

Mit der Beschreibung der Verdampfung des Brennstoffs, der Gemischbildung, der Zündung und des Verbrennungsablaufs mit Hilfe von physikalisch und chemisch basierten Untermodellen gelangt man weiter zu den phänomenologischen Mehr-Zonen-Modellen, mit denen die Wärmefreisetzung durch die Verbrennung, und in gewissen Grenzen auch die Schadstoffbildung, berechnet werden kann [4].

Eine weitere Unterteilung des Brennraums in sehr viele kleine Zellen führt zu den dreidimensionalen Modellen, den so genannten CRFD (computational reactive fluid dynamics) Codes, die zusätzlich die Bewegungsgleichungen numerisch lösen und damit das turbulente Strömungsfeld im Brennraum berechnen.

Zur Beschreibung der Gemischbildung, der Zündung und des Verbrennungsablaufs werden aber auch bei diesen Modellen halbempirische Untermodelle – wenn auch detailliertere als für die Mehr-Zonen-Modelle – benötigt.

Eine »genaue« Modellierung dieser Detailvorgänge ist auch bei diesen Modellen nur bedingt möglich, weil wichtige Teilprozesse der motorischen Verbrennung heute noch nicht hinreichend gut verstanden sind.

Dreidimensionale Modelle

Für die Berechnung des turbulenten Geschwindigkeitsfeldes im Brennraum stehen eine Reihe von kommerziell verfügbaren CFD (computational fluid dynamics) Codes wie STAR CD, FIRE, KIVA, VECTIS und weitere zur Verfügung.

Zusätzlich dazu müssen aber die Strahlausbreitung und der Strahlzerfall, der Wandwärmeübergang, die Selbstzündung, die Wärmefreisetzung durch die Verbrennung und die Schadstoffbildung modelliert werden, wobei die Modellierung der

zeitlichen Entwicklung des Einspritzstrahls relativ aufwändig ist.

Ab einer gewissen Entfernung von der Mündung der Einspritzbohrung und nach dem Zerfall der Primärtropfen kann der Einspritzstrahl im Prinzip als ein Tropfen-Ensemble betrachtet werden, wobei die Verteilung der Einzeltropfen durch die Größen: Ort, Geschwindigkeit, Temperatur und Tropfenradius beschrieben wird.

Für die Beschreibung der Änderungsraten dieser Größe muss die Tropfendynamik, der Wärmeübergang an den brennraumbegrenzenden Wänden und die Verdampfung der Einzeltropfen modelliert werden.

Für die Strahlmodellierung wird neuerdings das in Abbildung 3 dargestellte Berechnungskonzept vorgeschlagen, bei dem der »optisch dichte« Bereich unmittelbar am Düsenmund mit einem 1D-Strahlmodell beschrieben wird.

Eine Schwäche der 3D-Verbrennungsmodelle ist die unzulängliche Berechnung des Wandwärmeübergangs, die darin besteht, dass bei der Modellierung mittels des logarithmischen Wandgesetzes der instationäre Charakter der wandnahen Schicht und

Deshalb muss grundsätzlich der konvektive Transport und die Diffusion von Radikalspezies berücksichtigt werden. In der Literatur sind dafür Einstufenmodelle mit drei Spezies und Mehrstufenmodelle mit sieben Spezies bekannt geworden. Derart komplexe Modelle sind aber nicht zwingend erforderlich. Sehr oft ist ein einfacher Arrhenius-Ansatz vollkommen ausreichend.

Im Dieselmotor unterscheidet man bei der Verbrennung zwischen zwei Phasen, der so genannten Vormischverbrennung und der Diffusionsverbrennung. Zur Modellierung wird häufig das Mixing-Time-Scale-Modell verwendet [5].

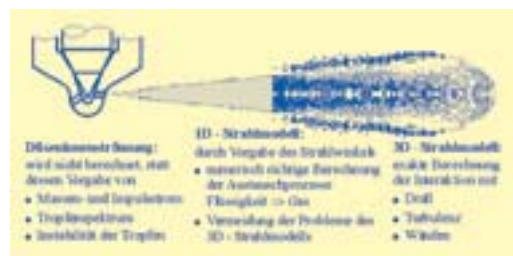
Schadstoffbildung

Zum so genannten OHC-System werden die chemischen Substanzen zusammengefasst, die sich aus den Atomen von Sauerstoff (O), Wasserstoff (H) und Kohlenstoff (C) zusammensetzen. In Verbrennungsmodellen werden üblicherweise die acht Spezies CO, CO₂, H, H₂, H₂O, O, O₂ und OH berücksichtigt.

Da die chemischen Reaktionen zwischen diesen Stoffen bei den in Verbrennungsmotoren vorliegenden Bedingungen sehr schnell gegenüber

den Reaktionen für die Schadstoffbildungsprozesse, insbesondere der Stickoxid- und Rußbildung, ablaufen, kann mit guter Näherung angenommen werden, dass diese Stoffe zu jedem Zeitpunkt im partiellen Gleichgewicht vorliegen.

Das bedeutet, dass jede der fünf nachfolgend aufgeführten chemischen Reaktionen den Gleichgewichtszustand erreicht hat.

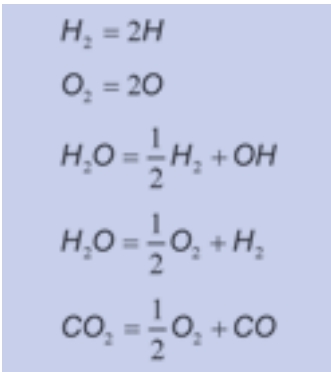


Druckgradienten nicht berücksichtigt werden. Deshalb muss hier auf halbempirische Ansätze zurückgegriffen werden.

Die Selbstzündung im Dieselmotor ist ein Prozess mit einer relativ großen charakteristischen Zeitskala.

Eine wesentliche Voraussetzung dafür war ein besseres Verständnis der bei der Einspritzung, Gemischbildung und Verbrennung ablaufenden physikalischen und chemischen Prozesse. Am Institut für Technische Verbrennung wird mit Prozesssimulationen ein wesentlicher Beitrag zum Verständnis der Vorgänge geleistet.

Abbildung 3 Berechnungskonzept für die Modellierung des Einspritzstrahls



Mit den Definitionsgleichungen für die fünf Gleichgewichtskonstanten und den Atombilanzen für Sauerstoff, Wasserstoff und Kohlenstoff erhält man ein nicht-lineares Gleichungssystem für die acht unbekannt Partialdrücke der beteiligten Substanzen.

Bei der motorischen Verbrennung findet die Stickoxidbildung (NO) im Bereich der heißen Verbrennungsprodukte statt. Diese so genannte thermische NO-Bildung wird durch den erweiterten Zeldovich-Mechanismus ausreichend genau beschrieben.

Im Gegensatz zu den oben beschriebenen Reaktionen des OHC-Systems läuft die thermische NO-Bildung langsam ab, da sie weniger durch die Mischungsvorgänge im Brennraum als vielmehr durch die Reaktionskinetik kontrolliert wird.

rer Zeit ein erheblicher Forschungsaufwand betrieben wird, sind die Detailvorgänge bei der Rußbildung und Rußoxidation immer noch nicht zufriedenstellend verstanden.

Es besteht allerdings ein allgemeines Einverständnis darüber, dass die lokale Konzentration des Brennstoffdampfes entscheidend für die Rußbildung und die lokale Sauerstoffkonzentration maßgebend für die Rußoxidation ist und dass die lokale Temperatur für beide Vorgänge von entscheidender Bedeutung ist.

Gute Ergebnisse werden mit einem Acht-Schritt-Mechanismus erzielt, der sowohl die Pyrolyse des Brennstoffdampfes und damit die Bildung von Radikalen und Ethin, als auch die Bildung von Rußprimärteilchen und das Entstehen größerer Rußteilchen beschreibt. Die benötigten Rechenzeiten sind allerdings

HC stammt deshalb aus Bereichen, die nicht oder nicht vollständig von der Flamme erfasst werden. Der Mechanismus der HC-Entstehung ist deshalb insgesamt sehr komplex und einer Berechnung nur bedingt zugänglich.

Abbildung 5 zeigt die Ergebnisse einer 3D-Simulation der Strahlausbreitung sowie der Temperaturverteilung während der Verbrennung in einem Dieselmotor.

Abbildung 6 zeigt einen Vergleich zwischen einer Aufnahme des Rußleuchtens im Transparentmotor (links) und der 3D-Berechnung der Temperatur-Isoflächen für 1600 K (rechts).

Dieses Bild verdeutlicht die gute Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung und belegt damit, dass die 3D-

Abbildung 4 Zusammenfassende Darstellung der thermischen NO-Bildung nach Zeldovich

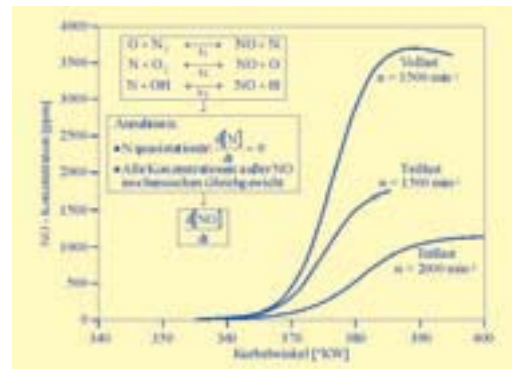


Abbildung 5 3D-Simulation der Strahlausbreitung (links) und der Temperaturverteilung nach Zündung (rechts) in einem Dieselmotor

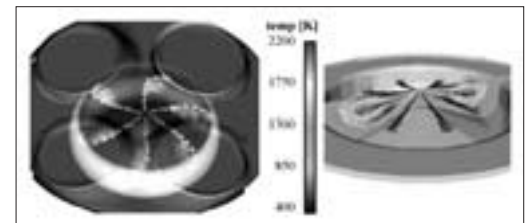


Abbildung 6a / 6b Vergleich zwischen einer Aufnahme des Rußleuchtens im Transparentmotor (links) und der 3D-Berechnung der Temperatur-Isofläche (rechts) für 1600 K

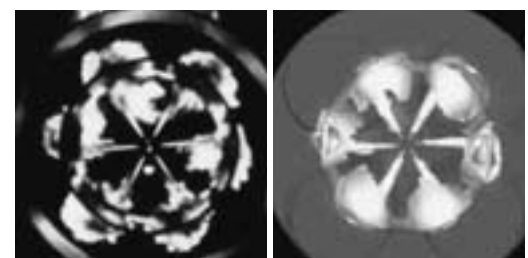


Abbildung 4 zeigt zusammenfassend die Gleichungen für den Zeldovich-Mechanismus sowie den Verlauf der NO-Bildungsrate

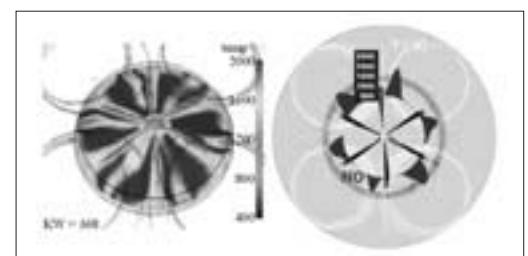
nicht unerheblich. Während die Bildung von Kohlenmonoxid heute relativ gut verstanden ist, bereitet die Modellierung der Wasserstoff-Kohlenstoff (HC)-Emission erhebliche Probleme. Bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen treten hinter der Flammenfront keine messbaren HC-Konzentrationen auf.

in Abhängigkeit des Kurbelwinkels für drei Lastpunkte eines Dieselmotors.

Obwohl die Reduzierung der Rußemission die wahrscheinlich größte Herausforderung bei der Weiterentwicklung der dieselmotorischen Verbrennung darstellt und seit länge-

$$\frac{d[NO]}{dt} = f(T; O_2, N_2, H, O, OH, NO)$$

Abbildung 7 Strahlausbreitung, Temperaturverteilung und NO-Bildung (rechts) während der Hauptinspritzung in einem DE-Dieselmotor



Simulation zur Lösung konkreter Fragestellungen bei der dieselmotorischen Verbrennung bereits heute sehr erfolgreich eingesetzt werden kann.

Abbildung 7 zeigt die Strahl- ausbreitung, Temperatur- verteilung und NO-Konzent- ration während der Haupt- einspritzung in einem direkt einspritzenden (DE) Diesel- motor.

Die linke Bildhälfte ver- deutlicht dabei, dass die höchsten Temperaturen und damit auch die höchsten NO- Konzentrationen leeseitig auf- treten.

Zusammenfassung und Ausblick

Die CFD-Simulation nicht reaktiver homogener Strömungen hat heute einen Entwicklungs- stand erreicht, der selbst bei hohen Genauigkeitsanfor- derungen die Messtechnik in weiten Bereichen ersetzen und darüber hinaus zusätzliche In- formationen liefern kann.

Im Gegensatz dazu können mit der CRFD-Simulation reaktiver homogener Strömungen zwar zusätzliche Erkenntnisse über motorische Prozesse gewonnen werden, eine Vor- ausberechnung der Gemisch- bildung und des Verbren- nungsablaufs ist jedoch nur begrenzt möglich.

Hier liegt der Schlüssel in einer richtigen Erfassung der Vorgänge im wandnahen Be- reich und einer ausreichend genauen Darstellung der Re- aktionskinetik für technisch relevante Brennstoffe.

Im Hinblick auf *vorwiegend numerische Probleme* ist Ent- wicklungsbedarf gegeben be- züglich der Netzabhängigkeit der Lösungen, der unzurei- chenden Erfassung des Wand- wärmeübergangs, der Strahl- und Flammenfrontausbrei- tung. Im Hinblick auf *vorwie- gend physikalische Probleme* ist eine Weiterentwicklung der Turbulenzmodelle und der Strahlerfallsmethode vor- dringlich. Zusätzlich sind ge- nauere Modelle zur Beschrei- bung der Rußbildung und Rußoxidation sowie der Kopp- lung von Reaktionskinetik und Turbulenz notwendig.

Mit Hilfe dieser verbesserten Modelle wird die Weiterent- wicklung der dieselmotori- schen Brennverfahren erheb- lich unterstützt werden. Diese Weiterentwicklung ist nötig, denn der Verbrennungsmotor, insbesondere der Dieselmotor, wird noch mindestens 15 bis 20 Jahre das dominierende Antriebsaggregat für Fahrzeu- ge bleiben.



Prof. Dr.-Ing. habil. Günter P. Merker

Jahrgang 1942, ist Leiter des Instituts für Technische Ver- brennung an der Universität Hannover

Literatur

- 1 Merker, G. P. und G. Stiesch: Technische Verbrennung / Motorische Verbren- nung; B. G. Teubner Stuttgart (1999)
- 2 Merker, G. P. und U. Kessen: Technische Verbrennung/Verbrennungsmotoren; B. G. Teubner Stuttgart (1999)
- 3 Merker, G. P. und Ch. Schwarz: Techni- sche Verbrennung / Simulation verbren- nungsmotorischer Prozesse; B. G. Teub- ner Stuttgart (2001)
- 4 Stiesch, G.: Phänomenologisches Multi- zonen-Modell der Verbrennung und Schadstoffbildung im Dieselmotor; Dis- sertation, Universität Hannover (1999)
- 5 Merker, G. P. und G. Stiesch: Technische Verbrennung / Motorische Verbren- nung; B. G. Teubner Stuttgart (1999)