1 Einleitung

Ein niedriger spezifischer Brennstoffverbrauch bei gleichzeitig hoher Motorleistung in Verbindung mit minimalem Schadstoffausstoß sind die wesentlichen Anforderungen an moderne Verbrennungsmotoren. Grundlage hierfür ist zum einen die weltweit steigende Nachfrage nach dem fossilen Energieträger Erdöl bei nahezu gleichbleibendem Angebot. Zum anderen treten die Verpflichtungen hinsichtlich des Klimaschutzes, den CO_2-Austoß sowie die Schadstoffemissionen zu reduzieren, immer stärker in den Vordergrund. Um die Attraktivität des Verbrennungsmotors dauerhaft erhalten zu können, müssen diese Rahmenbedingungen die Grundlage der Entwicklung zukünftiger Motoren bilden.

Aufgeladene Dieselmotoren mit Direkteinspritzung bieten aufgrund ihres prinzipbedingten hohen Wirkungsgrades einen besonders niedrigen Kraftstoffverbrauch. Im Vergleich zum Ottomotor ergeben sich jedoch höhere Stickoxid- und Partikelemissionen. Um die stufenweise abgesenkten Grenzwerte dieser gesetzlich limitierten Schadstoffkomponenten auch in Zukunft einhalten zu können, liegt ein Schwerpunkt auf der Entwicklung neuer Brennverfahren. Im Vordergrund steht dabei das Ziel, die Entstehung der Schadstoffe bereits während der Verbrennung des Kraftstoffs zu verhindern. Hervorzuheben ist hierbei der Ansatz einer homogenisierten dieselmotorischen Verbrennung (**H**omogeneous **C**harge **C**ompression **I**gnition) [Sch03]. Bei diesem Brennverfahren wird ein homogen-mageres Brennstoff/Luft-Gemisch verdichtet. Anschließend entzündet es sich aufgrund des Überschreitens der Zündtemperatur selbst. Die homogene Gemisch- und Temperaturverteilung im Brennraum führt zu einer an unendlich vielen Orten gleichzeitig stattfindenden Zündung, auch Raumzündung genannt. Charakteristisch für dieses Verfahren ist eine hohe Wärmefreisetzungsrate sowie eine kurze Brenndauer, welche einen hohen thermodynamischen Wirkungsgrad (Gleichraumprozess) begünstigt. Zusätzlich werden hohe Verbrennungstemperaturen und somit die Bildung von Stickoxiden weitestgehend verhindert. Die Ruß- bzw. Partikelbildung kann darüber hinaus vermieden werden, da im Brennraum idealerweise keine Bereiche fetten Gemisches vorliegen.

Im Rahmen neuester Forschungsvorhaben [FHM03], [SSK04], [Pöt05] werden im Zusammenhang mit der Potenzialabschätzung neuer Brennverfahren alternative Kraftstoffstrategien untersucht. Wesentliche Arbeitsinhalte sind sowohl die Optimierung des Zusammenwirkens von Brennverfahren und Kraftstoffzusammensetzung, als auch die Überlegung Kraftstoffe aus Erdgas (**G**as **T**o **L**iquid) [CLL04]

oder Biomasse (**B**iomass **T**o **L**iquid) [FNR03] herzustellen, um die Abhängigkeit vom fossilen Energieträger Erdöl zu reduzieren.

Die Auslegung des Brennverfahrens ist von einer Vielzahl von Parametern, wie Einspritzstrategie, Kraftstoffzusammensetzung, Temperatur und Druck im Brennraum, Abgasrückführung, Bauform des Brennraumes, abhängig. Hierbei ist die Analyse und Steuerung innermotorischer Vorgänge hinsichtlich Gemischbildung und Homogenisierung des Kraftstoff/Luft-Gemisches bis zum Zeitpunkt kurz vor Selbstzündung eine maßgebliche Herausforderung. In der Motorenentwicklung und besonders in diesem Zusammenhang erhält die dreidimensionale Simulation innermotorischer Prozesse unter Verwendung der numerischen Strömungsmechanik (**C**omputational **F**luid **D**ynamics) einen immer höheren Stellenwert. So können kostenintensive experimentelle Untersuchungen zur Brennverfahrensauslegung mit aufwendigen Parameterstudien reduziert und durch Vorausberechnungen mittels CFD-Simulationen ersetzt werden. Hierfür werden geeignete Modelle benötigt, welche die ablaufenden innermotorischen Prozesse ausreichend genau beschreiben, dabei jedoch ein vertretbares Maß an Rechenzeit und Speicherbedarf beanspruchen.

2 Stand der Forschung

In vorliegendem Kapitel werden zuerst die Grundlagen und wichtigsten Eigenschaften der homogenisierten dieselmotorischen Verbrennung im Vergleich zur konventionellen Dieselverbrennung beschrieben. Hierbei wird auf die für das HCCI-Verfahren charakteristische Zwei-Stufen-Zündung von dieselähnlichen Kraftstoffen sowie auf bestehende Ansätze zur Gemischbildung eingegangen. Es folgt eine Beschreibung zukünftiger alternativer Kraftstoffstrategien und deren Einflüsse auf die Umsetzung moderner Brennverfahren.

Zur Definition der Leistungsumfänge in der Aufgabenstellung (Kapitel 3) für das zu entwickelnde Multikomponenten-Verdampfungsmodell sind Kenntnisse über diese Grundlagen und Strategien notwendig.

Abschließend werden der in der vorliegenden Arbeit verwendete Ansatz der kontinuierlichen Thermodynamik zur Abbildung von Multikomponentenbrennstoffen sowie die erforderlichen Grundlagen der Verdampfungsmodellierung vorgestellt und bewertet. Dies dient dann als Basis für die im vierten Kapitel beschriebene Entwicklung des Verdampfungsmodells für Kraftstoffgemische.

2.1 Grundlagen der homogenisierten dieselmotorischen Verbrennung

Die homogenisierte dieselmotorische Verbrennung wird auch als „homogene Kompressionszündung“ oder „**H**omogeneous **C**harge **C**ompression **I**gnition (HCCI)“ bezeichnet. Dieser Ansatz kombiniert theoretisch die Vorteile der ottomotorischen Verbrennung und der konventionellen dieselmotorischen Verbrennung. Durch die in Bild 2.1 dargestellten Entwicklungsschritte sowohl beim Otto- als auch beim Dieselmotor, sind die Vorraussetzungen gegeben, ein kombiniertes Brennverfahren zu verwirklichen. Als Vorteile sind hier im Wesentlichen die niedrigen Stickoxid- und Partikel-Rohemissionen sowie ein geringer Kraftstoffverbrauch zu nennen. Das homogene Brennverfahren kann sowohl auf Basis des Ottomotors als auch des Dieselmotors umgesetzt werden. In beiden Fällen erfolgt die Initialisierung der Verbrennung über eine Selbstzündung eines mageren homogen im Brennraum verteilten Kraftstoff/Luft-Gemisches.

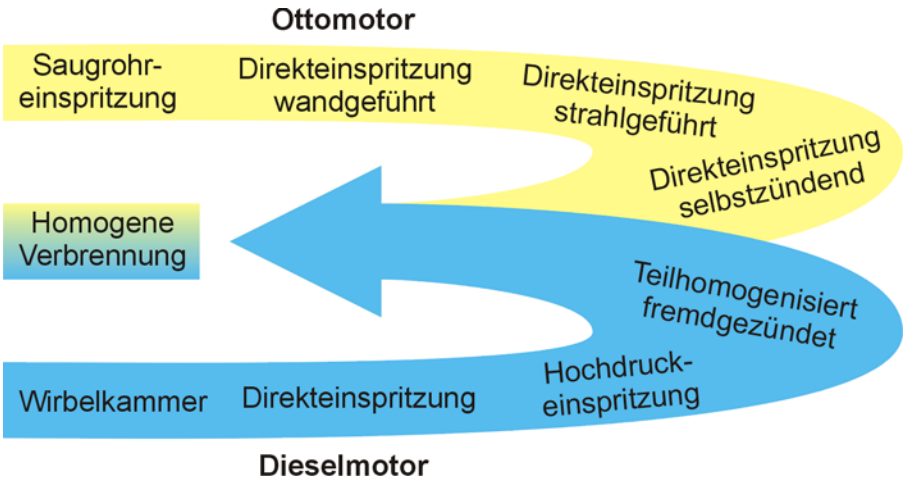

Bild 2.1: Wege zur homogenen Verbrennung [SKS01]

Beim modernen konventionellen dieselmotorischen Prozess wird der Kraftstoff kurz vor dem oberen Totpunkt direkt in den Brennraum eingespritzt. Aufgrund eines beim Dieselmotor üblichen hohen Verdichtungsverhältnisses, liegen im Brennraum hohe Temperaturen und ein hoher Druck vor. Nach einer kurzen Verzugszeit entzündet sich das Kraftstoff/Luft-Gemisch in lokalen Bereichen mit optimalen Zündbedingungen selbst. Da die kurze Zündverzugszeit, der Zeitraum zwischen Einspritz- und Brennbeginn, nicht ausreicht, um den gesamten in den Brennraum eingespritzten Kraftstoff zu verdampfen und mit der Luft zu homogenisieren, laufen die Prozesse Einspritzung, Gemischbildung und Verbrennung größtenteils zeitlich überlagert ab. Das hat die Ausbildung fetter und magerer Zonen im Brennraum zur Folge. Hieraus folgt wiederum eine Stickoxid- und Rußbildung, die sich nahezu über den gesamten Verbrennungsprozess erstreckt.

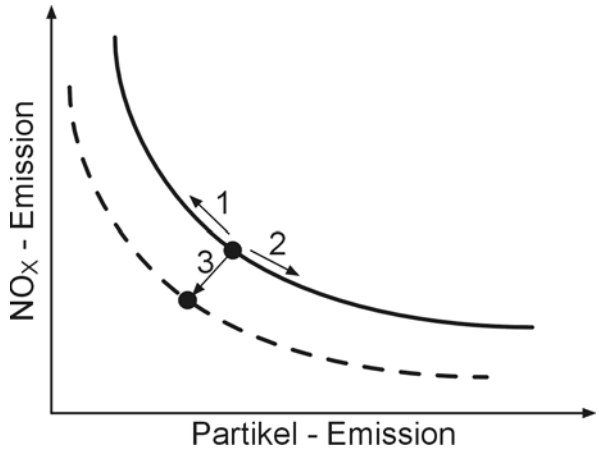

Bild 2.2: Partikel/NO_x Trade Off [MSS04]

Eine gleichzeitige und hinreichende innermotorische Reduzierung beider Schadstoffkomponenten ist aufgrund des bekannten Partikel/NO_x Trade Off [MSS04], siehe Bild 2.2, nicht möglich. Im Fall der homogenisierten dieselmotorischen Verbrennung wird die Bildung der bei der konventionellen Dieselverbrennung dominanten Schadstoffkomponenten Stickoxide (NO_x) und Ruß vermieden. Im Gegensatz zur konventionellen Dieselverbrennung wird der Kraftstoff sehr früh in den Brennraum eingebracht, so dass ausreichend Zeit für eine Homogenisierung des Kraftstoff/Luft-Gemisches vorhanden ist. Aufgrund dieser längeren Zeit für die Gemischbildung werden stark heterogene Bereiche im Brennraum vermieden und es wird somit die konventionelle Verbrennung verhindert. Charakteristisch für dieses Brennverfahren ist eine zeitliche Trennung der Gemischbildung von der Zündung mit anschließender Verbrennung.

Die thermische Stickoxid-Bildung im verbrennungsmotorischen Prozess, beschrieben durch den Zeldovich-Mechanismus, findet bei Temperaturen oberhalb von 2000 K in mageren Bereichen statt. Die Ruß- bzw. Partikelbildung erfolgt hingegen in fetten Gemischzonen mit $\lambda<0{,}8$ bei Temperaturen über 1400 K. Dadurch, dass beim HCCI-Verfahren keine Zonen fetten Gemisches im Brennraum vorliegen und sich aufgrund des hohen Luftüberschusses lokal und global niedrigere Temperaturen ausbilden, können die oben beschriebenen für die Schadstoffbildung kritischen Temperatur- und λ-Bereiche vermieden werden. Diese Abgrenzung der Bereiche von Stickoxid- und Rußbildung zum Betriebsbereich des HCCI-Verfahrens veranschaulicht Bild 2.3.

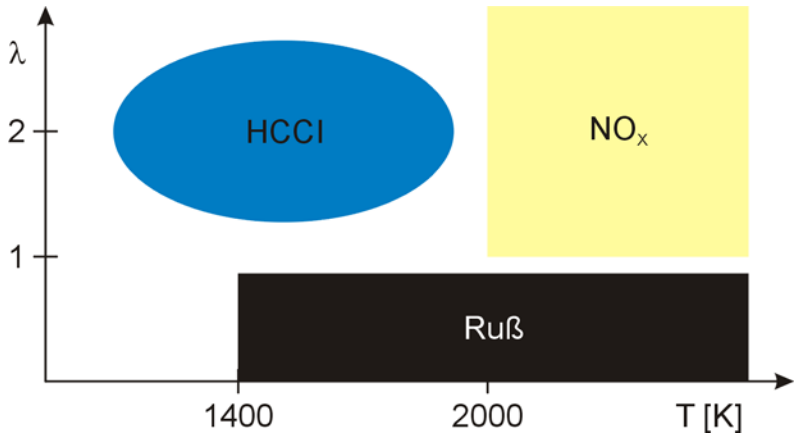

Bild 2.3: Vermeidung von Ruß und NO_x beim HCCI-Brennverfahren [MSS04]

Das im Brennraum vorliegende homogenisierte magere Gemisch entzündet sich bei überschreiten der Zündtemperatur. Aufgrund der gleichmäßigen Temperatur- und Gemischverteilung im Brennraum, geschieht dieser Prozess an unendlich vielen

Orten im Brennraum gleichzeitig. Dieser Vorgang wird auch Raumzündung genannt und ist charakteristisch dafür, dass sich keine Flammenfront ausbildet. Auf diese Weise herrschen niedrige Verbrennungstemperaturen und die bereits erwähnte Bildung von Stickoxiden kann verhindert werden. Gleichzeitig führt die homogen magere Gemischzusammensetzung ($\lambda > 1$) dazu, dass keine Rußpartikel gebildet werden [GMü02].

Eine weitere wesentliche Eigenschaft des homogenisierten Brennverfahrens ist eine hohe Wärmefreisetzungsrate bei kurzer Brenndauer [WPL91], [Pis02]. Beim HCCI-Verfahren zeigen dieselähnliche zündwillige Kraftstoffe einen zweistufigen Wärmefreisetzungsverlauf, siehe Bild 2.4. Die erste Stufe der Wärmefreisetzung wird durch die sogenannten Niedrigtemperatur-Reaktionen (Low Temperature Oxidation, LTO), die zweite deutlich höhere Wärmefreisetzungsstufe durch die Hochtemperatur-Reaktionen (High Temperature Oxidation, HTO) beschrieben. Die Zeitspanne zwischen den beiden Wärmefreisetzungen wird als Bereich des negativen Temperaturkoeffizienten (Negative Temperature Coefficient, NTC) bezeichnet [PGB96], [ZYM01], [ZYM02]. Während der LTO-Reaktionen werden ca. 7-10% der gesamten Wärmemenge freigesetzt [ZYM01].

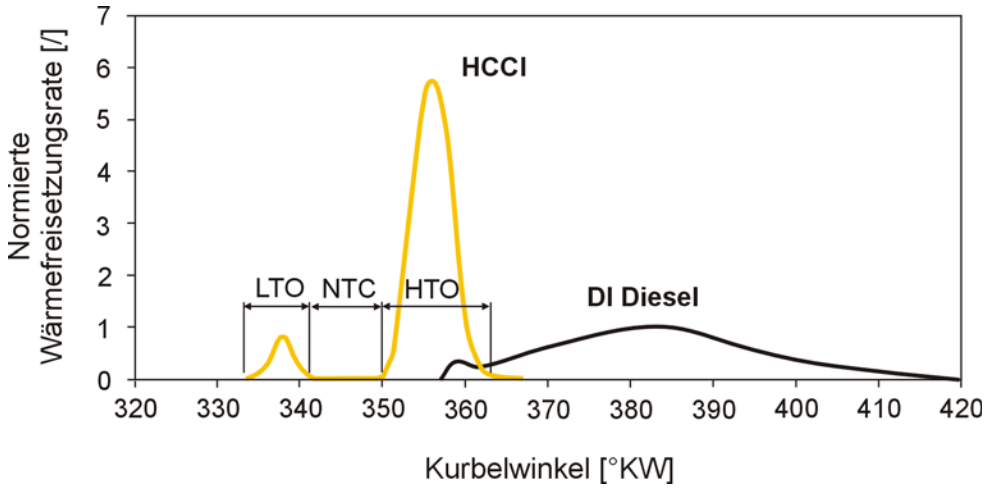

Bild 2.4: Zweistufige Zündung und Verbrennung beim HCCI-Verfahren

Die LTO-Reaktionen kommen bei höheren Brennraumtemperaturen zum Stillstand. Mit der durch die LTO-Reaktionen freigesetzten und der durch weitere Kompression zugeführten Wärme, werden während der NTC-Phase schließlich die Bedingungen für die Hauptwärmefreisetzung (HTO) geschaffen. Diese Reaktionsmechanismen werden im nächsten Abschnitt detailliert beschrieben. Der wichtigste Unterschied zwischen den Wärmefreisetzungsraten der konventionellen Dieselverbrennung und

dem HCCI-Verfahren, welcher in Bild 2.4 dargestellt ist, liegt in der Zusammensetzung des Kraftstoff/Luft-Gemisches im Brennraum zum Zeitpunkt der Selbstzündung. Das beim konventionellen Verfahren vorhandene stark heterogene Kraftstoff/Luft-Gemisch zündet in lokalen Brennraumbereichen an denen die besten Zündbedingungen vorherrschen. Durch die Wärmefreisetzung dieser ersten Reaktionen wird die Zündung in benachbarten Bereichen angeregt. Nach der Selbstzündung beginnt die konventionelle Dieselverbrennung mit einer schlagartigen Verbrennung des während der Zündverzugszeit entstandenen homogenen Gemisches (Vorgemischte Verbrennung). Die im weiteren Verlauf einsetzende Hauptverbrennung wird als mischungskontrolliert bezeichnet, da diese von den Diffusionsvorgängen der parallel ablaufenden Gemischbildung abhängig ist. Daher wird diese Phase der Verbrennung auch als Diffusionsverbrennung bezeichnet. Die Geschwindigkeit dieser Mischungsvorgänge bestimmt somit die Reaktionsgeschwindigkeit [Mol97], [See04]. Im Gegensatz zur vorgemischten Verbrennung muss der hier verbrennende Kraftstoff erst aufbereitet werden. Die daraus resultierende Energieumsetzung ist daher entsprechend langsamer. Es ergibt sich somit für die konventionelle Dieselverbrennung der in Bild 2.4 dargestellte langgezogene Wärmefreisetzungsverlauf.

Im Fall der homogenen Verbrennung zündet die gesamte Zylinderladung gleichzeitig. Das Kraftstoff/Luft Gemisch reagiert zuerst gemäß der LTO-Reaktionen. Nach dem Brennverzug, ausgelöst durch den negativen Temperaturkoeffizient, setzt die Hauptverbrennung ein. Aufgrund der gleichzeitigen Reaktion des gesamten Gemisches ergibt sich eine erheblich höhere Wärmefreisetzungsrate. Um das für die gleichzeitige Zündung erforderliche homogene Gemisch zu erzeugen, ist eine sehr frühe Einspritzung des Kraftstoffes in den Brennraum notwendig. Dadurch steht sowohl dem Prozess der Gemischbildung als auch den chemischen Reaktionen zwischen Brennstoff und Luft deutlich mehr Zeit zur Verfügung. Es ergibt sich aufgrund dieser langen Reaktionszeit eine rein reaktionskinetisch bestimmte Zündung. Der Zeitpunkt des Einspritzbeginns zur Steuerung des Brennbeginns spielt hierbei im Gegensatz zur konventionellen Verbrennung keine entscheidende Rolle mehr.

2.1.1 Beschreibung der Zündung im HCCI-Verfahren

Der im vorherigen Kapitel beschriebene für das homogene dieselmotorische Brennverfahren charakteristische Wärmefreisetzungsverlauf mit den Reaktionsabschnitten:

- Niedrigtemperatur-Reaktionen (low temperature oxidation, LTO),
- Negativer Temperaturkoeffizient (negative temperature coefficient, NTC),
- Hochtemperatur-Reaktionen (high temperature oxidation, HTO),

wird im folgenden anhand des für Alkane charakteristischen Reaktionsmechanismus dargestellt. Die Zündung von Alkanen, als Hauptbestandteil von Dieselkraftstoff [DGM02], wird in dem für die homogene Dieselverbrennung entscheidenden niederen und mittleren Temperaturbereich durch das Auftreten der sogenannten Zwei-Stufen-Zündung charakterisiert. Durch eine erste Zündphase steigt die Wärmefreisetzung zunächst an und verringert sich anschließend oberhalb von 900 K wieder. Nach Überschreiten von etwa 1000 K schließt sich eine zweite Zündphase an, welche zur vollständigen Umsetzung des Kraftstoffs führt. Der in Bild 2.5 schematisch dargestellte, auftretende negative Temperaturkoeffizient (NTC) begründet sich in der oben genannten Zwei-Stufen-Zündung.

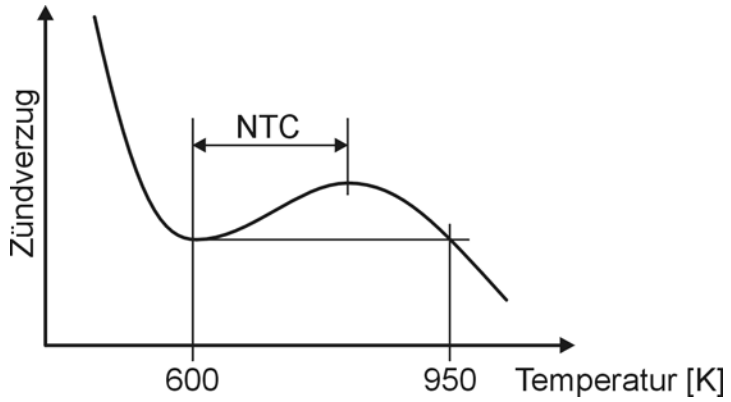

Abb. 2.5: Bereich des negativen Temperaturkoeffizienten (NTC) [Sti03]

Dieser beschreibt die Tatsache, dass die Zündverzugszeit mit steigender Ausgangstemperatur innerhalb des NTC-Bereichs größer wird. Bei langkettigen Alkanen ist der negative Temperaturkoeffizient am stärksten ausgeprägt. Demgegenüber zeigen Alkene und Aromate nur ein schwaches bzw. kein NTC- Verhalten [Lep90].

Im Niedertemperaturbereich unterhalb einer Brennraumtemperatur von ca. 850 K [GMü02], [TSA00], welcher im motorischen Betrieb die erste Zündstufe beschreibt, laufen die LTO-Reaktionen ab und es liegt ein komplexer Kettenverzweigungsmechanismus vor [CGP98]. Gleichung (2.1) beschreibt die endotherme Startreaktion des LTO-Bereiches, bei der Brennstoffradikale ($R^\bullet$) gebildet werden.

$$RH + O_2 \rightleftarrows R^\bullet + HO_2^\bullet \tag{2.1}$$

An das gebildete Brennstoffradikal (Alkylradikal) findet dann eine O_2 Addition statt.

$$R^\bullet + O_2 \rightleftarrows RO_2^\bullet \tag{2.2}$$

Die Gleichgewichtskonstante der Reaktion (2.2) ist stark temperaturabhängig. Bei niedrigen Temperaturen liegt das Gleichgewicht auf der rechten Seite, bei steigender Temperatur verschiebt sich das Gleichgewicht nach links. Im Anschluss an die Reaktion (2.2) durchlaufen die entstandenen $RO_2^\bullet$-Radikale eine interne Wasserstoffabstraktion (interne Isomerisation)

$$RO_2^\bullet \rightleftarrows R'OOH^\bullet \tag{2.3}$$

und es bildet sich ein Brennstoffradikal mit einem Carbonsäurerest, siehe Reaktion (2.3). Infolge erneuter Reaktionen dieses Moleküls mit Sauerstoff und interner Wasserstoffabstraktion, entstehen unter anderem zwei $OH^\bullet$-Radikale:

$$R'OOH^\bullet + O_2 \sim\sim > OR''O^\bullet + 2OH^\bullet . \tag{2.4}$$

Die Hydroxyl-Radikale ($OH^\bullet$) abstrahieren erneut Wasserstoff von Brennstoffradikalen, im Vergleich zu Reaktion (2.1) jedoch wesentlich schneller.

$$RH + OH^\bullet \rightleftarrows R^\bullet + H_2O \tag{2.5}$$

Bei dieser exothermen Reaktion entsteht ein neues Brennstoffradikal ($R^\bullet$) und Wasser. Hierbei kommt es zu einer ersten bedeutenden Wärmefreisetzung, wie bereits in Bild 2.4 dargestellt ist. Diese Niedrigtemperatur-Oxidation (LTO) hält solange an, bis sich das Gleichgewicht von Reaktion (2.2) bei einer Temperatur von ca. 900 K verschiebt. Infolge dieser Verschiebung bzw. weiteren Temperaturerhöhung wird die Kettenverzweigung über die Isomerisierungsreaktion (2.3) unterbrochen. Dabei entsteht der bereits beschriebene Bereich mit negativem Temperaturkoeffizienten, da die Reaktion (2.5) ohne die weitere Zufuhr von $OH^\bullet$-Radikalen nicht ablaufen kann. In diesem mittleren Temperaturbereich werden stattdessen überwiegend Alkene und $HO_2^\bullet$-Radikale gebildet, wobei die $HO_2^\bullet$-Radikale