



Danica Stegemann (Autor)

## Modellierung der Multikomponentenverdampfung und Selbstzündung in Dieselmotoren



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2386>

Copyright:

Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,  
Germany

Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: [info@cuvillier.de](mailto:info@cuvillier.de), Website: <https://cuvillier.de>

# 1. Einleitung

Otto- und Dieselmotoren weisen trotz ihrer über 100-jährigen Gebrauchs- und Entwicklungszeit einen stetigen Forschungsbedarf auf. Während zu Beginn des 20. Jahrhunderts überwiegend die Leistungssteigerung der Motoren im Vordergrund der Entwicklung stand, ist mit der steigenden Umweltbelastung aufgrund von Industriebetrieben und Verkehrsaufkommen die Reduzierung von Schadstoffemissionen mittlerweile zum zentralen Entwicklungsziel herangewachsen.

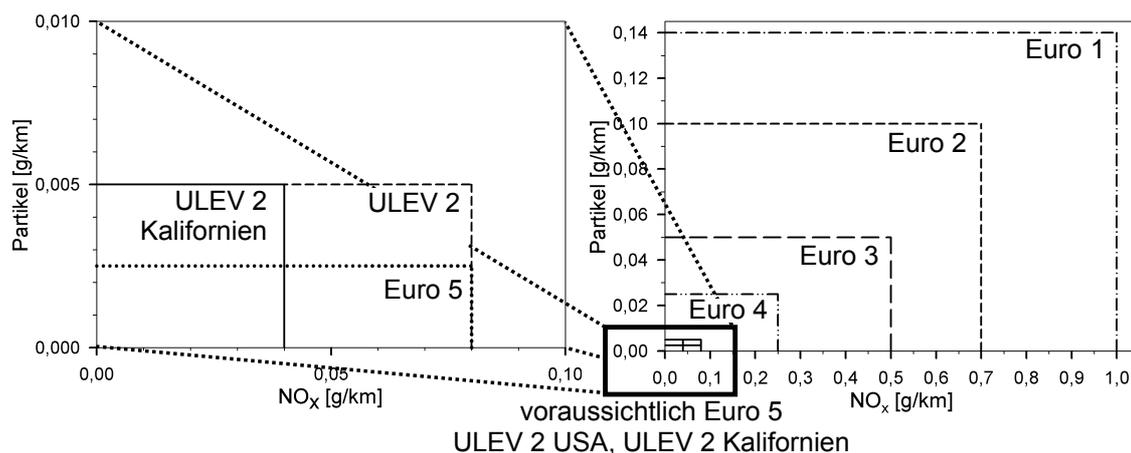


Abb. 1-1: Abgasnormen Diesel-PKW der EU und den USA (Daten [MOT])

In Abb. 1-1 sind die Abgasvorschriften der Europäischen Union (*Euro 1 bis 5*) und der USA (*ULEV 2, Ultra Low Emissions Vehicle*) dargestellt. Die Abgasnorm Euro 5 wird 2008 in Kraft treten. Die ULEV 2-Norm ist in den USA mit einer gesonderten Form für Kalifornien ab 2007 gültig. Der für die Dieselerbrennung typische Ausstoß von Rußpartikeln ist seit 1990 stufenweise bis zur heute gültigen Euro 4-Norm um 90 % auf 0,025 g/km, wegen des Verdachts von karzinogenen Eigenschaften, abgesenkt worden. Das Partikellimit von 0,0025 g/km der zukünftigen Euro 5-Gesetzgebung, wird nach dem Vorschlag des Umweltbundesamtes eine weitere Absenkung um 99 % zur Folge haben. Die fortschreitenden Innovationen, wie z.B. variable Ventiltriebe, hochflexible Einspritzsysteme, optimiertes Management der Abgasrückführung sowie mehrstufige Aufladekonzepte in Kombination mit Abgasnachbehandlungskonzepten als motorexterne Maßnahmen tragen dazu bei, dass neue Lösungsansätze in der Motorenentwicklung keinen entscheidenden Kompromiss mehr zwischen Motorleistung, Kraftstoffverbrauch und Abgasemissionen für die unterschiedlichen Betriebszustände darstellen. Nur die Kombination der genannten Ansätze wird es ermöglichen, die stetig strenger werdenden gesetzlichen Anforderungen und den Wunsch der Kunden nach hohem Fahrkomfort gleichzeitig zu erfüllen. Es bleibt jedoch zu ermitteln, welche Konstellation der Maßnahmen in Abhängigkeit des Fahrzeugkonzeptes die Bestlösung bezüglich der aus dem technischen Aufwand resultierenden Kosten und dem direkten Nutzen für den Endverbraucher darstellen

wird. Aufgrund dieser drastisch steigenden Anzahl an Freiheitsgraden und der zunehmend kürzeren Entwicklungszeit spielt die Simulation der motorischen Prozesse eine immer entscheidendere Rolle. Es ergibt sich eine erhöhte Anforderung aus der gesteigerten Anzahl an Motorparametern mit einer bestmöglichen Beschreibungsgüte der Prozesse. Im Fokus steht hierbei, das dynamische Verhalten komplexer Systeme zu verstehen, Gesetzmäßigkeiten zu erkennen und damit zuverlässige Aussagen über das zukünftige Verhalten von Gesamtsystemen zu ermöglichen. Bei der modellbasierten Parameteroptimierung wird das Motorverhalten mathematisch beschrieben. Die Optimierung erfolgt somit nicht mehr am realen Motor, sondern an einem Modell, das alle für die konkrete Optimierungsaufgabe relevanten Effekte berücksichtigt, wodurch Zeit und Kosten für Versuche am realen Motor eingespart werden können. Die Voraussetzungen für die Simulation sind mechanische, chemische und thermodynamische Modelle, wobei die Modelle im Wesentlichen auf den Grundlagen der Thermodynamik, der Fluidmechanik und der chemischen Reaktionskinetik basieren. Für die Berechnung dreidimensionaler Strömungsfelder im Motorbrennraum oder in sonstigen Bauteilen von Verbrennungsmotoren wurden kommerziell verfügbare *CFD* (*Computational Fluid Dynamics*)-Codes, wie z.B. KIVA, FIRE oder Star-CD, entwickelt.



Abb. 1-2: Modellkette in CFD-Codes

In Abb. 1-2 ist die Modellkette herkömmlicher CFD-Codes skizziert. Es ist zu berücksichtigen, dass die Prozesse nicht nur sequentiell sondern auch simultan ablaufen. Für die Berechnung von jedem Teilprozess werden einzelne Modelle verwendet, die miteinander verkoppelt werden. Aus dieser Darstellung wird ersichtlich, dass jeder Teilprozess genauestens beschrieben werden muss, da sonst eine Fehleraddition stattfindet. Bei diesen kommerziell verfügbaren Codes wird üblicherweise ein Ersatzbrennstoff eingesetzt, der - im Gegensatz zu realen Kraftstoffen - nur aus einer einzigen Komponente besteht. Für die Simulation von Dieselmotoren wird dieser Ersatzkraftstoff überwiegend durch das Alkan *Tetradekan* ( $C_{14}H_{30}$ ) repräsentiert. Diese, den Berechnungsaufwand begünstigende Vereinfachung, toleriert einen systematischen Abbildungsfehler insbesondere bezüglich der Verdampfung vom realen mehrkomponentigen Dieselmotorkraftstoff.

In der vorliegenden Arbeit wird daher ein Multikomponenten-Ersatzbrennstoff für Dieselmotoren verwendet, der eine Vielzahl von Komponenten beinhaltet. Um das Verdampfungsverhalten realistischer zu gestalten, wird ein zusätzliches Tropfenmodell entwickelt, das die Zustände im Inneren des Multikomponenten-Kraftstofftropfens abbildet. Der dieselmotorische Selbstzündungsprozess wird erweitert, um alle Informationen, die über den Multikomponenten-Ersatzbrennstoff vorliegen, mit in den Zündungsprozess zu integrieren.

## 2. Stand der Forschung

Es wird eine Übersicht über den bisherigen Wissenstand in Bezug auf die Modellierung der Brennstoffverdampfung, den dazu verwendeten Tropfenmodellen, eine Erklärung des Selbstzündungsvorgangs und den dazugehörigen Selbstzündungsmodellen dargestellt.

Als Verdampfung bezeichnet man den Übergang eines Stoffes vom flüssigen in den gasförmigen Aggregatzustand. Dieser Vorgang wird auch als Sieden bezeichnet. Die während des Verdampfungsprozesses vorliegenden Temperatur- und Druckbedingungen liegen als Siededruck bzw. Siedetemperatur vor, und die erforderliche Energie wird als Verdampfungswärme bzw. Verdampfungsenthalpie bezeichnet. Beim Verdampfen stehen der Flüssigkeitsdampf und die Flüssigkeitsgrenzfläche unter dem gleichen Druck, d.h. der Dampfdruck der Flüssigkeit ist gleich dem Systemdruck. Es genügt eine geringe Flüssigkeitsüberhitzung des Tropfens, damit auch im Flüssigkeitskern eine Verdampfung stattfindet. Unterschieden wird das Verdampfen gegenüber dem Verdunsten, bei dem der Übergang in den gasförmigen Zustand ohne Erreichen des Siedepunktes erfolgt. Beim Verdunsten ist der Dampfpartialdruck des Flüssigkeitsdampfes geringer als der Druck an der Flüssigkeitsoberfläche, der um den Druck der übrigen Gemischpartner höher ist. Somit überlagern sich die Vorgänge der Verdampfung und Verdunstung im Verbrennungsmotor. Trotz dieser Definition sollen die Begriffe Verdampfung und Verdunstung im Folgenden in Anlehnung an den englischen Sprachgebrauch parallel verwendet werden.

### 2.1. Verdampfung des Multikomponentenbrennstoffgemisches

Die Simulation der Kraftstoffeinspritzung in die verdichtete und somit heiße Gasumgebung des Brennraums erfordert die getrennte Modellierung der gasförmigen und der flüssigen Phase, da sich die Anfangs- und Randbedingungen stark unterscheiden. Die Verdrängung des Gases durch die Flüssigkeit wird im Weiteren nicht berücksichtigt, da davon ausgegangen wird, dass der Volumenanteil der flüssigen Phase vernachlässigbar klein ist. Die Kraftstoffeinspritzung und der Strahlaufbruch werden mit gesonderten Modellen (Kap. 5.4.2) beschreiben, die nicht auf der Modellierung der Gas- und Flüssigphase basieren. Der physikalische Zusammenhang zwischen der flüssigen und gasförmigen Phase ist anhand eines Tropfen in Abb. 2-1 dargestellt. Aufgrund des Wärmeeintrags der Gasumgebung in den Tropfen beginnt sich die Flüssigkeit aufzuheizen und der Verdampfungsprozess beginnt. Dieser Wärmeeintrag kann durch Konvektion, Wärmeleitung und Temperaturstrahlung erfolgen. Zu Beginn des Aufheizungsprozesses wird ein Großteil der

hinzugeführten Energie zum Aufheizen des Tropfens benötigt. Im Falle einer Verdunstung von Reinstoffen dauert der Aufheizungsprozess des Tropfens bis zum Erreichen einer stationären Temperatur an. Mit dem Erreichen dieser Tropfentemperatur wird die weitere hinzugeführte Energie nur zum Verdampfen benutzt. Das Tropfeninnere zeichnet sich durch Geschwindigkeit-, Temperatur- und im Fall eines Flüssigkeitsgemisches durch Konzentrationsgradienten aus. Der Geschwindigkeitseintrag in den Tropfen entsteht durch die Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und umgebenen Gas. Der Geschwindigkeitseintrag kann aber auch durch freie Konvektion oder aufgrund des Marangoni-Effektes induziert werden, wobei eine Abhängigkeit der Oberflächenspannung von der Temperatur besteht [LI1].

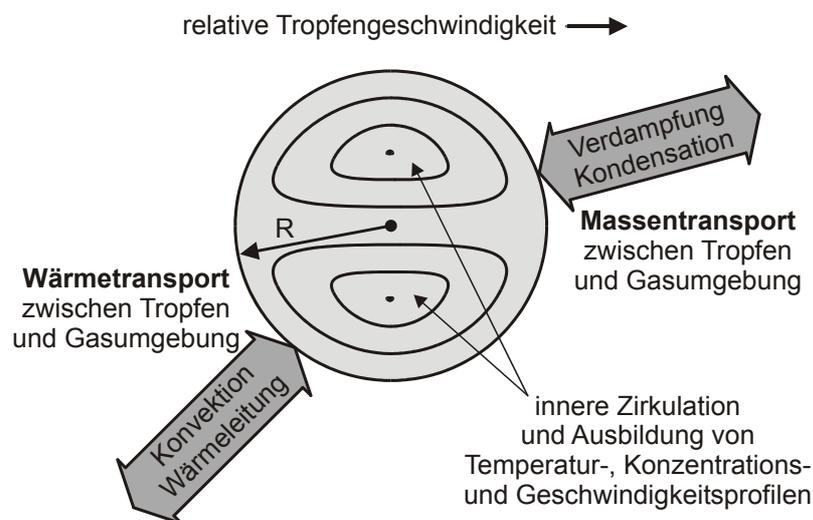


Abb. 2-1: Schematische Darstellung der Tropfenverdampfung

Die Beschreibung der Verdampfung in herkömmlichen CFD-Codes setzt folgende Annahmen voraus:

- Der Einfluss der Wärmestrahlung wird vernachlässigt.
- Die Brennstofftropfen sind ideal kugelförmig.
- Vibrationen, Kollisionen oder Zerfall der Tropfen wird während der Verdampfung vernachlässigt.
- An der Tropfenoberfläche herrscht Phasengleichgewicht.
- Ein Einfluss der Krümmung auf den Dampfdruck wird nicht berücksichtigt.
- Eine direkte Wechselwirkung mehrerer Tropfen untereinander bleibt unberücksichtigt.

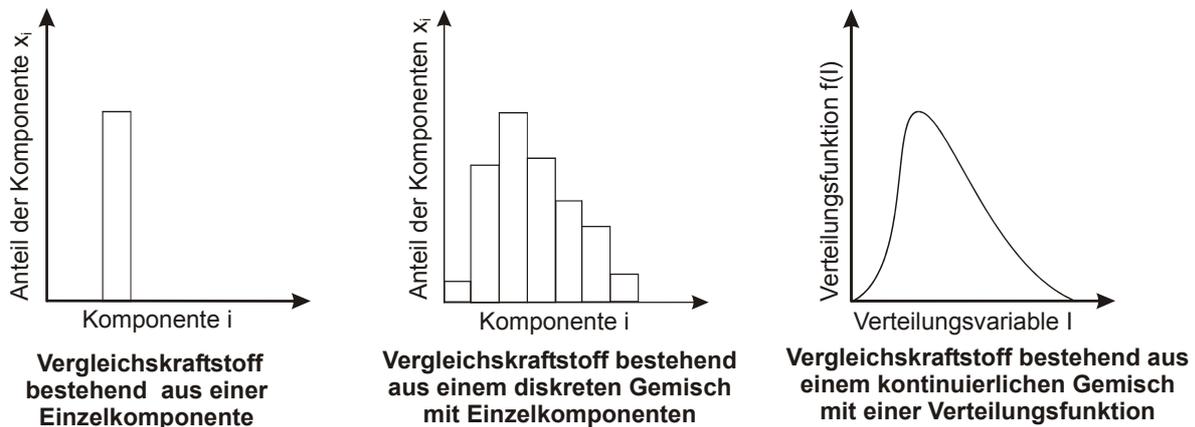
Um das Verdampfungsverhalten eines Brennstoffes abzubilden, muss dieser möglichst exakt beschrieben werden. In herkömmlichen CFD-Codes wird der Brennstoff nur über eine einzige Komponente dargestellt, die den realen Kraftstoff repräsentieren soll. Dies steht im Kontrast zur tatsächlichen Zusammensetzung von Diesel bzw. Ottokraftstoffen,

die aus 200 bis 300 Einzelkomponenten bestehen [DGM]. Durch die Wahl eines nur einkomponentigen Vergleichskraftstoffes entstehen schon zu Beginn der Simulationskette, die aus Modellen zur Beschreibung des Strahlzerfalls, der Verdampfung, der Zündung, der Verbrennung und der Schadstoffbildung besteht, Ungenauigkeiten und die darauffolgenden Prozesse werden in ihrer Präzision beeinträchtigt. Dadurch ergibt sich die Suche nach einem geeigneten Vergleichsbrennstoff, der das Verhalten des realen Brennstoffes ausreichend widerspiegelt, wobei Rechenzeit und zufriedenstellende Genauigkeit einen Zielkonflikt ergeben. In der Literatur werden unterschiedliche Ansätze zur realitätsnäheren Beschreibung des Vergleichsbrennstoffes angegeben. Bei Brennstoffgemischen, die aus mehr als zwei Komponenten bestehen [ROS], steigt der Modellierungsaufwand und somit der Rechenaufwand extrem an. Zweikomponentengemische [JIN] hingegen bieten zwar einen überschaubaren Modellierungsaufwand, bilden aber den Kraftstoff nicht ausreichend ab. Einen sehr vielversprechenden Ansatz stellt die Methode der kontinuierlichen Thermodynamik dar, dessen Grundlagen auf Katz and Brown [KAT] zurückgehen. Hierdurch eröffnete sich die Möglichkeit trotz einer hohen Anzahl der Komponenten den mathematischen Aufwand gering zu halten. Cotterman, Bender und Prausnitz [COT] haben dargestellt, dass die über die kontinuierliche Thermodynamik beschriebenen Vielstoffgemische, bei denen keine detaillierte chemische Analyse benötigt wird, die Gesamtgemischeigenschaften detaillierter abbilden als ein Gemisch, das über eine Vielzahl diskreter Einzelkomponenten beschrieben wird. Zusätzlich bietet diese Vorgehensweise den Vorteil, dass die Eigenschaften des Gemisches nicht von der Willkür der ausgesuchten diskreten Spezies abhängen. Tamin und Hallet [TAM], Lippert [LI1] und Pagel [PAG] haben diese Methode der kontinuierlichen Thermodynamik auf kommerzielle Kraftstoffe angewandt. In Abb. 2-2 ist eine Gegenüberstellung von der kontinuierlichen Thermodynamik zur diskreten Formulierung und die Vorgehensweise zur Anwendung der kontinuierlichen Thermodynamik dargestellt. In jedem der drei Fälle wird dasselbe Gemisch abgebildet. In der ersten Darstellung von Abb. 2-2 wird der Kraftstoff durch eine einzige Komponente repräsentiert, die vorzugsweise einer aussagekräftigen Größe, wie z.B. dem Mittelwert des verwendeten Kraftstoffes, entspricht. Die mittlere Darstellung zeigt ein Gemisch, das über eine Anzahl  $i$  diskreter Komponenten beschrieben wird. Im Vergleich dazu ist in der dritten Ansicht von Abb. 2-2 die Methode der kontinuierlichen Thermodynamik abgebildet. Hierzu wird eine Verteilungsfunktion  $f(I)$  über die Verteilungsvariable  $I$  gebildet. Die Verteilungsvariable stellt eine charakterisierende Größe des Gemisches dar, was normalerweise das Molgewicht ist. Somit erreicht man im kontinuierlichen Fall den Vorteil, dass die Diskretisierung einzelner kraftstoffrepräsentativer Komponenten verhindert und somit das Gemisch über alle Komponenten beschrieben wird. Das Verhalten des Kraftstoffes wird somit genauer und mit einem geringeren Aufwand

beschrieben. Die am häufigsten verwendete Verteilungsfunktion ist die sogenannte Gammaverteilungsfunktion

$$f(I) = \frac{(I-\gamma)^{\alpha-1}}{\beta^\alpha \cdot \Gamma(\alpha)} e^{-\left[\frac{I-\gamma}{\beta}\right]}, \quad (2.1)$$

die auch als Schultz-Verteilung bekannt geworden ist [COT]. Die Parameter  $\alpha$ ,  $\beta$  und  $\gamma$  stellen die Formparameter der Verteilungsfunktion dar.



*Abb. 2-2: Gegenüberstellung von diskreter Formulierung und kontinuierlicher Thermodynamik desselben Gemisches*

## 2.2. Tropfenmodelle

Bei der Modellierung der Verdampfung von Brennstofftropfen unter motorischen Bedingungen, wird im Allgemeinen angenommen, dass der Brennstoff in kugelförmigen Tropfen vorliegt. Diese Annahme ist in sofern gerechtfertigt, da die auf den Tropfen einwirkenden aerodynamischen Kräfte im Verhältnis zu den Oberflächenkräften klein sind. Die Tropfenverdampfung wird durch Wärmeleitung, Konvektion und Wärmestrahlung von der wärmeren Gasatmosphäre in den kälteren Tropfen bestimmt. Parallel dazu findet ein konvektiver und diffusiver Massentransport des verdampften Brennstoffs von der Phasengrenzfläche an der Tropfenoberfläche in die Gasumgebung statt. Die Modellierung der Verdampfung der einzelnen Kraftstofftropfen hat neben der Strahlausbreitung und Zerstäubung einen entscheidenden Einfluss auf die nachfolgenden Prozesse wie Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung. Das für die chemische Umsetzung, beginnend mit der Zündung, benötigte Kraftstoff-Luft-Gemisch wird durch die Verdampfung der Brennstofftropfen gebildet. Dem sich im Motorbrennraum befindlichen warmen Gasgemisch wird Energie zur Erwärmung des Tropfens für die benötigte Verdampfungsenthalpie entzogen.

Die umgebene Gasatmosphäre kühlt sich dadurch ab und eine starke Kopplung von Verdampfungsrate und Gaszustand ergibt sich durch Änderungen in Geschwindigkeit, Temperatur und Dampfkonzentration des Gases.

### 2.2.1. Modellierungsansätze der Tropfenverdampfung

Die ersten grundlegenden Untersuchungen zur Tropfenverdampfung gehen laut Aggarwal [AG2] auf Godsave [GOD] zurück. Bei den von Godsave durchgeführten Experimenten wurde ein Tropfen an einem dünnen Faden aufgehängt und der zeitliche Verlauf der Tropfenverdampfung mittels einer Kamera aufgezeichnet. Dabei wurde ein Zusammenhang festgestellt, der später als  $D^2$ -Gesetz bekannt wurde. Dieser Zusammenhang besagt, dass das Quadrat des Tropfendurchmessers ( $\sim$  Tropfenoberfläche) linear von einer Verdampfungskonstanten und der Zeit abhängt. Bei der mathematischen Modellierung werden die Tropfentemperatur und damit die thermodynamischen Stoffdaten des Tropfens als räumlich und zeitlich konstant angenommen, wobei die Tropfenflüssigkeit als reiner Stoff betrachtet wird. Die Tropfenverdampfung wird durch einen stationären Zustand angenähert. Dadurch sind alle thermodynamischen Stoffwerte als konstant deklariert. Die dem Tropfen zugeführte Energie wird vollständig zur Verdampfung der Tropfenflüssigkeit benötigt [OLT]. Dieses Modell stellt eine bedeutende Grundlage zur Beschreibung der Tropfenverdampfung dar. Aufgrund der starken Vereinfachungen die hier angenommen wurden, ist es durch die Entwicklung der im Folgenden beschriebenen Tropfenmodelle verdrängt worden.

In Abb. 2-3 sind grundsätzliche Modellierungsansätze zur Beschreibung der Tropfenverdampfung dargestellt. In herkömmlichen CFD-Codes wird zur Beschreibung der Tropfenverdampfung das *Mischungsmodell* (Abb. 2-3) eingesetzt. Durch Law [LAW] wurde bei der Verbrennung von vollständig durchmischten Tropfen bewiesen, dass der Tropfenaufheizungsprozess bei der Tropfenverbrennung entscheidend ist. Im Prinzip ist das Mischungsmodell dem  $D^2$ -Modell ähnlich, mit dem Unterschied, dass die konstante Tropfentemperatur mit der Annahme ersetzt wurde, dass die Temperatur im Tropfeninneren einheitlich aber zeitabhängig ist. Das Mischungsmodell wird über unterschiedliche Ansätze gerechtfertigt. Als Grundlage der zeitabhängigen aber örtlich konstanten Tropfentemperatur, die unter anderem von Priem und Heidmann [PRI] sowie Olthoff [OLT] vertreten wird, dient die Vorstellung, dass eine sehr hohe und besonders schnelle bzw. unendliche große Flüssigkeitswärmeleitfähigkeit im Tropfeninneren eine zeitlich instationäre aber räumlich konstante Tropfentemperatur entstehen lässt. Dieses Modell basiert auf den Überlegungen der erzwungenen Konvektion. Als Folge der äußeren

Reibung zwischen Umgebungsgas und Tropfengrenzfläche aufgrund der Relativgeschwindigkeit wird eine „Rührwirkung“ der Flüssigkeit innerhalb des Tropfens hervorgerufen. Falls bei der Beschreibung der Flüssigkeit kein Einkomponenten-Brennstoff sondern ein Mehrkomponenten- bzw. Multikomponenten-Brennstoff verwendet wird, wird die Konzentrationsverteilung ebenso wie die Temperaturverteilung als einheitliche aber zeitlich veränderliche Konzentration behandelt. Laut Sirignano [AG2], [SI1] kann die vollständige Durchmischung des Tropfens nicht auf die starke Zirkulation im Tropfeninneren zurückgeführt werden, da die größtmögliche Verwirbelung in Tropfeninneren die charakteristische Längenskala der Temperaturleitfähigkeit bzw. Diffusion nur um eine Größenordnung reduziert. Aus diesem Grund resultiert die einheitliche Temperatur- bzw. Konzentrationsverteilung im Tropfeninneren aus der unendlich großen Wärmeleitfähigkeit bzw. Diffusion. Sirignano [AG2], [SI1] empfiehlt deshalb die Verwendung des Namens *Infinite-Conductivity-Model* anstatt *Rapid-Mixing-Model*. Im Folgenden soll aber weiter der Begriff Mischungsmodell verwendet werden, da sich dieser Name im deutschsprachigen Raum durchgesetzt hat.

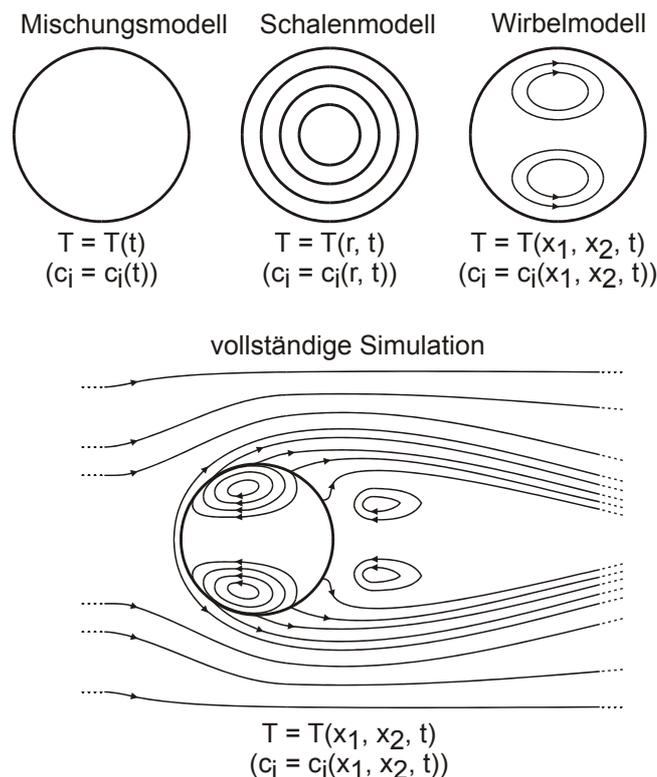


Abb. 2-3: Modellierungsansätze zur Tropfenverdampfung [SE1], [KLI]

Eine Berücksichtigung der Wärmeleitung innerhalb des Tropfens ist mit dem *Schalenmodell* (Abb. 2-3) möglich. Hierzu wird der Tropfen in eine endliche Anzahl von konzentrischen Schalen unterteilt. Jede einzelne Schale besitzt somit eine eigene