraumvolumen wird,

$$V_{\rm RZ,2} + V_{\rm U,1} + V_{\rm V,0} > V_{\rm Z,0}.$$
(4.33)

#### Schritt 3: Adiabatische Kompression

Tatsächlich findet die Verbrennung nicht isobar statt. Aufgrund des begrenzten Brennraumvolumens erhöht sich bei der Reaktion der Druck im Brennraum. Das wird in diesem Modell durch eine adiabatische Kompression aller drei Zonen dargestellt. Ihre Volumina werden komprimiert, sodass die Summe der Volumina auf das Brennraumvolumen zurückgeführt wird:

$$V_{\mathrm{RZ},3} = V_{\mathrm{RZ},2} \cdot \frac{1}{\varepsilon_3},\tag{4.34}$$

$$V_{\rm U,3} = V_{\rm U,1} \cdot \frac{1}{\varepsilon_3},$$
 (4.35)

$$V_{\mathrm{V},3} = V_{\mathrm{V},0} \cdot \frac{1}{\varepsilon_3},\tag{4.36}$$

mit dem Kompressionsverhältnis

$$\varepsilon_3 = \frac{V_{\rm RZ,2} + V_{\rm U,1} + V_{\rm V,0}}{V_{\rm Z,0}}.$$
(4.37)

Dabei erhöht sich der Druck im gesamten Brennraum zu

$$p_{\mathbf{Z},3} = p_{\mathbf{Z},0} \cdot \varepsilon_3^{\kappa}. \tag{4.38}$$

Gleichzeitig steigen die Temperaturen der drei Zonen während der adiabatischen Kompression. Sie werden mithilfe des idealen Gasgesetzes bestimmt:

$$T_{\rm RZ,3} = \frac{p_{\rm Z,3} \ V_{\rm RZ,3} \ M_{\rm V}}{m_{\rm RZ,1} \ R_{\rm m}},\tag{4.39}$$

$$T_{\rm U,3} = \frac{p_{\rm Z,3} \ V_{\rm U,3} \ M_{\rm U}}{m_{\rm U,1} \ R_{\rm m}},\tag{4.40}$$

$$T_{\rm V,3} = \frac{p_{\rm Z,3} \ V_{\rm V,3} \ M_{\rm V}}{m_{\rm V,0} \ R_{\rm m}}.$$
(4.41)

### Schritt 4: Zusammenführung

Schließlich wird die Reaktionszone mit der Zone verbrannter Gasmasse zusammengeführt. Hierdurch wird der Ausgangszustand eines Zwei-Zonen-Modells

wiederhergestellt. Eine Reaktionszone existiert vorübergehend nicht,

$$V_{\rm RZ,4} = 0,$$
 (4.42)

$$m_{\rm RZ,4} = 0.$$
 (4.43)

Die Zone der verbrannten Gasmasse umfasst dafür nun

$$V_{\rm V,4} = V_{\rm V,3} + V_{\rm RZ,3},\tag{4.44}$$

$$m_{\rm V,4} = m_{\rm V,0} + m_{\rm RZ,1}.\tag{4.45}$$

Die Temperatur der Zone verbrannter Gasmasse ergibt sich als Mischungstemperatur der vorherigen Reaktionszone mit dem verbrannten Gas:

$$T_{\rm V,4} = \frac{m_{\rm RZ,1} \ c_{\rm P,RZ,3} \ T_{\rm RZ,3} + m_{\rm V,0} \ c_{\rm P,V,3} \ T_{\rm V,3}}{m_{\rm RZ,1} \ c_{\rm P,RZ,3} + m_{\rm V,0} \ c_{\rm P,V,3}}.$$
(4.46)

Somit sind die neuen Zustandsgrößen der Zone verbrannten und unverbrannten Gasgemisches bekannt. Jedoch ist die Form des neuen Ellipsoids, welches die verbrannte Zone umschließt, noch zu berechnen.

#### Neue Ellipsoidparameter nach der Flammenausbreitung

Um die Form der Flammenfront nach der Berechnung der Flammenausbreitung – jedoch noch vor der Deformation durch die Bewegung des Kolbens – zu beschreiben, werden neue Ellipsoidparameter  $r_4$  und  $f_4$  gesucht, für die gemäß Gl. (4.18) gilt:

$$V_{\rm V,4} = V_{\rm V} \left( r_4, \, f_4 \right). \tag{4.47}$$

Die Parameter des Ellipsoids zu Beginn der Flammenausbreitung sind aus dem vorherigen Zeitschritt bekannt,  $V_{V,0} = V_V(r_0, f_0)$ , beziehungsweise sind im Fall der Initialisierung zum Zeitpunkt der Zündung vom Benutzer vorgegeben. Zusätzlich zur Volumenbedingung, Gl. (4.47), gibt es eine weitere zu erfüllende Voraussetzung: Die Flammenausbreitung findet im Modell innerhalb eines Zeitschritts an jeder Stelle der Flammenfront mit der gleichen Geschwindigkeit statt. Daher werden die Parameter  $r_4$  und  $f_4$  eines neuen Ellipsoids gesucht, dessen Oberfläche möglichst parallel zu der des Ellipsoids vor der Ausbreitungsrechnung ist. Die bestmögliche Lösung ist, wenn ein solches Ellipsoid den Flammenfortschritt in alle drei Symmetrieachsen-Richtungen mit gleicher Distanz beschreibt. Dann gilt für den Deformationsfaktor des neuen Ellipsoids

$$f_4 = (f_0 - 1) \frac{r_0}{r_4} + 1.$$
(4.48)

In anderen Richtungen als entlang der Symmetrieachsen des Ellipsoids ist der Abstand beider Ellipsoide nicht konstant, die Oberflächen sind nur nahezu parallel. Diese Abweichung ist jedoch gering und wird daher in Kauf genommen. Der zweite Parameter des Ellipsoids, der Radius  $r_4$ , ergibt sich aus der Forderung nach dem verbrannten Volumen  $V_{V,4}$ . Die Funktion der verbrannten Zone Gl. (4.18) kann aufgrund ihrer abschnittsweisen Definition durch die Wandkontakte nicht mit vertretbarem Aufwand zum Ellipsoid-Radius aufgelöst werden. Stattdessen wird der Parameter  $r_4$  mithilfe einer Iteration ermittelt:

$$r_4(N+1) = r_4(N) + \frac{V_{V,4} - V_V(r_4(N), f_4(N))}{\frac{1}{2} \left(A_{FF} + A_{FF}(r_4(N), f_4(N))\right)}$$
  
mit  $r_4(0) = r_0, f_4(0) = f_0.$  (4.49)

Die natürliche Zahl N bezeichnet die Iterationsvariable. Die Iteration wird beendet, wenn die relative Abweichung des Differenzvolumens der verbrannten Zone unter einen geringen Grenzwert fällt:

$$\left|\frac{V_{\rm V}(r_4(N+1), f_4(N+1)) - V_{\rm V,0}}{V_{\rm V,4} - V_{\rm V,0}} - 1\right| \le 10^{-4}.$$
(4.50)

Die so ermittelten Parameter werden mit  $r_4$  und  $f_4$  bezeichnet. Die Flammenausbreitungsgeschwindigkeit ohne Berücksichtigung der Kolbenbewegung beträgt demnach

$$\dot{r} = \frac{r_4 - r_0}{\Delta t}.\tag{4.51}$$

### 4.3.5 Kolbenhubbewegung

#### Schritt 5: Kolbenhubbewegung

Im Anschluss an die reine Flammenausbreitung in den Schritten 1 bis 4 erfolgt eine Kompression oder Expansion durch die Kolbenbewegung in einem fünften Schritt. Die Funktion der Kolbenbewegung muss hierzu vorgegeben werden. Aus der Geometrie des Kurbeltriebs wird die kurbelwinkelabhängige Funktion der Brennraumhöhe gebildet [55]:

$$h(\varphi) = \sqrt{(r_{\text{Kurbel}} + l_{\text{Pleuel}})^2 - e_{\text{Kurbel}}^2} - \sqrt{l_{\text{Pleuel}}^2 - (e_{\text{Kurbel}} + r \cdot \sin(\varphi - \beta))^2} - r \cos(\varphi - \beta) + h_{\text{OT}}$$
  
mit  $\beta$  =  $\arcsin\left(\frac{e_{\text{Kurbel}}}{r_{\text{Kurbel}} + l_{\text{Pleuel}}}\right)$   
und  $\varphi$  =  $2 \pi n t.$  (4.52)

Hierin bezeichnet  $l_{\text{Pleuel}}$  die Pleuellänge,  $r_{\text{Kurbel}}$  den Kurbelradius,  $e_{\text{Kurbel}}$  die Exzentrität der Kurbelwelle zur Kolbenachse und  $h_{\text{OT}}$  die Brennraumhöhe im oberen Totpunkt (OT). Der Winkel  $\varphi$  bezeichnet den Kurbelwinkel und  $\beta$  entspricht dem Kurbelwinkel im oberen Umkehrpunkt des Kolbens. Ist die Kurbelwelle nicht zur Kolbenachse versetzt ( $e_{\text{Kurbel}} = 0$ ), so ist  $\beta = 0$ . Über den Zusammenhang eines geraden Kreiszylinders wird mit dieser Funktion das Volumen des Brennraums bestimmt:

$$V_{\rm Z,5} = h_5 \cdot \pi \, r_{\rm B}^2. \tag{4.53}$$

Durch die Kolbenbewegung ändern sich die Volumina der beiden Zonen zu

$$V_{\rm U,5} = V_{\rm U,3} \cdot \frac{V_{\rm Z,5}}{V_{\rm Z,0}},\tag{4.54}$$

$$V_{\rm V,5} = V_{\rm V,4} \cdot \frac{V_{\rm Z,5}}{V_{\rm Z,0}}.$$
(4.55)

Entsprechend ändert sich während der adiabatischen Volumenänderung der Druck im Brennraum zu

$$p_{\rm Z,5} = p_{\rm Z,3} \cdot \left(\frac{V_{\rm Z,0}}{V_{\rm Z,5}}\right)^{\kappa},$$
(4.56)

und die Temperaturen der zwei Zonen werden mithilfe des idealen Gasgesetzes neu ermittelt:

$$T_{\rm U,5} = \frac{p_{\rm Z,5} \ V_{\rm U,5} \ M_{\rm U}}{m_{\rm U,1} \ R_{\rm m}},\tag{4.57}$$

$$T_{\rm V,5} = \frac{p_{\rm Z,5} \ V_{\rm V,5} \ M_{\rm V}}{m_{\rm V,4} \ R_{\rm m}}.$$
(4.58)

Neue Ellipsoidparameter nach der Kolbenhubbewegung

Die Hubbewegung verändert den Deformationsfaktor des Ellipsoids f, nicht jedoch den Parameter r:

$$r_5 = r_4,$$
 (4.59)

$$f_5 = \frac{h_5}{h_0} f_4. \tag{4.60}$$

### 4.3.6 Ladungswechsel

Im Anschluss an die Berechnung der Flammenausbreitung (Schritte 1 bis 4) und der Einflüsse der Kolbenhubbewegung (Schritt 5) wird der Ladungswechsel durch Einlass- und Auslassventile simuliert. Die Anzahl der Ventile ist nicht begrenzt und für jedes Ventil kann eine eigene Hubkurve hinterlegt werden. Die Ventile werden sequentiell berechnet, d. h. die in diesem Abschnitt erläuterten Berechnungen (Schritte 6 bis 8) werden für jedes Ventil separat durchgeführt. Ventilüberschneidungen, also gleichzeitig geöffnete Einlass- und Auslassventile, werden vom Modell korrekt wiedergegeben. Gegebenenfalls auftretende Überschallströmung wird ebenfalls berücksichtigt.

In Tab. 4.2 sind die drei sequentiellen Schritte zur Berechnung einer Ventilströmung angegeben. Die Grafiken in dieser Tabelle zeigen den häufiger auftretenden Fall eines Ausströmvorgangs an einem Auslassventil (AV) und eines Einströmvorgangs an einen Einlassventil (EV). Bei beiden Ventilarten können tatsächlich Ein- oder Ausströmvorgänge vorliegen – ausschlaggebend für die Strömungsrichtung ist der Druckunterschied am Ventil. Der Modellierungsansatz für Einlass- und Auslassventile ist daher grundsätzlich gleich. Die umgekehrten Strömungsrichtungen, also ein Ausströmvorgang durch das Einlassventil und ein Einströmvorgang durch das Auslassventil, werden durch die angegebenen Gleichungen ebenfalls erfasst.

Im Schritt 6 wird das Ventil als isenthalpe (ideale) Drossel dargestellt. Je nach anliegendem Druck strömt Gas in den Brennraum ein oder aus dem Brennraum aus. Die innerhalb eines Zeitschritts überströmende Gasmenge wird durch eine eigene Zone, die Drosselzone mit dem Index "D", dargestellt. Im siebten Schritt wird die Summe der Volumen aller drei Zonen zum aktuellen Brennraumvolumen komprimiert oder expandiert. Im achten Schritt wird im Fall eines Einströmvorgangs die Drosselzone zur Zone unverbrannten Gasgemisches (im Fall eines Einlassventils) oder zur Zone verbrannten Gasgmisches (im Fall eines Auslassventils) zugeschlagen. Zudem wird die Mischungstemperatur berechnet. Diese drei Schritte zur Berechnung des Ladungswechsels werden in den folgenden Abschnitten näher erläutert.

#### Schritt 6: Drosselströmung

Abb. 4.10 zeigt schematisch die Gasströmung durch ein Ventil. Unabhängig davon, ob es sich um ein Einlass- oder ein Auslassventil handelt, wird die Richtung des Massenstroms vom Kanal in den Brennraum als positiv definiert. Um die Strömung durch diese Drossel beschreiben zu können, sind einige Fallunterscheidungen bezüglich der Gasmassen am Ventil nötig. Bei Einströmvorgängen ist die Gasmasse kanalseitig des Ventils von Interesse. Im Fall eines Einlassventils befindet sich kanalseitig (KA) des Ventils unverbrannte, im Fall eines Auslassventils verbrannte Gasmasse. Um dies in den folgenden Rechenschritten zu unterscheiden, gilt für jede beliebige kanalseitige Größe

$$\Phi_{\rm KA} = \begin{cases}
\Phi_{\rm U,5} & \text{falls EV,} \\
\Phi_{\rm V,5} & \text{falls AV.}
\end{cases}$$
(4.61)

Für die Beschreibung von Ausströmvorgängen wird angenommen, dass sich brennraumseitig (BR) eines Einlassventils unverbrannte Gasmasse befindet, solange der Brennraum unverbrannte Gasmasse beinhaltet. Andernfalls befinde sich dort verbranntes Gas. Brennraumseitig eines Auslassventils wird verbrannte Gasmasse angenommen, sofern der Brennraum über diese verfügt. Für jede beliebige brennraumseitige Größe gilt folglich

$$\Phi_{\rm BR} = \begin{cases}
\Phi_{\rm U,5} & \text{falls (EV } \land m_{\rm U,1} > 0) \lor (\rm AV \land m_{\rm V,4} = 0), \\
\Phi_{\rm V,5} & \text{falls (AV } \land m_{\rm V,4} > 0) \lor (\rm EV \land m_{\rm U,1} = 0).
\end{cases} (4.62)$$

Der Massenstrom durch das Ventil ist positiv, wenn der Druck im Kanal größer als der im Brennraum ist. Für alle hochdruckseitig (HD) anliegenden Größen gilt daher

$$\Phi_{\rm HD} = \begin{cases}
\Phi_{\rm KA} & \text{falls } p_{\rm KA} \ge p_{\rm BR}, \\
\Phi_{\rm BR} & \text{sonst,}
\end{cases}$$
(4.63)

für die niederdruckseitigen (ND) Größen entsprechend umgekehrt

$$\Phi_{\rm ND} = \begin{cases}
\Phi_{\rm BR} & \text{falls } p_{\rm KA} \ge p_{\rm BR}, \\
\Phi_{\rm KA} & \text{sonst.}
\end{cases}$$
(4.64)



Tabelle 4.2.: Übersicht der Gleichungen zur Berechnung des Ladungswechsels



Abbildung 4.10.: Der Massenstrom wird unabhängig von der Ventilart positiv angenommen, wenn er vom Einlass- bzw. Auslasskanal in den Brennraum führt.

Der Massenstrom durch das Ventil ergibt sich aus der Annahme des idealen Ausströmvorgangs eines kompressiblen Fluids zu [13]

$$\dot{m}_{\rm D} = c_{\rm Ventil} A_{\rm Ventil} \cdot p_{\rm HD} \sqrt{\frac{2M_{\rm HD}}{T_{\rm HD}R_{\rm m}}} \cdot \Psi, \qquad (4.65)$$

wobei  $c_{\text{Ventil}}$  den Durchflussbeiwert der Drosselstelle mit dem Drosselquerschnitt  $A_{\text{Ventil}}$  bezeichnet. Der Drosselquerschnitt wird als Mantelfläche eines geraden Kreiszylinders angenommen, welcher den Durchmesser des Kanals am Berührungspunkt mit dem entsprechenden Ventilteller und den aktuellen Ventilhub als Höhe aufweist. Die Ausströmfunktion  $\Psi$  unterscheidet sich je nach Druckverhältnis aufgrund des maximal mit Schallgeschwindigkeit strömenden Fluids [13]:

$$\Psi = \begin{cases} \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa-1} \cdot \left( \left(\frac{p_{\rm ND}}{p_{\rm HD}}\right)^{\frac{2}{\kappa}} - \left(\frac{p_{\rm ND}}{p_{\rm HD}}\right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa}} \right)} & \text{falls } \frac{p_{\rm ND}}{p_{\rm HD}} \ge \left(\frac{p_{\rm ND}}{p_{\rm HD}}\right)_{\rm krit}, \\ \left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{1}{\kappa-1}} \cdot \sqrt{\frac{\kappa}{\kappa+1}} & \text{sonst.} \end{cases}$$
(4.66)

Liegt der Druckquotient  $p_{\rm ND}/p_{\rm HD}$  unter dem kritischen Druckverhältnis [13]

$$\left(\frac{p_{\rm ND}}{p_{\rm HD}}\right)_{\rm krit} = \left(\frac{2}{\kappa+1}\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}} \tag{4.67}$$

liegen Überschallbedingungen vor. Weil sich die Wärmekapazität des Gases während des Drosselung nur unwesentlich ändert, wird der Isentropenexponent  $\kappa \equiv \kappa_{\text{HD}}$  angenommen.

Durch Multiplikation des übertretenden Massenstroms mit der Zeitschrittweite des diskreten Modells ergibt sich die in den Brennraum übertretende Masse

$$m_{\mathrm{D},6} = \dot{m}_{\mathrm{D}} \cdot \Delta t, \tag{4.68}$$

die bei Ausströmvorgängen ein negatives Vorzeichen trägt. Auch das Volumen der neu gebildeten Drosselzone im Brennraum ist vorzeichenbehaftet: Es ist positiv, falls Gas einströmt, bei Ausströmen ist das Volumen negativ. Es wird mithilfe der Dichte der Drosselzone bestimmt:

$$\rho_{\mathrm{D},6} = \begin{cases}
\rho_{\mathrm{KA}} \cdot \left(\frac{p_{\mathrm{BR}}}{p_{\mathrm{KA}}}\right)^{\frac{1}{\kappa}} & \text{falls } p_{\mathrm{KA}} \ge p_{\mathrm{BR}}, \\
\rho_{\mathrm{BR}} & \text{sonst.}
\end{cases}$$
(4.69)

Die Zustandsänderung des eintretenden Gases erfolgt demnach adiabatisch. Das Volumen der Drosselzone ist

$$V_{\rm D,6} = \frac{m_{\rm D,6}}{\rho_{\rm D,6}}.$$
(4.70)

Abb. 4.11 zeigt die modellierten Ventilströmungen. Zur Berechnung der einund austretenden Massenströme sind der Druckquotient am jeweiligen Ventil und der für die durchströmte Drosselfläche relevante Ventilhub entscheidend. Im hier dargestellten Fall verlässt der Großteil der verbrannten Masse recht kurz nach dem Öffnen der Auslassventile den Brennraum, wenngleich der Ventilhub noch recht gering ist. Gleichzeitig ist jedoch der Druckquotient an den Ventilen hoch, kurzfristig ist er sogar überkritisch. Die verbleibende Gasmasse ist daraufhin fast vollständig entspannt und wird anschließend größtenteils durch den sich aufwärts bewegenden Kolben ausgeschoben. Im Bereich der Ventilüberschneidung nahe des oberen Totpunkts beim Ladungswechsel (LOT) kommt es zu keiner signifikanten Rückströmung an den Ventilen.

In Abb. 4.11 wird nur eines von zwei vorhandenen Einlassventilen dargestellt, da die Daten des zweiten Einlassventils der Geheimhaltung durch die Daimler AG unterliegen. Im unteren Totpunkt (UT) bei 540 °KW kehrt sich die Strömungsrichtung am ersten Einlassventil um. Fast ein Fünftel der Zylinderfüllung strömt hierbei in den Einlasskanal zurück. Der Motor folgt dem Prinzip des Atkinson-Kreisprozesses.

#### Schritt 7: Adiabatische Kompression

Die Kompression aller drei vorhandenen Zonen erfolgt analog zur Kompression in der Berechnung der Flammenausbreitung (Schritt 3). Die vorzeichenbehaftete Betrachtung der Masse und des Volumens der Drosselzone macht weitere Fallunterscheidungen überflüssig. Die Volumenänderungen dieses Schritts erfolgen adiabatisch:

$$V_{\rm D,7} = V_{\rm D,6} \cdot \frac{1}{\varepsilon_7},$$
 (4.71)

$$V_{\rm U,7} = V_{\rm U,5} \cdot \frac{1}{\varepsilon_7},$$
 (4.72)

$$V_{\rm V,7} = V_{\rm V,5} \cdot \frac{1}{\varepsilon_7}.$$
 (4.73)



Abbildung 4.11.: Die Massenströme durch Ein- und Auslassventile hängen von dem Druck im jeweiligen Kanal, dem Zylinderinnendruck und dem Ventilhub ab.

Das Kompressionsverhältnis

$$\varepsilon_7 = \frac{V_{\rm D,6} + V_{\rm U,5} + V_{\rm V,5}}{V_{\rm Z,5}} \tag{4.74}$$

ist bei Einströmvorgängen größer als eins. Tritt dagegen Gas durch das Ventil aus, ist  $\varepsilon_7$  kleiner als eins und beschreibt daher eine Expansion. Der Massenstrom über die Systemgrenze ändert den Zylinderdruck zu

$$p_{\mathbf{Z},7} = p_{\mathbf{Z},5} \cdot \varepsilon_7{}^{\kappa}, \tag{4.75}$$

wobei der Isentropen exponent  $\kappa$  hier als massengemittelter Wert des gesamten Brennraums angenommen wird. Die Temperaturen der drei Zonen werden mithilfe des idealen Gasgesetzes bestimmt:

$$T_{\rm D,7} = \frac{p_{\rm Z,7} \ V_{\rm D,7} \ M_{\rm HD}}{m_{\rm D,6} \ R_{\rm m}},\tag{4.76}$$

$$T_{\rm U,7} = \frac{p_{\rm Z,7} \ V_{\rm U,7} \ M_{\rm U}}{m_{\rm U,1} \ R_{\rm m}},\tag{4.77}$$

$$T_{\rm V,7} = \frac{p_{\rm Z,7} \ V_{\rm V,7} \ M_{\rm V}}{m_{\rm V,4} \ R_{\rm m}}.$$
(4.78)

#### Schritt 8: Zusammenführung

Abschließend wird die Drosselzone aufgelöst,

$$V_{\rm D,8} = 0,$$
 (4.79)

$$m_{\rm D,8} = 0.$$
 (4.80)

Das Volumen der Drosselzone des vorherigen Schritts  $V_{D,7}$  wird im Falle eines Einlassventils dem unverbrannten Volumen zugeschlagen, im Falle eines Auslassventils dem verbrannten Volumen. Würde bei Ausströmvorgängen jedoch das Volumen der unverbrannten beziehungsweise der verbrannten Zone hierdurch negativ, so wird die jeweils andere Zone beeinflusst. Sollte zum Beispiel kurz nach dem Öffnen des Einlassventils der Druck eines vollständig ausgebrannten Brennraums größer sein als der Druck im Einlasskanal, so strömt verbrannte Gasmasse entlang des Einlassventils. Die zugehörigen Gleichungen lauten:

$$V_{\mathrm{U},8} = \begin{cases} V_{\mathrm{U},7} + V_{\mathrm{D},7} & \text{falls} (\mathrm{EV} \land (V_{\mathrm{U},7} + V_{\mathrm{D},7}) \ge 0) \\ & \vee (\mathrm{AV} \land (V_{\mathrm{V},7} + V_{\mathrm{D},7}) < 0), \\ V_{\mathrm{U},7} & \text{falls} (\mathrm{AV} \land (V_{\mathrm{V},7} + V_{\mathrm{D},7}) \ge 0) \\ & \vee (\mathrm{EV} \land (V_{\mathrm{U},7} + V_{\mathrm{D},7}) < 0), \\ \end{cases}$$
(4.81)  
$$V_{\mathrm{V},8} = \begin{cases} V_{\mathrm{V},7} & \text{falls} (\mathrm{EV} \land (V_{\mathrm{U},7} + V_{\mathrm{D},7}) \ge 0) \\ & \vee (\mathrm{AV} \land (V_{\mathrm{V},7} + V_{\mathrm{D},7}) \ge 0) \\ & \vee (\mathrm{AV} \land (V_{\mathrm{V},7} + V_{\mathrm{D},7}) < 0), \\ & V_{\mathrm{V},7} + V_{\mathrm{D},7} & \text{falls} (\mathrm{AV} \land (V_{\mathrm{V},7} + V_{\mathrm{D},7}) \ge 0) \\ & \vee (\mathrm{EV} \land (V_{\mathrm{U},7} + V_{\mathrm{D},7}) \ge 0) \\ & \vee (\mathrm{EV} \land (V_{\mathrm{U},7} + V_{\mathrm{D},7}) < 0). \end{cases} \end{cases}$$

Gleiches gilt für die Massen der beiden verbleibenden Zonen:

$$m_{\mathrm{U},8} = \begin{cases} m_{\mathrm{U},1} + m_{\mathrm{D},6} & \text{falls} (\mathrm{EV} \land (m_{\mathrm{U},1} + m_{\mathrm{D},6}) \ge 0) \\ & \lor (\mathrm{AV} \land (m_{\mathrm{V},4} + m_{\mathrm{D},6}) < 0), \\ m_{\mathrm{U},1} & \text{falls} (\mathrm{AV} \land (m_{\mathrm{V},4} + m_{\mathrm{D},6}) \ge 0) \\ & \lor (\mathrm{EV} \land (m_{\mathrm{U},1} + m_{\mathrm{D},6}) < 0), \\ \end{cases} \qquad (4.83)$$

$$m_{\mathrm{V},8} = \begin{cases} m_{\mathrm{V},4} + m_{\mathrm{D},6} & \text{falls} (\mathrm{EV} \land (m_{\mathrm{U},1} + m_{\mathrm{D},6}) < 0), \\ & \lor (\mathrm{AV} \land (m_{\mathrm{V},4} + m_{\mathrm{D},6}) < 0), \\ & & \lor (\mathrm{AV} \land (m_{\mathrm{V},4} + m_{\mathrm{D},6}) < 0), \\ & & & \lor (\mathrm{EV} \land (m_{\mathrm{U},1} + m_{\mathrm{D},6}) < 0), \\ & & & \lor (\mathrm{EV} \land (m_{\mathrm{U},1} + m_{\mathrm{D},6}) < 0). \end{cases}$$

Durch den Mischungsprozess wird die Temperatur derjenigen Zone verändert, deren Masse sich geändert hat. Es gilt:

$$T_{\rm U,8} = \frac{(m_{\rm U,8} - m_{\rm U,1}) c_{\rm P,HD} T_{\rm D,7} + m_{\rm U,1} c_{\rm P,U,7} T_{\rm U,7}}{(m_{\rm U,8} - m_{\rm U,1}) c_{\rm P,HD} + m_{\rm U,1} c_{\rm P,U,7}},$$
(4.85)

$$T_{\rm V,8} = \frac{(m_{\rm V,8} - m_{\rm V,4}) c_{\rm P,HD} T_{\rm D,7} + m_{\rm V,4} c_{\rm P,V,7} T_{\rm V,7}}{(m_{\rm V,8} - m_{\rm V,4}) c_{\rm P,HD} + m_{\rm V,4} c_{\rm P,V,7}}.$$
(4.86)

Die in diesem achten Schritt berechneten Zustandsgrößen bilden die Ausgangsgrößen für das folgende Ventil, oder – im Fall des zuletzt berechneten Ventils – die Zustandsgrößen des nächsten Zeitschritts. Das Zylindermodell zur Simulation der vier Takte eines Gasmotors ist damit vollständig beschrieben. Jedoch werden im Folgenden Submodelle erläutert, welche die Zustandsgrößen im Brennraum nicht beeinträchtigen. Hierzu gehören eine Motorindizierung und ein thermisches Flammenlöschmodell.

# 4.3.7 Indizierung

Zur Bewertung der Motorleistung bei den untersuchten Betriebspunkten wird der indizierte Mitteldruck  $p_{m,i}$  herangezogen. Er ist definiert als das Integral des Zylinderdrucks über ein Arbeitsspiel, bezogen auf das Hubvolumen [55]:

$$p_{\rm m,i} = \frac{1}{V_{\rm h}} \cdot \oint p \, \mathrm{d}V. \tag{4.87}$$

Im zeitdiskreten zonalen Modell wird statt des Integrals eine Summe über zwei Motorumdrehungen gebildet. Dabei wird das arithmetische Mittel des Zylinderdrucks zu Beginn  $p_{Z,0}$  und zum Ende des Rechenschritts  $p_{Z,7}$  verwendet und das Differential dV durch die Differenz vom Zylindervolumen während dieses Rechenschritts ersetzt:

$$p_{\rm m,i} = \frac{1}{V_{\rm h}} \cdot \sum \left( \frac{p_{\rm Z,7} + p_{\rm Z,0}}{2} \cdot (V_{\rm Z,5} - V_{\rm Z,0}) \right). \tag{4.88}$$

Aus dem indizierten Mitteldruck wird auf die indizierte Leistung geschlossen:

$$P_{\rm i} = p_{\rm m,i} \cdot V_{\rm h} \cdot \frac{n}{2}.\tag{4.89}$$

Der indizierte Wirkungsgrad

$$\eta_{\rm i} = \frac{P_{\rm i}}{\dot{m}_{\rm CH_4} \ H_{\rm U}} = \frac{P_{\rm i}}{Y_{\rm CH_4}(t_{\rm ZZP}) \ m_{\rm U}(t_{\rm ZZP}) \ \frac{n}{2} \ H_{\rm U}} \tag{4.90}$$

bezieht die indizierte Leistung auf das Produkt aus unterem Heizwert und Kraftstoffeinsatz. Letzterer wird im zonalen Modell durch Multiplikation des Methananteils im unverbrannten Gas  $Y_{CH_4}(t_{ZZP})$  und der Masse des unverbrannten Gases  $m_U(t_{ZZP})$  unmittelbar vor der Zündung mit der halben Motordrehzahl ermittelt. Die indizierten Größen  $p_{m,i}$ ,  $P_i$  und  $\eta_i$  werden durch das zonale Modell tendenziell zu hoch im Vergleich zu entsprechenden Messdaten realer Motoren berechnet, sofern der Verbrennungsbeiwert  $c_{Verbrennung} = 1$  gewählt wird. Grund dafür sind vereinfachende Annahmen, beispielsweise die Annahme eines dichten Brennraums, einer vollkommenen Verbrennung oder einer adiabatischen Kompression und Expansion der Zylinderfüllung während der Kolbenbewegung.

# 4.3.8 Flammenlöschen an den Brennraumwänden

### Vom Löschen betroffene Wandflächen

Im zonalen Modell wird das bereits im Kap. 3 beschriebene Flammenlöschmodell nach Boust et al. für frontales Flammenauftreffen umgesetzt. Hierbei werden die drei Wände des Brennraums getrennt betrachtet, da diesen unterschiedliche Oberflächentemperaturen zugewiesen werden können. Innerhalb eines jeden Zeitschritts wird berechnet, welche Fläche die Flammenfront an den jeweiligen Wänden überstrichen hat, vergleiche Abb. 4.12. Im Falle des Zylinderkopfs ist dies die kreisringförmige Fläche  $A_{Q,ZK}$ , im Fall der Laufbuchse sind dies die Mantelflächen eines geometrischen Zylinders  $A_{Q,LB1}$  und  $A_{Q,LB2}$ und im Fall des Kolbens die kreisringförmige Fläche  $A_{Q,K}$ . Dabei muss berücksichtigt werden, dass der Koordinatenursprung stets in der Mitte des Ellipsoids liegt und sich daher zwischen zwei aufeinanderfolgenden Zeitschritten um  $\Delta x = x_{ZK,0} - x_{ZK,5}$  in x-Richtung verschiebt. Während der Verbrennungsphase gilt für die Quenchflächen:

$$A_{\rm Q,ZK} = \left(y_{\rm G1,5}^2 - y_{\rm G1,0}^2\right) \ \pi, \tag{4.91}$$

$$A_{\rm Q,LB1} = |x_{\rm G2,5} - (x_{\rm G2,0} - \Delta x)| \ 2\pi r_{\rm B}, \tag{4.92}$$

$$A_{\rm Q,LB2} = |x_{\rm G3,5} - (x_{\rm G3,0} - \Delta x)| \ 2\pi r_{\rm B}, \tag{4.93}$$

$$A_{\rm Q,K} = \left(y_{\rm G4,5}^2 - y_{\rm G4,0}^2\right) \ \pi. \tag{4.94}$$

Hierfür sind die Integrationsgrenzen für den Zeitpunkt vor der Verbrennung (Index "0") und nach der Betrachtung der Kolbenbewegung (Index "5") gemäß Gln. (4.10) - (4.13) auf S. 53 zu bestimmen. Die zugehörigen *y*-Werte sind durch die Ellipsen-Gl. (4.4), festgelegt.



Abbildung 4.12.: Flammenlöschen an den Brennraumwänden im zonalen Modell

#### Quenchabstände

Auf Basis der im Abschn. 3.5 gewonnenen Erkenntnisse wird für den Quenchabstand der Zusammenhang Gl. (3.14) umgesetzt,

$$\delta_{\mathbf{Q},i} = \frac{\lambda_{\mathbf{Q},i} \left( T_{\mathbf{V},5} - T_{\mathbf{W},i} \right)}{0.2 \cdot Y_{\mathrm{CH}_4} \ H_{\mathrm{U}} \ s_{\mathrm{L},\mathrm{Q},i} \ \rho_{\mathrm{U},\mathrm{Q},i}}.$$
(4.95)

Aufgrund der unterschiedlichen Wandtemperaturen  $T_{W,i}$  ergibt sich für jede Wand ein eigener Quenchabstand. Der Index *i* steht folglich für ZK (Zylinderkopf), LB1 (obere Quenchfläche der Laufbuchse), LB2 (untere Quenchfläche der Laufbuchse) oder K (Kolben). Die Wärmeleitfähigkeiten der gequenchten Gasschichten  $\lambda_{Q,i}$  werden mithilfe temperaturabhängiger Polynome ([16], [54]) jeweils für die mittlere Temperatur der gequenchten Gasmasse bestimmt,

$$T_{\mathbf{Q},i} = \frac{T_{\mathbf{W},i} + T_{\mathbf{V},5}}{2}.$$
(4.96)

Zur Bestimmung der laminaren Brenngeschwindigkeiten im Augenblick des Flammenlöschens  $s_{L,Q,i}$  sind die Temperaturen des unverbrannten Gases nahe der Wand  $T_{U,Q,i}$  entscheidend. Aufgrund der kühlenden Wände liegen diese unter der Temperatur des wandfernen unverbrannten Gases. Sie werden als mittlere Temperaturen

$$T_{\rm U,Q,i} = \frac{T_{\rm W,i} + T_{\rm U,5}}{2} \tag{4.97}$$

angenähert. Die Dichten derselben Gasmassen  $\rho_{U,Q,i}$  sind für die Wärmefreisetzung der Flammenfront bedeutsam und werden mithilfe des idealen Gasgesetzes bestimmt:

$$\rho_{\rm U,Q,i} = \frac{p_{\rm Z,5} \ M_{\rm U}}{T_{\rm U,Q,i} \ R_{\rm m}}.$$
(4.98)

Das im Abschn. 3.5 umgesetzte Flammenlöschmodell unterscheidet sich in einem Detail von dem Flammenlöschmodell der zonalen Simulation: Der im Postprocessing der CFD realisierte Ansatz setzt die Temperatur des unverbrannten Gases nahe der Wand mit der Wandtemperatur gleich. Diese ungenauere Approximation war nötig, um nur zeitaufgelöste (ortsunabhängige) Ergebnisse der CFD-Simulation zu verarbeiten. Die Konsequenz ist insbesondere eine niedriger angenommene laminare Brenngeschwindigkeit während des Quenchvorgangs, was letztendlich zu größeren Quenchabständen führen würde als im hier gezeigten Ansatz des zonalen Modells. Um Quenchabstände in Übereinstimmung mit den Messwerten Labudas et al. zu erhalten, wird im zonalen Modell daher der Wandwärmestrom im Augenblick des Löschens auf 20 % der Wärmefreisetzung der Flamme festgesetzt, also  $\varphi_{\rm Q} = 0.2$ . Die Abb. 4.13 zeigt die berechneten Quenchabstände auf Basis des zonalen Modells für eine Wandtemperatur von  $T_{\rm W} = 293$  K zusammen mit den experimentellen Daten von Labuda et al. ( $T_{\rm W} = 293$  K) und den reaktionskinetischen Simulationen von Westbrook et al. ( $T_{\rm W} = 300$  K).

### Unverbrannte Kohlenwasserstoffe

Zur Abschätzung der Kraftstoffmasse, die der Hauptverbrennung entkommt, ist nicht allein der Quenchabstand von Bedeutung. Durch die Bewegung des Kolbens und durch die Verbrennung ändert sich die Dichte der gequenchten Gasschicht laufend. Die Massen unverbrannten Methans bezogen auf ihre Quenchflächen sind



**Abbildung 4.13.:** Vergleich der berechneten Quenchabstände des zonalen Zylindermodells mit den Quenchabständen, welche reaktionskinetischen Berechnungen [88] entstammen, und die in einer Konstantvolumenkammer gemessen wurden [45]. Die Wandtemperaturen entsprechen Raumtemperatur.

mit den Dichten der jeweiligen gequenchten Schicht

$$\rho_{\mathbf{Q},i} = \frac{p_{\mathbf{Z},5} \ M_{\mathbf{U}}}{T_{\mathbf{Q},i} \ R_{\mathbf{m}}}.$$
(4.100)

Die zeitlichen Ableitungen der Kraftstoffmassen, welche der Hauptverbrennung entkommen, sind

$$\dot{m}_{\rm CH_4,Q,i} = Y_{\rm CH_4} \ \rho_{\rm Q,i} \ \delta_{\rm Q,i} \ \dot{A}_{\rm Q,i}, \tag{4.101}$$

die enthaltenen zeitlichen Ableitungen der Quenchflächen  $\dot{A}_{Q,i} = A_{Q,i}/\Delta t$ werden für alle Wände mithilfe der Gln. (4.91) – (4.94) gebildet. Auf Basis der Gl. (4.101) können Aussagen über die Entstehungsorte und -zeitpunkte unverbrannter Kohlenwasserstoffe getroffen werden. Die zeitlichen Integrale dieser Gleichung werden im zeitdiskreten Modell erneut als Summe

$$m_{\mathrm{CH}_4,\mathrm{Q},i} = \sum \left( \dot{m}_{\mathrm{CH}_4,\mathrm{Q},i} \cdot \Delta t \right) \tag{4.102}$$

berechnet und sind zur Bewertung des gewählten Motorbetriebspunkts geeignet. Diese Summen werden zu Beginn jedes Ansaugtaktes auf null zurückgesetzt.

# 4.4 Ergebnisse des zonalen Zylindermodells

In diesem Abschnitt erfolgt die Darstellung der Ergebnisse des zonalen Modells. Hierzu werden zunächst zwei Betriebspunkte definiert. Für einen dieser Betriebspunkte wird die Flammenausbreitung anhand kurbelwinkelaufgelöster geometrischer Parameter des Brennraums und der Flammenfront visualisiert. Anschließend werden thermodynamische Zustandsgrößen als Funktion des Kurbelwinkels dargestellt. Anschließend werden die Indikatordiagramme (p-V-Diagramme) beider Betriebspunkte gezeigt, wobei auch die Ladungswechselschleifen untersucht werden. Schließlich werden die Ergebnisse des Flammenlöschmodells für beide Betriebspunkte dargestellt und verglichen.

# 4.4.1 Untersuchte Betriebspunkte

Anhand zweier Betriebspunkte wird das zonalen Modell mit Messdaten validiert. Die Motordaten des herangezogenen Versuchsmotors der Daimler AG Stuttgart finden sich in Tab. 4.3. Es handelt sich um einen Methangas-betriebenen Motor mit  $1.28 \,\mathrm{dm^3}$  Hubraum. In derselben Tabelle sind zwei Teillast-

	Motordaten		
Parameter	Wert		
Anzahl Zylinder	1		
Zylinderbohrung	$110\mathrm{mm}$		
Kolbenhub	$135\mathrm{mm}$		
Hubvolumen	$1.28\mathrm{dm}^3$		
Kompressionsverhältnis	13.15		
Kraftstoff	Methan		
Inertgaszusammensetzung	75% N <sub>2</sub> , $25%$ CO <sub>2</sub>		
	Betriebspunkte		
Parameter	Betriebspunkt1	Betriebspunkt $2$	
Motordrehzahl	$1400\mathrm{min}^{-1}$		
Last	Teillast		
Stöchiometrie ( $\phi = \lambda^{-1}$ )	1.0		
Inertgasbeimengung	0%	22%	

Tabelle 4.3.: Daten des simulierten Gasmotors und untersuchte Betriebspunkte

0.134 MPa

0.148 MPa

Zündzeitpunkt

Druck im Einlasskanal

Druck im Auslasskanal

12.6 °KW vor OT

22.8°KW vor OT

0.167 MPa

0.183 MPa

punkte definiert, zu denen die Daimler AG freundlicherweise Indizierdaten zur Verfügung gestellt hat. Sie unterscheiden sich in der Menge beigemischten Inertgases (0 bzw. 22 Massenprozent). Zum Angleichen des Verbrennungsschwerpunkts wurde der Zündzeitpunkt angepasst. Ferner unterscheiden sich die mittleren Drücke im Einlass- und Auslasskanal. Am Betriebspunkt 1 werden vier hierfür vorgesehene Parameter des zonalen Modells kalibriert (ein Parameter zur Vollständigkeit der Kraftstoffumsetzung, zwei Parameter für das Turbulenzmodell sowie der Durchflussbeiwert der Ventile) und für den zweiten Betriebspunkt beibehalten.

Abgesehen von der Kolbenoberfläche weicht die Geometrie des Versuchsmotors nur in geringem Maße vom modellierten zylinderförmigen Brennraum ab. Der Kolben des realen Motors verfügt allerdings über eine Omega-Mulde, welche das Modell nicht wiedergibt. Stattdessen werden die geometrischen Parameter des zonalen Modells derart gewählt, dass das Kompressionsvolumen korrekt ist. Dies führt gegenüber der realen Geometrie zu einer größeren Quetschspalthöhe. Zudem wird der Versuchsmotor mit Erdgas anstelle von reinem Methan betrieben. Der Heizwert des verwendeten Erdgases liegt zwischen 46 und 48  $\frac{MJ}{kg}$  und damit etwas tiefer als der reinen Methans. Das im Modell beigemengte Inertgas ist ein Gemisch aus Stickstoff und Kohlenstoffdioxid, wohingegen das reale Inertgas einer Abgasrückführung entstammt.

# 4.4.2 Kurbelwinkelaufgelöste Darstellung

Zunächst wird die simulierte Flammenfront für den ersten Betriebspunkt untersucht. Die Abb. 4.14 zeigt im obersten Diagramm die geometrischen Parameter der ellipsoidförmigen Flammenfront. Der Ellipsoid-Radius entspricht der maximalen Flammenausbreitung von der Zylindermitte in radialer Richtung. Er steigt während der Verbrennung vom halben Zündkeimdurchmesser (hier: 0.1 mm) bis zum halben Bohrungsdurchmesser des Zylinders. Der Deformationsfaktor gibt an, inwieweit das berechnete Ellipsoid von der Kugelform abweicht. Zum Zeitpunkt der Zündung wird er mit dem Wert eins initialisiert. Die Ausdehnung der Flammenfront in axialer Richtung entspricht dem Produkt aus Deformationsfaktor und Radius.

Das zweite Diagramm zeigt die radiale Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront zusammen mit der makroskopischen und der laminaren Brenngeschwindigkeit. Der Beginn der modellierten Flammenausbreitung ist um den chemischen Zündverzug von 1 ms gegenüber dem Zündzeitpunkt versetzt. Die laminare Brenngeschwindigkeit steigt während des Verbrennungprozesses insbesondere durch die thermische Kompression von  $0.63\,\frac{\rm m}{\rm s}$  auf  $0.83\,\frac{\rm m}{\rm s}$  an. Die makroskopische Brenngeschwindigkeit nimmt mit zunehmender Flammenballgröße aufgrund der Turbulenz zu, bis sie ab 5°KW vor OT schließlich vollturbulent ist. Ab 7°KW nach OT setzt die Laminarisierungsphase durch die Annäherung der Flamme an die Zylinderlaufbuchse ein, wo sie 22 °KW nach OT endgültig erlischt. Die radiale Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme unterliegt zusätzlich der thermische Ausdehnung der reagierenden Gase. Daher ist sie stets größer als die makroskopische Brenngeschwindigkeit – zu Beginn der Verbrennung etwa um den Faktor 2.6. Mit zunehmender volumetrischer Umsetzung gleichen sich beide Geschwindigkeiten aneinander an, weil die thermische Kompression stärker das bereits verbrannte und weniger das unverbrannte Gas betrifft und somit die Flammenfront weniger stark nach vorn treibt. Am Ende der Verbrennung wird die Flammenfront durch die thermische Ausdehnung nicht mehr zusätzlich beschleunigt, das heißt, die Ausbreitungsgeschwindigkeit

ist dann gleich der makroskopischen Brenngeschwindigkeit.

Das dritte Diagramm zeigt schließlich die makroskopische Flammenfrontfläche. Im gezeigten Fall findet ab dem Auftreffen der Flammenfront auf den Kolben eine überwiegend radiale Flammenausbreitung statt, sodass hier die Flammenfrontfläche nahezu linear mit der Zeit ansteigt. Sobald die Flammenfront die Laufbuchse erreicht, sinkt ihre Fläche zügig.

Im Diagramm der Flammenfrontfläche sind vier Zeitpunkte markiert, zu denen Abb. 4.15 die simulierte ellipsoidförmige Flammenfront maßstäblich wiedergibt. Die Darstellung des Brennraums berücksichtigt zugleich die Kolbenbewegung. Es herrscht hohe Turbulenz, und auch die stöchiometrische Gasmischung ohne Zugabe von Inertgas sorgen für eine zügige Flammenausbreitung im ersten Betriebspunkt. In diesem speziellen Fall ist die Beschreibung der Flammenfront als Ellipsoid statt als Sphäre nicht von übermäßiger Bedeutung. Dennoch beträgt der Deformationsfaktor am Verbrennungsende 1.5 (zum Vergleich: im Betriebspunkt 2 hat er dann einen Wert von 2.1). Auch verschiebt sich der eingezeichnete Mittelpunkt des Flammenballs nicht stark. Im dargestellten Fall verlagert er sich im Verlauf der Verbrennung nur um 1.9 mm in axialer Brennraumrichtung – im zweiten Betriebspunkt sind dies 3.3 mm.

Für den Betriebspunkt 1 stellt Abb. 4.16 kurbelwinkelaufgelöste Zustandsgrößen des zonalen Modells dar. Das oberste Diagramm zeigt die Wärmefreisetzung. Sie steigt nach der Zündung durch die sich vergrößernde Flammenfrontfläche rasch an. Zum Ende des Verbrennungsprozesses erreicht die verbliebene Flammenfront die Zylinderlaufbuchse frontal. Durch das Modellieren des Laminarisierens der Flammenfront bei Annäherung an diese Wand bricht die Wärmefreisetzung nicht abrupt ein.

Das zweite Diagramm zeigt den modellierten und den gemessenen Druckverlauf. Trotz der unterschiedlichen Brennraumform konnte der gemessene Zylinderinnendruck präzise wiedergegeben werden.

Des Weiteren zeigt Abb. 4.16 die Temperatur-, Massen- und Volumenverläufe des gesamten Brennraums, der unverbrannten und der verbrannten Zone. Auch vor der Zündung ist bereits eine Zone verbrannter Gasmasse vorhanden. Sie entspricht dem Restgas, welches während des vorangegangenen Ladungswechsels im Zylinder verblieb. Im Augenblick der Zündung werden im Modell die Restgaszone und die Zone unverbrannten Gemisches unter Erhöhung der inneren AGR-Rate (im dargestellten Fall auf 4.7%) zusammengefasst. Dies macht sich durch Unstetigkeiten in den unteren drei Diagrammen bemerkbar.



**Abbildung 4.14.:** Kurbelwinkelaufgelöste Parameter der Flammenausbreitung des zonalen Modells für den Betriebspunkt 1 (ohne externe AGR)



Abbildung 4.15.: Maßstäbliche Darstellung der Lage und Form der ellipsoidförmigen Flammenfront im Brennaum: 1. zum Zündzeitpunkt (der Zündkeimradius ist 10-fach vergrößert dargestellt), 2. beim Auftreffen der Flammenfront auf den Kolben, 3. im ZOT und 4. beim Auftreffen der Flammenfront auf die Laufbuchse



**Abbildung 4.16.:** Kurbelwinkelaufgelöste Zustandsgrößen des zonalen Modells für den Betriebspunkt 1 (ohne externe AGR)

Die mittlere Brennraumtemperatur ist zum Zündzeitpunkt gleich der Temperatur der unverbrannten Gasmasse. Sie steigt während des Verbrennungsprozesses, weil der Einfluss der verbrannten Temperatur zunimmt. Am Ende der Verbrennung entspricht die mittlere Brennraumtemperatur der Temperatur der verbrannten Gasmasse. Die unverbrannte Zone existiert nun nicht mehr, weshalb keine eigene Temperatur definiert wird.

Die volumetrische Umsetzung geschieht etwas schneller als die spezifische. Dies ist gut am 50 %-Punkt zu erkennen, der im Fall des Volumens bereits bei 4.0 °KW nach ZOT, im Fall der Masse erst bei 6.6 °KW nach ZOT vorliegt. Ursache ist die Expansion der reagierenden Gase.

# 4.4.3 Indikatordiagramme

In diesem Abschnitt werden die Indikatordiagramme beider Betriebspunkte gezeigt und diskutiert. Die für die Niederdruckschleife, also für den Ladungswechsel, relevanten Motorgeometriedaten können Tab. 4.4 entnommen werden.

### Betriebspunkt 1

Die Abb. 4.17 zeigt Indikatordiagramme des ersten Betriebspunktes. Dargestellt sind der simulierte Verlauf des zonalen Modells, der Verlauf des idealen Otto-Kreisprozesses und über 200 Zyklen gemittelte Indizierdaten. Das Indikatordiagramm des idealen Otto-Kreisprozesses wurde ebenfalls mithilfe des zonalen Modells erstellt, indem eine unendlich schnelle Brenngeschwindigkeit, Zündung im OT und schlagartiges weites Öffnen und Schließen der Ventile

Ladungswechselrelevante Motordaten			
Parameter	Wert		
Anzahl Auslassventile pro Zylinder	2		
Relevanter AV-Durchmesser	$30\mathrm{mm}$		
Anzahl Einlassventile pro Zylinder	2		
Relevanter Durchmesser $\mathrm{EV}1$	$34\mathrm{mm}$		
Auslassventile öffnen	ab 101 °KW (79 °KW vor UT)		
Einlassventil 1 öffnet	ab 333 °KW (27 °KW vor LOT)		
Auslassventile schließen	bis $405 ^{\circ}\text{KW}$ ( $45 ^{\circ}\text{KW}$ nach LOT)		
Einlassventil 1 schließt	bis $648 ^{\circ}$ KW ( $108 ^{\circ}$ KW nach UT)		

**Tabelle 4.4.:** Für den Ladungswechsel relevante Geometriedaten des simuliertenGasmotors



**Abbildung 4.17.:** Indikatordiagramm der Hochdruck- und Niederdruckschleife für den Betriebspunkt 1 (ohne externe AGR)



**Abbildung 4.18.:** Indikatordiagramm der Hochdruck- und Niederdruckschleife für den Betriebspunkt 2 (mit 22% externer AGR)

in den Kolben-Umkehrpunkten (abgesehen vom späten "Einlass schließt", um den Atkinson-Kreisprozess beibehalten zu können) gewählt wurden. Das obere Diagramm belegt, dass das Modell die gesamte Hochdruckschleife gut wiedergibt.

In der darunter vergrößert dargestellten Niederdruckschleife kommt es zu größeren Abweichungen zwischen Modell und Messdaten, wobei dies zu erwarten ist. So werden die pulsierenden Schwankungen durch eine reflektierte Druckwelle im Zylinder bei geöffnetem Auslassventil nicht modelliert. Auch wird die Massenträgheit der strömenden Gase, welche den Auslassvorgang zum Ende des Auschiebetakts und den Einlassvorgang zum Ende des Ansaugtakts begünstigt, nicht berücksichtigt. Insgesamt berechnet das Modell eine zu kleine Ladungswechselschleife, was bedeutet, dass die zum Ladungswechsel benötigte Arbeit unterschätzt wird. Dies kann zwar durch Vermindern der Durchflussbeiwerte der Ventile verhindert werden, jedoch würde damit gleichzeitig die Füllmenge reduziert, was sich auf die Hochdruckschleife auswirkte.

### Betriebspunkt 2

Die Abb. 4.18 zeigt die Indikatordiagramme für den zweiten Betriebspunkt. Die Hochdruckschleifen beider Betriebspunkte ähneln sich trotz deutlich veränderter Reaktionskinetik durch die hohe AGR-Rate von 22 %. Der Grund ist die Verschiebung des Zündzeitpunkts um 10.2 °KW nach vorn. Der Spitzendruck fällt nun etwas höher aus. Der Zylinderinnendruck wird vom zonalen Modell auch im zweiten Betriebspunkt in guter Übereinstimmung mit den Indizierdaten wiedergegeben, obwohl die Kalibrierungsparameter des Modells aus Betriebspunkt 1 beibehalten wurden.

Die Drücke im Einsaug- und im Auslasskanal liegen im zweiten Betriebspunkt im Mittel 34 kPa über denen des ersten Betriebspunkts. Ferner fällt die Ladungswechselschleife etwas größer aus. Beide Effekte werden durch das Modell richtig dargestellt.

Auswertung der simulierten Indizierung			
	Betriebspunkt1	Betriebspunkt2	
Indizierter Mitteldruck	1.14 MPa	1.08 MPa	
Indizierte Leistung	$17.1\mathrm{kW}$	$16.2\mathrm{kW}$	
Indizierter Wirkungsgrad	41.4%	42.1%	

Tabelle 4.5.: Auswertung of	ler simulierten Indizierung
-----------------------------	-----------------------------

## Zusammenfassung

In Tab. 4.5 ist die Auswertung der simulierten Indizierdaten zusammengefasst. Aufgrund der Anpassung von Spitzendruck und Verbrennungsschwerpunkt ähneln sich die ausgewerteten Größen beider Betriebspunkte. Es ergibt sich für den Betriebspunkt 2 mit 22% AGR eine etwas niedrigere Leistung gegenüber dem ersten Betriebspunkt ohne AGR, gleichzeitig ist jedoch der Wirkungsgrad etwas höher.

# 4.4.4 Flammenlöschen an den Brennraumwänden

Es folgt die Darstellung der Ergebnisse des thermischen Flammenlöschmodells, das wie im Abschn. 4.3.8 erläutert in das zonale Zylindermodell implementiert ist. Beide Betriebspunkte werden untersucht und verglichen.

# Betriebspunkt 1

Abb. 4.19 zeigt im obersten Diagramm die Quenchabstände für den in Tab. 4.3 beschriebenen Gasmotor im Betriebspunkt 1. Die simulierten Quenchabstände liegen im Bereich von 20 bis 41 µm. Die Wandtemperaturen wurden für die Laufbuchse, den Kolben und den Zylinderkopf unterschiedlich gewählt:  $T_{W,LB} = 400 \text{ K}$ ,  $T_{W,K} = 500 \text{ K}$  und  $T_{W,ZK} = 550 \text{ K}$ . Allerdings ist der Einfluss auf die Quenchabstände gering, zumal sich die Temperaturdifferenzen  $(T_{V,5} - T_{W,i})$  der Gl. (4.95) aufgrund der hohen Temperatur der verbrannten Gasmasse wenig unterscheiden. Zudem kompensiert die dichteabhängige Wärmefreisetzung den Einfluss der Wandtemperatur teilweise (dies betrifft  $\rho_{U,Q,i}$  derselben Gleichung).

Im zweiten Diagramm ist die flächenbezogene Masse unverbrannten Methans gemäß Gl. (4.99) dargestellt. Hier zeigt sich, dass obwohl eine hohe Kompression der Zylinderfüllung die Quenchabstände reduziert, sie sich im Ergebnis negativ auf die Menge unverbrannter Kohlenwasserstoffe auswirkt. Der Grund hierfür liegt in der kompressionsbedingten Dichteänderung der Zylinderfüllung.

Das dritte Diagramm der Abb. 4.19 zeigt die zeitlichen Ableitungen der Kraftstoffmassen, die nicht an der Hauptverbrennung teilnehmen, entsprechend Gl. (4.101). Hieraus wird ersichtlich, dass die Flammenfront ungefähr 7°KW vor dem oberen Totpunkt den Zylinderkopf erreicht. 5°KW vor ZOT trifft die Flammenfront auf den deutlich weiter vom Zündort entfernt liegenden Kolben. Beide Flächen werden frontal getroffen, jedoch streift die Flamme anschließend



Abbildung 4.19.: Kurbelwinkelaufgelöste Größen des Flammenlöschmodells für den Betriebspunkt 1 (ohne externe AGR): Im Bereich des höchsten Drucks während der Verbrennung reduzieren sich die Quenchabstände zwar (oberstes Diagramm), jedoch beinhaltet die unverbrannt bleibende Schicht aufgrund der höheren Dichte auch mehr Methan (zweites Diagramm). Für die Rate des unverbrannt bleibenden Methans (drittes Diagramm) ist zudem die zeitliche Entwicklung der Quenchfläche entscheidend. Die integrierte Masse unverbrannter Kohlenwasserstoffe kann dem untersten Diagramm entnommen werden.


Abbildung 4.20.: Kurbelwinkelaufgelöste Größen des Flammenlöschmodells für den Betriebspunkt 2 (mit 22 % externer AGR): Der erhöhte Inertgasanteil dieses Betriebspunktes führt zu einer niedrigeren laminaren Brenngeschwindigkeit. Hiermit einher geht erstens eine geringere Wärmefreisetzung und folglich größere Quenchabstände, sowie zweitens ein langsamerer Ausbrand bei niedrigerem Druck und größerer Fläche der Zylinderlaufbuchse. All dies vergrößert die Menge des Methans, welches der Hauptverbrennung entgeht.

seitlich an den Wänden entlang. Die Werte der Massenströme sind während des seitlichen Quenchens nahezu gleich. Sie erreichen ihre Maxima 7°KW nach ZOT, danach fallen sie aufgrund der Minderung der Brenngeschwindigkeit durch wandnahes Laminarisieren der Flammenfront.

Schließlich sind im untersten Diagramm die integrierten Massen unverbrannter Kohlenwasserstoffe gemäß Gl. (4.102) dargestellt. Für den ersten Betriebspunkt zeigt sich, dass an der Kolbenoberfläche etwas mehr Methan der Hauptverbrennung entgeht als an der gleichgroßen Oberfläche des Zylinderkopfs. Hierfür ist die niedrigere Wandtemperatur des Kolbens verantwortlich. Im Bereich der Laufbuchse bleibt etwas weniger Methan unverbrannt. Weil sich die Fläche der Laufbuchse durch die Kolbenbewegung verändert, ist der Zeitpunkt des Auftreffens der Flammenfront bedeutsam. Liegt dieser Zeitpunkt nahe dem oberen Totpunkt der Kolbenbewegung, ist diese Fläche klein.

#### Betriebspunkt 2

Bei der Untersuchung des zweiten Betriebspunkts, Abb. 4.20, zeigt sich, dass die Flammenquenchabstände mit 35 bis 68 µm deutlich über denen des Betriebspunkts 1 liegen. Der hohe Inertgasanteil des zweiten Betriebspunkts führt zu einer niedrigeren laminaren Brenngeschwindigkeit mit entsprechend geringerer Wärmefreisetzung beim Quenchen, was den Quenchabstand um fast 75 % erhöht. Zusätzlich verursacht die reduzierte Brenngeschwindigkeit eine lange Ausbrandphase (bis 33 °KW nach ZOT) an der Zylinderlaufbuchse und in den Winkeln des Brennraums. Aufgrund der Expansion durch die Kolbenbewegung vermindert sich dabei der Zylinderdruck, wodurch gerade zum Ende des simulierten Verbrennungsvorgangs hohe Quenchabstände auftreten.

An der Laufbuchse entgeht im zweiten Betriebspunkt etwa ebenso viel Methan der Hauptverbrennung wie an der Zylinderkopf- und Kolbenoberfläche, was aus dem untersten Diagramm ersichtlich ist. Dies ist mehr als doppelt so viel wie im ersten Betriebspunkt. Ursache ist – neben den größeren Quenchabständen – der langsame Ausbrand, währenddessen sich der Kolben nach unten bewegt und so die Fläche der Laufbuchse vergrößert.

### Zusammenfassung

Die Tab. 4.6 fasst die Ergebnisse des Flammenlöschmodells für beide gewählten Betriebspunkte zusammen. Trotz ähnlicher Indizierdaten unterscheiden sich die modellierten unverbrannten Kohlenwasserstoffe an den Brennraumwän-

Auswertung der simulierten UHC								
Betriebspunkt 1 Betriebspunkt 2								
UHC an Brennraumwänden	0.49 mg	0.87 mg						
Brennstoffschlupf								
durch Wandquenchen	4.7%o	8.9%o						

**Tabelle 4.6.:** Zusammenfassung der simulierten unverbrannten Kohlenwasser-stoffe durch Flammenlöschen an kalten Brennraumwänden

den deutlich. Im ersten Betriebspunkt verbleibt weniger Brennstoff an den Wänden unverbrannt als im zweiten Betriebspunkt. Messungen der UHC-Konzentrationen im Abgas zeigen dieselbe deutliche Tendenz, wobei betont werden muss, dass hierin weitere Quellen unverbrannter Kohlenwasserstoffe enthalten sind.

## 5. Zusammenfassung und kritische Betrachtung der Ergebnisse

Im Rahmen der vorliegenden Dissertation wurden reaktionskinetische Berechnungen für Methan-Luft-Gemische über den gesamten motorisch relevanten Bereich durchgeführt. Neben dem Druck und der Temperatur des unverbrannten Gasgemisches wurden das Äquivalenzverhältnis und die AGR-Rate variiert. Der hinsichtlich des Drucks und der Temperatur extrapoliert angewandte Reaktionsmechanismus liefert etwas höhere laminare Brenngeschwindigkeiten als die in der Literatur verfügbaren Messwerte. Im untersuchten Bereich bis 20.0 MPa und 1500 K sind einige Rechnungen nicht konvergiert. Dennoch konnten problemlos empirische Näherungsgleichungen für die laminare Brenngeschwindigkeit, für die thermische laminare Flammenfrontdicke und die adiabatische Flammentemperatur abgeleitet werden.

Neben den Grundlagen der Flammenausbreitung wurden auch die des Flammenlöschens untersucht. Dies geschah durch Anwenden und Anpassen des thermischen Flammenlöschmodells von Boust et al. [15], welches einen physiknahen Ansatz verfolgt und daher einen weiten Gültigkeitsbereich aufweist. Von vier abgeleitete Varianten dieses Ansatzes wurde die geeignetste durch Abgleich an Messdaten [45] und reaktionskinetischen Simulationen [88] ermittelt. Mithilfe dieses Flammenlöschmodells kann der Quenchabstand für verschiedene Drücke, Gastemperaturen, Wandtemperaturen und Gaszusammensetzungen bestimmt werden.

Anschließend wurde ein zonales thermodynamisches Zylindermodells für einen Methangasmotor mit direkter Zündung im Brennraum realisiert. Bei der Entwicklung des zonalen Modells wurde darauf geachtet, physiknahe Submodelle empirischen Korrelationen vorzuziehen. Das Modell berücksichtigt die Deformation der Flammenfront durch die Kolbenbewegung zu einem Ellipsoid, und bildet auch den Ladungswechsel ab. Somit kann das von Modellen dieser Art oft vernachlässigte verbrannte Restgas berechnet und berücksichtigt werden. Trotz derzeit noch fehlender Submodelle für den Wandwärmeübergang und für unvollkommene Verbrennung sowie Einschränkungen hinsichtlich der Brennraumgeometrie liefert das Modell Ergebnisse in guter Übereinstimmung mit Indizierdaten. Dabei konnten die Werte der (wenigen) wählbaren Parameter zur Anpassung der Turbulenz und des Verbrennungsprozesses zwischen zwei Betriebspunkten beibehalten werden. Die beiden Betriebspunkte unterschieden sich hinsichtlich der externen AGR-Rate, des Zündzeitpunkts und der Drücke im Einlass- und Auslasskanal.

In das zonale Zylindermodell wurde auch der ausgewählte Ansatz zur Berechnung des Flammenlöschens eingebunden. Im Zusammenspiel des Flammenlöschmodells mit dem zonalen Zylindermodell können an den Wänden unverbrannt bleibende Kohlenwasserstoffe lokalisiert und quantifiziert werden. So zeigte sich, dass bei niedrigem Zylinderdruck – also im späteren Teil des Expansionstaktes – der Quenchabstand zwar deutlich höher ist als bei hohem Druck, dies jedoch aufgrund der gleichzeitig geringeren Dichte nicht zwangsläufig zu mehr UHC an den Wänden führt. Allerdings erhöht sich die Menge der UHC durch die sich während des Expansionstaktes vergrößernde Fläche der Zylinderlaufbuchse.

Das Modell zeigte, dass die Steigerung der externen AGR-Rate von 0 auf 22 % erstens unmittelbar zu größeren Quenchabständen und zweitens zu einer langsameren Flammenausbreitung und folglich späterem Flammenlöschen an den Wänden führt. Beides wirkt sich ungünstig auf die Menge unverbrannt bleibenden Gases aus. Die so ermittelten unverbrannten Kohlenwasserstoffe aus wandnahem Flammenlöschen finden sich allerdings nicht im Abgas. Die UHC unterliegen noch einer stark temperaturabhängigen Nachoxidation, die weiterer Untersuchungen bedarf. Doch auch für eine weitere Nachoxidation ist es günstig, wenn die Flamme früh – und damit zugleich bei höherer Gastemperatur – auf die Brennraumwände trifft.

## 6. Ausblick

Diese Arbeit stellt einen Teilschritt auf dem Weg zu einem umfassenden Berechnungsmodell für unverbrannte Kohlenwasserstoffe in Erd- und Biogasmotoren dar. Bereits jetzt ist das zonale Zylindermodell durch die freie wählbare Zusammensetzung des Gasgemisches aus den Komponenten N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O und CO<sub>2</sub> in der Lage, die Verbrennung dieser Gase unter Vernachlässigung längerkettiger Komponenten für beliebige Äquivalenzverhältnisse und Abgasrückführraten darzustellen. Längerkettige Kohlenwasserstoffe können bei Bedarf nachträglich implementiert werden. Hierbei ist zu beachten, dass höhere Konzentrationen langkettiger Kohlenwasserstoffe oder Zugabe von Wasserstoff eine Anpassung der Näherungsfunktion für die laminare Brenngeschwindigkeit erforderlich machen.

Das zonale Zylindermodell kann ferner durch Einbinden von Submodellen für das chemische Gleichgewicht und für den Wandwärmeverlust, zum Beispiel nach Bargende [7], [55], sinnvoll ergänzt werden. Auch eine Flexibilisierung der Brennraumgeometrie durch Einbringen einer Topfmulde in den sonst flachen Kolben ist mit überschaubarem Aufwand durchführbar. Hiervon wäre insbesondere die mathematische Beschreibung der Flammenfrontfläche betroffen. Wie in anderen zonalen Modellen können die hierdurch auftretenden Quetschströmungen allerdings nicht dargestellt werden.

Zwar wurde erwähnt, Blow-By-Verluste am Kolben blieben unberücksichtigt, jedoch geht diese Einschränkung auf fehlende Eingangsdaten zurück. Die physikalische Beschreibung des entweichenden Gases kann mithilfe der Drosselgleichung analog zu den modellierten Ventilen erfolgen, wobei der Austrittsquerschnitt konstant gehalten wird – und bekannt sein muss – und der Gegendruck dem Druck im Kurbelgehäuse entspricht, vgl. [32].

Während des Ausschiebetakts zeigten sich größere Abweichungen zwischen dem Modell und den Indizierdaten. Dafür sind die im Modell nicht berücksichtigte Massenträgheiten des ausströmenden Gases und des Gases im Abgastrakt verantwortlich. Sollte der Fokus auf den Niederdruckprozess verlagert werden, wäre die Implementierung der Massenträgheit erstrebenswert. Grundsätzlich ist das modular aufgebaute Modell für das Einbinden weiterer Emissionsmodelle geeignet. Zum Beispiel wäre ein  $NO_x$ -Modell nach Zel'dovich [93], [48], [55] denkbar. Auch weitere Quellen unverbrannter Kohlenwasserstoffe können modelliert werden. So bietet sich das Einbringen von Submodellen für seitliches Quenchen und Flammenlöschen in Spalten an. Deutlich aufwändiger dagegen ist die erstrebenswerte Berücksichtigung der Nachoxidationen, um schließlich von den innermotorischen Quellen auf die UHC-Emission schließen zu können. Hier müssen die Nachoxidationen reaktionskinetisch mit einem eindimensionalen Rührreaktor-Modell ("Perfectly Stirred Reactor", PSR) berechnet und dann mithilfe geeigneter Kennfelder auf das zonale Modell übertragen werden. Das Übertreten speziell der Gase aus den Spalten durch das Auslassventil kann nur durch eine numerische Strömungssimulation dargestellt werden. Gegebenenfalls können empirische Zusammenhänge für die Menge dieser übertretenden Gase zur Brennraumgeometrie und den Motor-Betriebsparametern gefunden werden.

### Literaturverzeichnis

- ALKIDAS, A. C.: Combustion-Chamber Crevices: The Major Source of Engine-Out Hydrocarbon Emissions under Fully Warmed Conditions. In: Progress in Energy and Combustion Science 25 (1999), Nr. 3, S. 253–273
- [2] ALKIDAS, A. C.; DREWS, R. J.: Effects on Piston Crevice Geometry on the Steady-State Engine-Out Hydrocarbons Emission of a SI Engine. In: SAE 952537, 1995
- [3] ANDREWS, G.; BRADLEY, D.: The Burning Velocity of Methane-Air Mixtures. In: Combustion and Flame 19 (1972), Nr. 2, S. 275–288
- [4] AUER, M.: Erstellung phänomenologischer Modelle zur Vorausberechnung des Brennverlaufes von Magerkonzept-Gasmotoren. TU München, Diss., 2010
- [5] AUER, M.; WACHTMEISTER, G.: Phänomenologische Modelle zur Vorausberechnung des Brennverlaufs von Gasmotoren. In: MTZ - Motortechnische Zeitschrift 70 (2009), Nr. 6, S. 498–505
- [6] AVL LIST GMBH: AVL Fire. www.avl.com. Version: 2009
- BARGENDE, M.: Ein Gleichungsansatz zur Berechnung der instationären Wandwärmeverluste im Hochdruckteil von Ottomotoren. TH Darmstadt, Diss., 1991
- [8] BAUER, M.; WACHTMEISTER, G.: Entstehung von Formaldehyd in Mager-Gasmotoren. In: MTZ Motortechnische Zeitschrift 70 (2009), Nr. 7–8, S. 580–587
- BELLENOUE, M.; KAGEYAMA, T.; LABUDA, S.; SOTTON, J.: Direct Measurement of Laminar Flame Quenching Distance in a Closed Vessel. In: *Experimental Thermal and Fluid Science* 27 (2003), Nr. 3, S. 323–331

- [10] BETAGERI, V.; RATZKE, A.; DINKELACKER, F.: Simulation of Flame Propagation and Unburnt Hydrocarbon Emissions in a Single Cylinder Gas Engine. Leibniz Universität Hannover, Master-Arbeit, 2011
- [11] BLINT, R. J.; BECHTEL, J. H.: Hydrocarbon Combustion near a Cooled Wall. In: SAE 820063 (1982)
- [12] BLIZARD, N. C.; KECK, J. C.: Experimental and Theoretical Investigation of Turbulent Burning Model for Internal Combustion Engines. In: SAE 740191, 1974
- [13] BÖSWIRTH, L.; BSCHORER, S.: Technische Strömungslehre. 9. Aufl.
   Wiesbaden: Vieweg & Teubner, 2012
- [14] BOUGRINE, S.; RICHARD, S.; NICOLLE, A.; VEYNANTE, D.: Numerical Study of Laminar Flame Properties of Diluted Methane-Hydrogen-Air Flames at High Pressure and Temperature Using Detailed Chemistry. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 36 (2011), Nr. 18, S. 12035– 12047
- [15] BOUST, B.; SOTTON, J.; LABUDA, S. A.; BELLENOUE, M.: A Thermal Formulation for Single-Wall Quenching of Transient Laminar Flames. In: *Combustion and Flame* 149 (2007), Nr. 3, S. 286–294
- [16] BURCAT, A.; MCBRIDE, B.: 1994 Ideal Gas Thermodynamic Data for Combustion and Air- Pollution Use. In: *Technion Report TAE 697* (1993)
- [17] BUSCHMANN, A.; DINKELACKER, F.; SCHÄFER, T.; SCHÄFER, M.; WOLFRUM, J.: Measurement of the Instantaneous Detailed Flame Structure in Turbulent Premixed Combustion. In: Symposium (International) on Combustion 26 (1996), Nr. 1, S. 437–445
- [18] BUTZBACH, G.; RATZKE, A.; DINKELACKER, F.: Simulation von Flammenlöschen an Brennraumwänden. Leibniz Universität Hannover, Bachelor-Arbeit, 2012
- [19] CLEARY, D. J.; FARRELL, P. V.: Single-Surface Flame Quenching Distance Dependence on Wall Temperature, Quenching Geometry, and Tubulence. In: SAE 950162, 1995

- [20] COLIN, O.; BENKENIDA, A.; ANGELBERGER, C.: 3D Modeling of Mixing, Ignition and Combustion Phenomena in Highly Stratified Gasoline Engines. In: Oil & Gas Science and Technology 58 (2003), Nr. 1, S. 47–62
- [21] DANIEL, W. A.: Flame Quenching at the Walls of an Internal Combustion Engine. In: Symposium (International) on Combustion 6 (1957), Nr. 1, S. 886–894
- [22] DINKELACKER, F.; BUSCHMANN, A.; SCHÄFER, M.; WOLFRUM, J.: Spatially Resolved Joint Measurements of OH and Temperature Fields in a Large Premixed Turbulent Flame. In: *Joint Meeting of the British and German Sections of the Combustion Institute*. Cambridge, UK, 1993
- [23] DINKELACKER, F.; SOIKA, A.; MOST, D.; HOFMANN, D.; LEIPERTZ, A.; POLIFKE, W.; DÖBBELING, K.: Structure of Locally Quenched Highly Turbulent Lean Premixed Flames. In: Symposium (International) on Combustion 27 (1998), S. 857–865
- [24] DURBIN, P. A.: Near-Wall Turbulence Closure Modeling without "Damping Functions". In: *Theoretical and Computational Fluid Dynamics* 3 (1991), Nr. 1, S. 1–13
- [25] EBERIUS, H.; KICK, T.: Stabilization of Premixed, Conical Methane Flames at High Pressure. In: Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie 96 (1992), Nr. 10, S. 1416–1419
- [26] ELIA, M.; ULINSKI, M.; METGHALCHI, M.: Laminar Burning Velocity of Methane-Air-Diluent Mixtures. In: Journal of Engineering for Gas Turbines and Power 123 (2001), Nr. 1, S. 190–196
- [27] VAN ESSEN, V. M.; GERSEN, S.; VAN DIJK, G. H. J.; LEVINSKY, H. B.: Two-Zone Thermodynamic Model for Predicting Knock in Spark Ignition Gas Engines. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting 2013*. Lund, Schweden, 2013
- [28] FACHVERBAND BIOGAS E.V.: Branchenzahlen 2012 und Prognose der Branchenentwicklung 2013. Freising, Mai 2013. – Branchenbericht
- [29] GOODWIN, D.: Cantera. http://code.google.com/p/cantera/. Version: 2012

- [30] GÖTTGENS, J.; MAUSS, F.; PETERS, N.: Analytic Approximations of Burning Velocities and Flame Thicknesses of Lean Hydrogen, Methane, Ethylene, Ethane, Acetylene, and Propane Flames. In: Symposium (International) on Combustion 24 (1992), Nr. 1, S. 129–135
- [31] GREEN, R. M.; CLOUTMAN, L. D.: Planar LIF Observation of Unburned Fuel Escaping the Upper Ring-Land Crevice in an SI Engine. In: SAE 970823, 1997
- [32] GRILL, M.: Objektorientierte Prozessrechnung von Verbrennungsmotoren. Universität Stuttgart, Diss., 2006
- [33] GU, X. J.; HAQ, M. Z.; LAWES, M.; WOOLLEY, R.: Laminar Burning Velocity and Markstein Lengths of Methane-Air Mixtures. In: *Combustion* and Flame 121 (2000), Nr. 1–2, S. 41–58
- [34] HANJALIĆ, K.; POPOVAC, M.; HADŽIABDIĆ, M.: A Robust Near-Wall Elliptic-Relaxation Eddy-Viscosity Turbulence Model for CFD. In: International Journal of Heat and Fluid Flow 25 (2004), Nr. 6, S. 1047–1051
- [35] HAWKES, E. R.; CHEN, J. H.: Direct Numerical Simulation of Hydrogen-Enriched Lean Premixed Methane-Air Flames. In: *Combustion and Flame* 138 (2004), Nr. 3, S. 242–258
- [36] HENNECKE, C.; RATZKE, A.; DINKELACKER, F.: Numerische Simulation zum Brennverlauf von Gasmotoren. Leibniz Universität Hannover, Diplomarbeit, 2010
- [37] HENNECKE, C.; RATZKE, A.; DINKELACKER, F.: Phänomenologisches Modell zur Vorausberechnung des Brennverlaufs von Gasmotoren. Leibniz Universität Hannover, Studienarbeit, 2010
- [38] HEYWOOD, J. B.: Internal Combustion Engine Fundamentals. New York, USA: McGraw-Hill, 1988
- [39] HILLENBRAND, A.; RATZKE, A.; DINKELACKER, F.: Eindimensionale Berechnung von Methanflammen. Leibniz Universität Hannover, Projektarbeit, 2013
- [40] HUANG, J.; HILL, P. G.; BUSHE, W. K.; MUNSHI, S. R.: Shock-Tube Study of Methane Ignition under Engine-Relevant Conditions: Experiments and Modeling. In: *Combustion and Flame* 136 (2004), Nr. 1–2, S. 25–42

- [41] HUGHES, K. J.; TURANYI, T.; PILLING, M. J.: Leeds Methane Mechanism. http://garfield.chem.elte.hu/Combustion/methane.htm. Version: 2001
- [42] INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE: Climate Change 1995. The Science of Climate Change: Contribution of Working Group I to the Second Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Cambridge University Press, 1996
- [43] JÄRVI, A.: Methane Slip Reduction in Wärtsilä Lean Burn Gas Engines. In: CIMAC Congress. Bergen, Norwegen, 2010
- [44] KARRER, M.; BELLENOUE, M.; LABUDA, S.; SOTTON, J.; MAKAROV, M.: Electrical Probe Diagnostics for the Laminar Flame Quenching Distance. In: *Experimental Thermal and Fluid Science* 34 (2010), Nr. 2, S. 131–141
- [45] LABUDA, S.; KARRER, M.; SOTTON, J.; BELLENOUE, M.: Experimental Study of Single-Wall Flame Quenching at High Pressures. In: Combustion Science and Technology 183 (2011), Nr. 5, S. 409–426
- [46] LÄMMLE, C.: Numerical and Experimental Study of Flame Propagation and Knock in a Compressed Natural Gas Engine. ETH Zürich, Diss., 2005
- [47] LAVOIE, G. A.: Correlations of Combustion Data for S.I. Engine Calculations – Laminar Flame Speed, Quench Distance and Global Reaction Rates. In: SAE 780229, 1978
- [48] LAVOIE, G. A.; HEYWOOD, J. B.; KECK, J. C.: Experimental and Theoretical Study of Nitric Oxide Formation in Internal Combustion Engines. In: *Combustion Science and Technology* 1 (1970), Nr. 4, S. 313–326
- [49] LIAO, S. Y.; JIANG, D. M.; CHENG, Q.: Determination of Laminar Burning Velocities for Natural Gas. In: *Fuel* 83 (2004), Nr. 9, S. 1247–1250
- [50] LIU, H.; WALLACE, J. S.: Instantaneous In-Cylinder Hydrocarbon Concentration Measurement during the Post-Flame Period in an SI Engine. In: SAE 1999-01-3577 (1999)

- [51] LU, J. H.; EZEKOYE, O.; GREIF, R.; SAWYER, R. F.: Unsteady Heat Transfer during Side Wall Quenching of a Laminar Flame. In: Symposium (International) on Combustion 23 (1990), S. 441–446
- [52] MALLARD, E.; LE CHATELIER, H. L.: Recherches expérimentales et théoriques sur la combustion des mélanges gazeux explosifs. In: Annales des Mines Paris Bd. 4. 1883, S. 274–377
- [53] MARCHIONNI, M.; AGGARWAL, S. K.; PURI, I. K.; LENTINI, D.: The Influence of Real-Gas Thermodynamics on Simulations of Freely Propagating Flames in Methane/Oxygen/Inert Mixtures. In: Combustion Science and Technology 179 (2007), Nr. 9, S. 1777–1795
- [54] MCBRIDE, B. J.; GORDON, S.; RENO, M. A.: Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species. In: NASA Report TM-4513 (1993)
- [55] MERKER, G. P.; SCHWARZ, C.: Grundlagen Verbrennungsmotoren Simulation der Gemischbildung, Verbrennung, Schadstoffbildung und Aufladung.
  4. Aufl. Wiesbaden: Vieweg & Teubner, 2009
- [56] MERZIGER, G.; MÜHLBACH, G.; WILLE, D.; WIRTH, T.: Formeln + Hilfen zur Höheren Mathematik. 4. Aufl. Springe: Binomi Verlag, 2001
- [57] METGHALCHI, M.; KECK, J. C.: Burning Velocities of Mixtures of Air with Methanol, Isooctane, and Indolene at High Pressure and Temperature. In: *Combustion and Flame* 48 (1982), S. 191–210
- [58] MOLLENHAUER, K.; TSCHÖKE, H.: Handbuch Dieselmotoren. 3. Aufl. Berlin: Springer, 2007
- [59] MÜLLER, U. C.; BOLLIG, M.; PETERS, N.: Approximation for Burning Velocities and Markstein Numbers for Lean Hydrocarbon and Methanol Flames. In: *Combustion and Flame* 108 (1997), S. 349–356
- [60] MUPPALA, S. R.; ALURI, N. K.; DINKELACKER, F.; LEIPERTZ, A.: Development of an Algebraic Reaction Rate Closure for the Numerical Calculation of Turbulent Premixed Methane, Ethylene, and Propane/Air Flames for Pressures up to 1.0 MPa. In: Combustion and Flame 140 (2005), Nr. 4, S. 257–266

- [61] PERINI, F.; PALTRINIERI, F.; MATTARELLI, E.: A Quasi-Dimensional Combustion Model for Performance and Emissions of SI Engines Running on Hydrogen–Methane Blends. In: *International Journal of Hydrogen Energy* 35 (2010), Nr. 10, S. 4687–4701
- [62] PETERS, N. (Hrsg.); ROGG, B. (Hrsg.): Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems. Berlin: Springer, 1993 (Lecture Notes in Physics)
- [63] PETERSEN, E. L.; DAVIDSON, D. F.; HANSON, R. K.: Kinetics Modeling of Shock-Induced Ignition in Low-Dilution CH4/O2 Mixtures at High Pressures and Intermediate Temperatures. In: *Combustion and Flame* 117 (1999), Nr. 1–2, S. 272–290
- [64] PISCHINGER, F.: Sonderforschungsbereich 224 Motorische Verbrennung
   / RWTH Aachen. Aachen, 2001. Abschlussbericht
- [65] POINSOT, T.; VEYNANTE, D.: Theoretical and Numerical Combustion. 3. Aufl. Bordeaux: Aquaprint, 2012
- [66] POPOVAC, M.; HANJALIĆ, K.: Compound Wall Treatment for RANS Computation of Complex Turbulent Flows and Heat Transfer. In: *Flow*, *Turbulence and Combustion* 78 (2007), Nr. 2, S. 177–202
- [67] POPP, P.; BAUM, M.: Analysis of Wall Heat Fluxes Reaction Mechanisms and Unburnt Hydrocarbons during the Head-on Quenching of a Laminar Methane Flame. In: *Combustion and Flame* 108 (1997), Nr. 3, S. 327–348
- [68] RANZI, E.; FRASSOLDATI, A.; GRANA, R.; CUOCI, A.; FARAVELLI, T.; KELLEY, A. P.; LAW, C. K.: Hierarchical and Comparative Kinetic Modeling of Laminar Flame Speeds of Hydrocarbon and Oxygenated Fuels. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 38 (2012), Nr. 4, S. 468–501
- [69] RATZKE, A.; BUTZBACH, G.; DINKELACKER, F.: Simulating the Near-Wall Flame Extinction for Gas Engine Application. In: *Proceedings of the European Combustion Meeting 2013*. Lund, Schweden, 2013
- [70] ROTEXO GMBH & CO. KG: Cosilab. www.rotexo.com. Version: 2011
- [71] ROZENCHAN, G.; ZHU, D. L.; LAW, C. K.; TSE, S. D.: Outward Propagation, Burning Velocities, and Chemical Effects of Methane Flames up

to 60 atm. In: Proceedings of the Combustion Institute 29 (2002), Nr. 2, S. 1461–1470

- [72] SANDIA NATIONAL LABORATORIES: Chemkin. http://www.sandia. gov/chemkin/. Version: 2012
- [73] SCHRAMM, J.; SORENSEN, S. C.: A Model for Hydrocarbon Emissions from SI Engines. In: SAE 902169, 1990
- [74] SLAVINSKAYA, N.; BRAUN-UNKHOFF, M.; FRANK, P.: Reduced Reaction Mechanisms for Methane and Syngas Combustion in Gas Turbines. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 130 (2008), Nr. 2
- [75] SMITH, G. P.; GOLDEN, D. M.; FRENKLACH, M.: GRI-Mech 3.0. http: //www.me.berkeley.edu/gri\_mech/. Version: 2000
- [76] SMOOKE, M. D. (Hrsg.): Lecture Notes in Physics. Bd. 384: Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames. Berlin: Springer, 1991
- [77] SOTTON, J.; BOUST, B.; LABUDA, S. A.; BELLENOUE, M.: Head-On Quenching of Transient Laminar Flame: Heat Flux and Quenching Distance Measurements. In: *Combustion Science and Technology* 177 (2005), Nr. 7, S. 1305–1322
- [78] SPICHER, U.; VELJI, A.; KLÜTING, M.; HUYNH, H. N.; KNOCHE, K. F.; PISCHINGER, F.: Vorzeitiges Erlöschen der Flamme und Kohlenwasserstoff-Emissionen bei ottomotorischer Verbrennung. In: *MTZ Motortechnische Zeitschrift* 46 (1985), Nr. 12
- [79] STERLEPPER, J.: HC-Emissionen und Flammenausbreitung im Feuerstegbereich beim Ottomotor. RWTH Aachen, Diss., 1992
- [80] TABACZYNSKI, R. J.; TRINKER, F. H.; SHANNON, B. A.: Further Refinement and Validation of a Turbulent Flame Propagation Model for Spark-Ignition Engines. In: *Combustion and Flame* 39 (1980), Nr. 2, S. 111–121
- [81] THE MATHWORKS, INC.: Matlab/Simulink. www.mathworks.com. Version: 2009

- [82] TRINKER, F. H.; CHENG, J.; DAVIS, G. C.: A Feedgas HC Emission Model for SI Engines Including Partial Burn Effects. In: SAE 932705, 1993
- [83] VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE: *VDI-Wärmeatlas*. 10. Aufl. Berlin: Springer, 2005
- [84] VERHELST, S.; SHEPPARD, C. G. W.: Multi-Zone Thermodynamic Modelling of Spark-Ignition Engine Combustion – An Overview. In: *Energy Conversion and Management* 50 (2009), Nr. 5, S. 1326–1335
- [85] VOSEN, S. R.; GREIF, R.; WESTBROOK, C. K.: Unsteady Heat Transfer during Laminar Flame Quenching. In: Symposium (International) on Combustion 20 (1984), S. 75–83
- [86] WARNATZ, J.; MAAS, U.; DIBBLE, R. W.: Verbrennung Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung. 3. Aufl. Berlin: Springer, 2001
- [87] WENTWORTH, J. T.: Piston and Ring Variables Affect Exhaust Hydrocarbon Emissions. In: SAE 680109, 1968
- [88] WESTBROOK, C. K.; ADAMCZYK, A. A.; LAVOIE, G. A.: A Numerical Study of Laminar Flame Wall Quenching. In: *Combustion and Flame* 40 (1981), S. 81–99
- [89] WITT, M.; GRIEBEL, P.: Numerische Untersuchung von laminaren Methan/Luft-Vormischflammen / Paul Scherrer Institut. Villingen, Schweiz, Dez. 2000 (TM-50-00-07). – Interner Bericht
- [90] YOSHIDA, M.: Einfluss der Spaltgeometrie am Feuersteg des Kolbens auf die Kohlenwasserstoffemissionen bei einem Ottomotor – Teil 1. In: MTZ Motortechnische Zeitschrift 41 (1980), Nr. 3
- [91] YOSHIDA, M.: Einfluss der Spaltgeometrie am Feuersteg des Kolbens auf die Kohlenwasserstoffemissionen bei einem Ottomotor – Teil 2. In: MTZ Motortechnische Zeitschrift 41 (1980), Nr. 4
- [92] YOSHIMURA, K.; TOKUNAGA, Y.; HASHIMOTO, D.; SAKURAI, H.: Knock and Misfire Detection using Ion Current Measurement for Ultra Lean Burn Medium Speed Gas Engine. In: SAE 2007-01-2078, 2007

- [93] ZEL'DOVICH, Y. B.: The Oxidation of Nitrogen in Combustion and Explosions. In: Acta Physkochimica URSS 21 (1946), S. 511
- [94] ZEL'DOVICH, Y. B.; FRANK-KAMENETSKII, D. A.: The Theory of Thermal Propagation of Flames. In: *Zhurnal Fizicheskoi Khimii* 12 (1938), S. 100– 105

## Anhang

Der Arbeit angehängt sind Tabellen der numerisch ermittelten

- laminaren Brenngeschwindigkeiten
- laminaren Flammenfrontdicken und
- adiabatischen Flammentemperatur

### für Methan-Luft-Gemische.

Auf den letzten Seiten der Dissertation befinden sich ein Lebenslauf, ein Liste der eigenen Publikationen und Tagungsbeiträge sowie eine Liste der betreuten studentischen Arbeiten.

# A. Tabellen der laminaren Brenngeschwindigkeit

Im Folgenden werden laminare Brenngeschwindigkeiten von Methan-Luft-Gemischen, welche mithilfe reaktionskinetischer Simulationen unter Verwendung des Reaktionsmechanismus GRI-Mech 3.0 ermittelt wurden, in Tabellen dargestellt. Die Tab. A.1 – A.6 zeigen die laminaren Brenngeschwindigkeiten ohne zusätzliche Inertgasbeimengung für verschiedene Äquivalenzverhältnisse. In den Tab. A.7 – A.9 sind laminare Brenngeschwindigkeiten von Methan-Luft-Gemischen mit bis zu 30 Massenprozent Inertgasanteil zu finden. Das Inertgas besteht stets aus 75 Massenprozent Stickstoff und 25 Massenprozent Kohlenstoffdioxid. Fehlende Werte sind in der Simulation nicht konvergiert.

	Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )									
	für Methan-Luft-Gemische									
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	0.342	0.891	1.698	2.936	4.722	7.181				
0.2	0.285	0.698	1.395	2.496	4.149	6.479	9.184			
0.5	0.183	0.475	1.000	1.879	3.265	5.329	8.205			
1.0	0.127	0.342	0.746	1.451	2.605	4.399	7.039			
2.0	0.094	0.254	0.564	1.119	2.057	3.566	5.857			
3.0	0.084	0.223	0.490	0.974	1.801	3.165	5.245			
5.0	0.077	0.199	0.428	0.842	1.554	2.845	4.629			
7.5	0.075	0.188	0.397	0.771	1.412	—	—			
10.0	0.074	0.183	0.382	0.734	1.334	—	_			
15.0	0.073	0.179	0.367	0.695	1.250	—	—			
20.0	0.073	0.177	0.359	0.674	1.205	_	_			

**Tabelle A.1.:** Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=1.1$  und 0 % AGR

Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )									
für Methan-Luft-Gemische									
p /				$T_{\rm U}$ / K					
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500		
0.1	0.381	0.887	1.721	2.988	4.822	7.338	10.659		
0.2	0.281	0.693	1.398	2.523	4.209	6.594	9.819		
0.5	0.184	0.474	0.998	1.879	3.281	5.377	8.379		
1.0	0.130	0.344	0.744	1.443	2.595	4.399	7.199		
2.0	0.096	0.255	0.560	1.105	2.029	3.526	—		
3.0	0.084	0.222	0.484	0.956	1.765	3.106	_		
5.0	0.075	0.194	0.417	0.818	1.510	2.696	—		
7.5	0.071	0.179	0.381	0.741	1.360	_	_		
10.0	0.068	0.172	0.362	0.700	1.277	_	_		
15.0	0.066	0.165	0.342	0.654	1.184	_	_		
20.0	0.065	0.160	0.332	0.629	1.133	—	_		

**Tabelle A.2.:** Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=1.0$  und 0 % AGR

	Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	0.342	0.821	1.636	2.904	4.774	7.138				
0.2	0.248	0.632	1.315	2.432	4.134	6.526	_			
0.5	0.162	0.428	0.925	1.781	3.172	—	—			
1.0	0.114	0.309	0.683	1.351	2.475	—	—			
2.0	0.084	0.228	0.509	1.022	1.908	—	—			
3.0	0.073	0.197	0.437	0.879	1.648	—	_			
5.0	0.064	0.170	0.374	0.746	1.398	—	_			
7.5	0.059	0.156	0.339	0.671	1.250	_	_			
10.0	0.057	0.148	0.320	0.629	1.168	—	_			
15.0	0.054	0.140	0.299	0.584	1.078	_	_			
20.0	0.052	0.135	0.287	0.558	1.031	—				

**Tabelle A.3.:** Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=0.9$ und 0 % AGR

	Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	0.206	0.572	1.254	2.451	4.303	_	10.386			
0.2	0.136	0.405	0.952	1.952	3.596	6.038	9.419			
0.5	0.082	0.257	0.630	1.350	2.618	4.662	7.730			
1.0	0.055	0.176	0.446	0.980	1.958	3.624	6.628			
2.0	0.040	0.125	0.319	0.713	1.451	2.788	_			
3.0	0.034	0.107	0.270	0.603	1.230	2.506	_			
5.0	0.030	0.091	0.227	0.502	1.023	_	_			
7.5	_	0.082	0.203	0.446	0.905	_	_			
10.0	_	0.077	0.190	0.415	0.845	_	_			
15.0	_	0.072	0.175	0.380	_	_	_			
20.0	_	0.068	0.167	0.360	_	_	_			

Tabelle A.4.: Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=0.7$ und 0 % AGR

	Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )										
für Methan-Luft-Gemische											
p /				$T_{\rm U}$ / K							
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500				
0.1	0.054	0.217	0.646	1.578	3.261	5.836	9.511				
0.2	0.030	0.139	0.451	1.166	2.565	4.892	9.613				
0.5	_	0.076	0.261	0.723	1.698	3.541	_				
1.0	—	0.051	0.171	0.484	1.184	_	—				
2.0	_	0.037	0.120	0.357	0.830	_	_				
3.0	—	0.032	0.102	0.282	0.694	_	—				
5.0	—	—	0.086	0.235	0.608	_	—				
7.5	—	—	0.077	0.208	—	_	—				
10.0	_	_	0.072	0.194	—	_	_				
15.0	_	_	0.067	0.177	_	_	_				
20.0	—	—	—	_	_	—	_				

Tabelle A.5.: Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=0.5$ und 0 % AGR

Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )										
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	_	0.086	0.351	1.065	2.560	5.045	8.727			
0.2	_	0.050	0.224	0.733	1.905	4.082	7.947			
0.5	_	0.028	0.121	0.417	1.169	2.854	_			
1.0	_	—	0.081	0.271	0.779	_	_			
2.0	—	—	0.059	0.191	0.652	—	—			
3.0	_	—	_	—	—	_	_			
5.0	_	—	_	0.136	—	_	_			
7.5	_	—	_	—	—	_	_			
10.0	_	—	_	—	—	_	_			
15.0	—	—	—	—	—	—	—			
20.0	_	_	_	—	—	_	—			

**Tabelle A.6.:** Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=0.4$  und 0 % AGR

	Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	_	_	1.336	2.439	4.089	6.409	9.532			
0.2	0.187	0.495	1.059	2.011	3.497	5.666	8.736			
0.5	0.116	0.322	0.724	1.441	2.636	4.496	7.326			
1.0	0.079	0.226	0.524	1.074	2.031	3.595	—			
2.0	0.058	0.166	0.386	0.806	1.554	2.843	_			
3.0	0.052	—	0.334	0.695	1.344	2.459	—			
5.0	0.047	0.129	0.291	0.597	1.148	_	_			
7.5	0.045	0.121	0.269	0.545	1.038	_	_			
10.0	0.044	—	0.258	0.517	0.978	—	_			
15.0	0.043	0.111	0.246	0.488	0.914	_	_			
20.0	0.043	—	0.240	0.472	0.881	_	_			

Tabelle A.7.: Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=1.0$ und 10 % AGR

	Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	0.176	0.479	1.031	1.928	3.379	5.481	8.400			
0.2	0.113	0.329	0.759	1.536	2.817	4.755	7.581			
0.5	0.063	0.200	0.491	1.051	2.040	3.652	6.400			
1.0	0.042	0.135	0.343	0.759	1.525	2.844	—			
2.0	0.033	0.099	0.249	0.556	1.138	2.224	—			
3.0	0.030	0.088	0.216	0.480	0.979	1.976	—			
5.0	0.028	0.081	0.192	0.417	0.841	1.753	_			
7.5	0.027	0.077	0.181	0.385	0.767	_	_			
10.0	0.027	0.076	0.175	0.368	0.728	_	_			
15.0	0.027	0.074	0.169	0.352	0.687	—	—			
20.0	0.026	0.073	0.166	0.342	0.666	—	_			

**Tabelle A.8.:** Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=1.0$ und 20 % AGR

	Laminare Brenngeschwindigkeit (in $\frac{m}{s}$ )									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	0.098	0.315	0.740	1.502	2.748	4.609	7.240			
0.2	0.059	0.200	0.509	1.111	2.181	3.878	6.390			
0.5	0.028	0.108	0.303	0.716	1.503	2.862	5.105			
1.0	0.020	0.071	0.202	0.497	1.084	2.160	4.358			
2.0	0.017	0.055	0.147	0.358	0.792	1.650	—			
3.0	0.017	0.051	0.131	0.311	0.680	—	—			
5.0	0.016	0.048	0.120	0.275	0.588	—	—			
7.5	0.016	0.047	0.116	0.260	0.547	_	—			
10.0	0.015	0.046	0.113	0.252	0.524	_	—			
15.0	—	0.045	0.111	0.243	0.500	—	—			
20.0	_	0.045	0.109	0.238	0.495	—	_			

Tabelle A.9.: Numerisch ermittelte Werte für die laminare Brenngeschwindigkeit bei $\phi=1.0$ und 30 % AGR

## B. Tabellen der thermischen laminaren Flammenfrontdicke

In diesem Kapitel werden die thermischen laminaren Flammenfrontdicken von Methan-Luft-Gemischen, welche aus Temperaturprofilen reaktionskinetischer Simulationen abgeleitet wurden, in Tabellen dargestellt. Relevant für die Flammenfrontdicken sind der 5%- und der 95%-Punkt des Temperaturprofils, siehe Abb. 2.8 auf S. 22. Die Tab. B.1–B.6 zeigen die Flammenfontdicken ohne zusätzliche Inertgasbeimengung für verschiedene Äquivalenzverhältnisse. In den Tab. B.7–B.9 sind Flammenfrontdicken von Methan-Luft-Gemischen mit bis zu 30 Massenprozent Inertgasanteil (75 Massenprozent N<sub>2</sub> und 25 Massenprozent CO<sub>2</sub>) zu finden. Fehlende Werte sind in der Simulation nicht konvergiert.

	Thermische laminare Flammenfrontdicke (in µm)										
für Methan-Luft-Gemische											
p /				$T_{\rm U}$ / K							
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500				
0.1	_	_	_	_	_	_	_				
0.2	505.0	499.0	507.7	511.4	496.3	463.9	700.6				
0.5	279.7	273.8	283.5	288.7	295.1	286.9	293.5				
1.0	159.3	139.0	129.9	123.4	116.7	112.3	109.1				
2.0	96.3	76.4	64.6	56.8	51.2	46.8	43.7				
3.0	70.5	54.7	44.8	38.1	33.2	29.6	27.0				
5.0	45.8	35.6	28.5	23.6	20.0	18.1	15.6				
7.5	31.6	24.8	19.8	16.3	13.6	_	_				
10.0	24.0	19.0	15.2	12.5	10.4	_	_				
15.0	16.1	12.9	10.4	8.5	7.1	_	_				
20.0	12.1	9.8	7.9	6.5	5.4	—	_				

Tabelle B.1.: Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=1.1$ und 0 % AGR

	Thermische laminare Flammenfrontdicke (in $\mu m$ )									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	_	_	_	_	_	_				
0.2	564.0	549.9	510.2	496.7	485.4	497.5	460.3			
0.5	330.6	312.3	298.4	292.2	291.7	294.2	293.5			
1.0	184.9	158.3	139.2	125.8	118.0	113.3	112.8			
2.0	106.0	85.0	70.1	59.3	52.1	47.3	_			
3.0	76.8	60.8	48.8	40.0	34.0	30.0	_			
5.0	50.4	39.8	31.4	25.1	20.8	17.9	_			
7.5	35.6	28.0	22.1	17.6	14.3	_	_			
10.0	27.5	21.7	17.2	13.6	11.0	_	_			
15.0	18.9	15.1	11.9	9.5	7.7	_	_			
20.0	14.4	11.6	9.2	7.3	5.9	_	_			

Tabelle B.2.: Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=1.0$ und 0 % AGR

Thermische laminare Flammenfrontdicke (in µm)											
	für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K							
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500				
0.1	_	_	_	_	_	_					
0.2	574.5	565.3	543.4	552.9	526.3	722.3	—				
0.5	309.4	289.0	281.3	283.1	288.1	—	—				
1.0	174.7	146.6	130.1	120.2	114.5	—	—				
2.0	104.9	82.9	67.9	57.8	51.0	—	—				
3.0	78.0	60.4	48.1	39.6	33.9	—	—				
5.0	52.5	40.5	31.5	25.2	20.9	—	—				
7.5	37.8	29.0	22.5	17.8	14.5	—	—				
10.0	29.7	22.7	17.6	13.9	11.3	—	—				
15.0	20.8	16.0	12.4	9.8	7.9	—	—				
20.0	16.1	12.4	9.6	7.6	6.1	—	—				

Tabelle B.3.: Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=0.9$ und 0 % AGR

	Thermische laminare Flammenfrontdicke (in $\mu m$ )											
	für Methan-Luft-Gemische											
p /		$T_{ m U}$ / K										
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500					
0.1	_	_	_	_	_	_	_					
0.2	_	_	_	_	_	_	_					
0.5	395.9	293.5	252.3	248.8	267.3	294.0	323.3					
1.0	274.7	181.2	135.6	116.3	110.3	112.3	124.5					
2.0	186.4	117.2	81.8	63.0	53.2	49.2	—					
3.0	143.6	89.9	61.8	45.7	36.7	34.4	—					
5.0	120.0	63.3	43.0	30.9	23.9	—	—					
7.5	—	47.1	31.8	22.6	17.1	—	—					
10.0	—	37.6	25.4	18.0	13.6	_	_					
15.0	_	27.1	18.3	13.0	_	—	_					
20.0	_	21.3	14.4	10.2	_	_	_					

**Tabelle B.4.:** Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=0.7$  und 0 % AGR

	Thermische laminare Flammenfrontdicke (in $\mu m$ )										
für Methan-Luft-Gemische											
p /				$T_{\rm U}$ / K							
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500				
0.1	2088.9	1371.8	1164.6	1152.8	1350.3	_	2210.3				
0.2	1946.6	1040.7	696.0	645.4	781.9	1144.3	1587.4				
0.5	_	700.7	376.8	269.6	255.0	292.8	_				
1.0	_	518.4	260.8	158.7	123.5	_	_				
2.0	_	361.5	179.3	116.7	70.3	_	_				
3.0	_	280.6	140.5	79.5	52.5	_	_				
5.0	_	_	100.4	56.8	39.4	_	_				
7.5	_	_	75.0	42.9	_	_	_				
10.0	_	_	60.2	34.7	_	_	_				
15.0	_	_	43.8	25.4	_	_	_				
20.0	_	—	_	_	—	_	_				

Tabelle B.5.: Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=0.5$ und 0 % AGR

	Thermische laminare Flammenfrontdicke (in $\mu m$ )										
	für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K							
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500				
0.1	_	2691.4	1453.3	1261.5	1254.5	1287.0	1363.0				
0.2	—	2376.7	1052.1	704.3	688.1	794.6	921.1				
0.5	—	1767.0	701.4	363.6	273.6	298.0	—				
1.0	_	_	519.0	244.6	153.3	_	_				
2.0	_	—	363.4	167.4	147.4	_	—				
3.0	_	_	_	_	_	_	_				
5.0	_	_	_	95.9	_	_	_				
7.5	_	_	_	_	_	_	_				
10.0	_	_	_	_	_	_	_				
15.0	_	_	_	_	_	_	_				
20.0	_	_	—	—	—	_	—				

Tabelle B.6.: Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=0.4$ und 0% AGR

	Thermische laminare Flammenfrontdicke (in $\mu m$ )											
	für Methan-Luft-Gemische											
p /				$T_{\rm U}$ / K								
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500					
0.1	_	_	_	_	_	_						
0.2	641.8	575.1	654.7	648.8	925.1	1302.0	1441.5					
0.5	404.1	358.5	362.5	356.4	355.3	359.9	367.3					
1.0	253.7	201.1	171.0	152.2	140.4	133.4	—					
2.0	153.6	114.3	89.6	73.3	62.6	56.5	_					
3.0	111.4	_	63.4	50.1	41.5	35.9	_					
5.0	72.5	54.2	41.2	31.9	25.6	_	_					
7.5	50.5	38.3	29.0	22.4	17.7	_	_					
10.0	38.9	_	22.5	17.4	13.7	_	_					
15.0	26.6	15.6	15.6	12.1	9.5	_	_					
20.0	20.2	_	12.0	9.3	7.4	_	_					

Tabelle B.7.: Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=1.0$ und 10 % AGR

	Thermische laminare Flammenfrontdicke (in $\mu m$ )										
	für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K							
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500				
0.1	_	_	_	_	_	_	_				
0.2	—	_	_	_	_	_	_				
0.5	551.1	452.5	422.1	434.6	433.9	437.5	461.1				
1.0	389.4	276.4	218.4	188.4	171.1	162.4	_				
2.0	244.3	165.7	120.7	93.7	77.6	69.3	_				
3.0	176.0	120.4	86.0	65.4	52.0	45.4	_				
5.0	111.4	78.3	56.4	42.1	32.5	28.5	_				
7.5	76.6	54.8	39.8	29.5	22.7	_	_				
10.0	58.4	42.2	30.7	22.9	17.5	_	_				
15.0	39.7	28.9	21.2	15.8	12.2	_	_				
20.0	30.1	21.9	16.1	12.1	9.4	_	_				

**Tabelle B.8.:** Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=1.0$  und 20 % AGR

	Thermische laminare Flammenfrontdicke (in $\mu m$ )										
für Methan-Luft-Gemische											
p /				$T_{\rm U}$ / K							
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500				
0.1	_	_	_	_	_	_	_				
0.2	1036.3	787.7	605.5	544.2	_	_	_				
0.5	—	598.1	447.4	392.7	388.3	404.7	473.6				
1.0	—	427.9	288.4	232.7	210.0	201.0	212.4				
2.0	417.4	268.0	174.6	126.0	99.9	86.7	_				
3.0	295.3	190.6	126.2	89.2	67.6	_	_				
5.0	186.1	121.0	81.8	57.6	42.7	_	_				
7.5	126.6	83.4	57.1	40.5	29.9	_	_				
10.0	95.7	63.6	44.0	31.2	23.1	_	_				
15.0	_	43.7	30.1	21.5	16.0	_	_				
20.0		33.1	22.9	16.5	12.4	_	_				

Tabelle B.9.: Numerisch ermittelte Werte für die thermische laminare Flammenfrontdicke bei $\phi=1.0$ und 30 % AGR

# C. Tabellen der adiabatischen Flammentemperatur

Schließlich werden die adiabatischen Flammentemperaturen von Methan-Luft-Gemischen, welche aus Temperaturprofilen reaktionskinetischer Simulationen abgeleitet wurden, in Tabellen aufgeführt. Die Tab. C.1-C.6 zeigen die adiabatischen Flammentemperaturen ohne zusätzliche Inertgasbeimengung für verschiedene Äquivalenzverhältnisse. In den Tab. C.7-C.9 sind adiabatische Flammentemperaturen von Methan-Luft-Gemischen mit bis zu 30 Massenprozent Inertgasanteil zu finden. Das Inertgas besteht stets aus 75 Massenprozent Stickstoff und 25 Massenprozent Kohlenstoffdioxid. Fehlende Werte sind in der Simulation nicht konvergiert.

	Adiabatische Flammentemperatur (in K)									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	1928	2099	2193	2283	2378	2476	_			
0.2	2139	2242	2344	2441	2531	2618	2756			
0.5	2219	2346	2469	2584	2691	2785	2878			
1.0	2228	2362	2492	2615	2727	2830	2926			
2.0	2230	2366	2503	2634	2756	2867	2971			
3.0	2230	2368	2508	2644	2771	2888	2996			
5.0	2231	2370	2513	2655	2788	2912	3027			
7.5	2231	2371	2516	2662	2801	_	—			
10.0	2231	2372	2518	2666	2809	_	—			
15.0	2232	2373	2521	2671	2818	_	—			
20.0	2232	2374	2522	2674	2824	_	_			

Tabelle C.1.: Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei $\phi=1.1$ und 0 % AGR

Adiabatische Flammentemperatur (in K)									
für Methan-Luft-Gemische									
p /				$T_{\rm U}$ / K					
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500		
0.1	1983	2071	2147	2235	2329	2434	2541		
0.2	2138	2236	2320	2408	2495	2590	2675		
0.5	2249	2362	2468	2572	2672	2767	2855		
1.0	2274	2387	2498	2606	2711	2811	2906		
2.0	2283	2401	2517	2631	2743	2849	_		
3.0	2288	2408	2527	2645	2760	2870	_		
5.0	2294	2416	2539	2661	2780	2896	_		
7.5	2297	2422	2547	2673	2796	_	_		
10.0	2300	2426	2553	2681	2806	_	_		
15.0	2303	2431	2561	2691	2820	_	_		
20.0	2305	2435	2566	2698	2829	_	—		

**Tabelle C.2.:** Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei  $\phi = 1.0$  und 0 % AGR

	Adiabatische Flammentemperatur (in K)									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	1928	2024	2104	2194	2283	2417				
0.2	2073	2184	2280	2378	2460	2597	—			
0.5	2153	2280	2401	2517	2625	—	—			
1.0	2160	2291	2418	2540	2656	—	—			
2.0	2165	2298	2430	2559	2682	_	_			
3.0	2166	2302	2436	2569	2696	_	_			
5.0	2168	2305	2443	2580	2712	_	_			
7.5	2169	2308	2448	2588	2724	_	_			
10.0	2170	2309	2451	2593	2731	_	_			
15.0	2171	2311	2455	2599	2741	—	_			
20.0	2172	2312	2457	2603	2748	_				

Tabelle C.3.: Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei $\phi=0.9$ und 0 % AGR

	Adiabatische Flammentemperatur (in K)									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	1728	1837	1965	2051	2139	_	2342			
0.2	1820	1972	2108	2252	2386	2497	2597			
0.5	1845	1993	2145	2295	2438	2570	2688			
1.0	1846	1996	2149	2302	2452	2592	2720			
2.0	1847	1997	2151	2308	2462	2609	—			
3.0	1847	1998	2152	2310	2468	2618	—			
5.0	1836	1999	2154	2313	2473	_	—			
7.5	_	1999	2155	2315	2477	_	—			
10.0	—	1999	2155	2317	2480	—	—			
15.0	_	1999	2156	2318	_	_	_			
20.0	—	2000	2156	2319	_	_	_			

Tabelle C.4.: Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei $\phi=0.7$  und 0 % AGR

	Adiabatische Flammentemperatur (in K)									
für Methan-Luft-Gemische										
p /				$T_{\rm U}$ / K						
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500			
0.1	1430	1601	1771	1918	2060	2173	2332			
0.2	1471	1635	1797	1963	2130	2297	2432			
0.5	—	1641	1805	1975	2147	2314	—			
1.0	—	1641	1806	1977	2150	_	—			
2.0	—	1641	1806	1973	2152	—	—			
3.0	—	1641	1807	1978	2153	—	—			
5.0	—	_	1807	1978	2154	_	_			
7.5	—	_	1807	1979	—	—	_			
10.0	—	_	1807	1979	—	—	_			
15.0	—	_	1807	1979	—	—	_			
20.0	—	_	_	—	_	—	_			

Tabelle C.5.: Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei $\phi=0.5$ und 0 % AGR

Adiabatische Flammentemperatur (in K)												
für Methan-Luft-Gemische												
p /	$T_{ m U}$ / K											
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500					
0.1	_	1415	1589	1765	1911	2037	2158					
0.2	—	1439	1611	1783	1954	2113	2249					
0.5	—	1445	1614	1790	1969	2147	_					
1.0	—	—	1615	1790	1970	_	_					
2.0	_	_	1615	1791	1971	_	_					
3.0	_	_	_	_	_	_	_					
5.0	_	_	_	1791	_	_	_					
7.5	_	_	_	_	_	_	_					
10.0	_	_	_	_	_	_	_					
15.0	_	_	_	_	_	_	_					
20.0	—	—	—	_	_	_	_					

Tabelle C.6.: Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei $\phi=0.4$ und 0 % AGR

Adiabatische Flammentemperatur (in K)													
für Methan-Luft-Gemische													
p /	$T_{ m U}$ / K												
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500						
0.1	_	_	2133	2218	2347	2437	2578						
0.2	2008	2109	2241	2340	2486	2622	2719						
0.5	2107	2230	2360	2475	2585	2687	2782						
1.0	2131	2258	2381	2499	2614	2722	—						
2.0	2139	2267	2394	2519	2639	2754	_						
3.0	2143	—	2401	2529	2653	2772	—						
5.0	2146	2277	2409	2541	2670	_	_						
7.5	2148	2281	2415	2550	2682	_	_						
10.0	2149	—	2419	2555	2690	—	—						
15.0	2150	2288	2424	2563	2701	_	_						
20.0	2152	_	2427	2568	2708	—	_						

Tabelle C.7.: Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei $\phi=1.0$ und 10 % AGR
Adiabatische Flammentemperatur (in K)							
für Methan-Luft-Gemische							
p /		$T_{ m U}$ / K					
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500
0.1	1737	1832	1925	2081	2174	2379	2476
0.2	1858	1972	2082	2247	2387	2490	2624
0.5	1947	2091	2229	2363	2484	2595	2698
1.0	1972	2113	2249	2380	2506	2624	—
2.0	1981	2120	2258	2394	2525	2650	—
3.0	1983	2123	2263	2401	2536	2664	_
5.0	1986	2126	2267	2409	2548	2681	—
7.5	1987	2128	2271	2415	2557	_	—
10.0	1988	2129	2273	2419	2563	_	—
15.0	1988	2130	2276	2424	2571	_	_
20.0	1989	2132	2278	2428	2576	_	—

Tabelle C.8.: Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei $\phi=1.0$ und 20 % AGR

Adiabatische Flammentemperatur (in K)							
für Methan-Luft-Gemische							
p /		$T_{ m U}$ / K					
MPa	300	500	700	900	1100	1300	1500
0.1	1590	1705	1807	1903	2000	2122	2260
0.2	1700	1825	1939	2059	2150	2266	2367
0.5	1776	1921	2063	2201	2334	2460	2587
1.0	1801	1947	2095	2242	2383	2514	2634
2.0	1810	1957	2107	2255	2398	2534	—
3.0	1812	1960	2110	2259	2406	_	—
5.0	1814	1962	2112	2264	2414	_	—
7.5	1814	1963	2114	2268	2420	_	—
10.0	1815	1963	2115	2270	2424	_	—
15.0	—	1964	2117	2273	2430	_	—
20.0	_	1964	2118	2275	2433	_	_

Tabelle C.9.: Numerisch ermittelte Werte für die adiabatische Flammentemperatur bei $\phi=1.0$ und 30 % AGR

## D. Lebenslauf

Name:	Ansgar Ratzke
Geburtsdatum, -ort:	20. Juli 1984 in Köln
Staatsangehörigkeit:	deutsch
Schulzeit:	1990 - 2003 (Abitur)
Studium:	2003 – 2009 (Diplom) Maschinenbau an der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover
Wissenschaftl. Mitarbeiter:	2009 – 2013 (Promotion) Institut für Technische Verbrennung, Fakultät für Maschinenbau der Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover

## E. Eigene Publikationen und Tagungsbeiträge

DINKELACKER, F.; RATZKE, A.; KUPPA, K.; BETAGERI, V.; BUTZBACH, G.: Wege zu einem UHC-Berechnungsmodell für Gasmotoren. In: *Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors – 14. Tagung*, S. 226–240. Graz, Österreich, September 2013

RATZKE, A.; BUTZBACH, G.; DINKELACKER, F.: Simulating the Near-Wall Flame Extinction for Gas Engine Application. Paper P5-47. In: 6th European Combustion Meeting. Lund, Schweden, Juni 2013 – ISBN 978-91-637-2151-9

RATZKE, A.; HENNECKE, C.; DINKELACKER, F.: Simulating the Combustion and Near-Wall Flame Extinction of a Methane Gas IC Engine by Employing a Zonal Cylinder Model. Paper Nr. 102. In: 27th CIMAC World Congress on Combustion Engine Technology. Shanghai, VR China, Mai 2013

RATZKE, A.; HENNECKE, C.; DINKELACKER, F.: Gegenüberstellung der simulierten innermotorischen Methangas-Verbrennung durch ein zonales Zylindermodell und eine numerische CRFD-Berechnung. In: 2. AVL Advanced Simulation Technologies Konferenz. Heidelberg, Oktober 2012

RATZKE, A.: Calculation of an Internal Combustion Gas Engine with a Multi-Zone Model. Lehrbuchbeitrag in: *Fourth Annual International Course Ventilation Efficiency and Indoor Climate Quality*, S. 113–118. Ohrid, Mazedonien, August 2012 – ISBN 978-608-4624-08-0

Und in: Second International Course Numerical Heat Transfer, S. 197–218. Kopaonik, Serbien, September 2010 – ISBN 978-86-6055-006-6

RATZKE, A.; HENNECKE, C.; DINKELACKER, F.: Comparison of the Simulated Methane Gas Combustion of an IC Engine by Employing a Zonal Cylinder Model and a Numerical CRFD-Calculation (Poster). In: 34th International Symposium on Combustion. Warschau, Polen, Juli 2012

## F. Betreute studentische Arbeiten

HILLENBRAND, A.: *Eindimensionale Berechnung von Methanflammen*. Leibniz Universität Hannover, Projektarbeit, 2013

BUTZBACH, G.: Simulation von Flammenlöschen an Brennraumwänden. Leibniz Universität Hannover, Bachelor-Arbeit, 2012

BETAGERI, V.: Simulation of Flame Propagation and Unburnt Hydrocarbon Emissions in a Single Cylinder Gas Engine. Leibniz Universität Hannover, Master-Arbeit, 2011

HENNECKE, C.: Numerische Simulation zum Brennverlauf von Gasmotoren. Leibniz Universität Hannover, Diplomarbeit, 2010

HENNECKE, C.: Phänomenologisches Modell zur Vorausberechnung des Brennverlaufs von Gasmotoren. Leibniz Universität Hannover, Studienarbeit, 2010