

Maximilian Fischer

**Modellierung
der Multikomponenten-Verdampfung
im homogenisierten dieselmotorischen
Brennverfahren**

Modellierung der Multikomponenten-Verdampfung
im homogenisierten dieselmotorischen
Brennverfahren

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

Dissertation

von
Dipl.-Ing. Maximilian Fischer
geboren am 12. März 1976 in Rheinberg

2006

Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2006
Zugl.: Hannover, Univ., Diss., 2006
ISBN 10: 3-86727-037-6
ISBN 13: 978-3-86727-037-3

1. Referent: Prof. Dr.-Ing. habil. G.P. Merker

2. Referent: Prof. Dr.-Ing. habil. D. Mewes

Tag der Promotion: 19. Januar 2006

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2006
Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen
Telefon: 0551-54724-0
Telefax: 0551-54724-21
www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2006

Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 10: 3-86727-037-6

ISBN 13: 978-3-86727-037-3

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Verbrennung der Universität Hannover.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. Günter P. Merker, dem Leiter des Instituts, für die wissenschaftliche und persönliche Unterstützung bei der Durchführung dieser Arbeit, sowie für die Übernahme des Hauptreferates.

Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. D. Mewes danke ich sehr für das entgegengebrachte Interesse an meiner Arbeit und für die Übernahme des Koreferates.

Weiterhin danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. habil. L. Schulze für die Bereitschaft zur Übernahme des Prüfungsvorsitzes.

Der Deutschen Bundesstiftung Umwelt (DBU), wie auch der Volkswagen AG (Konzernforschung) sei an dieser Stelle für die finanzielle und fachliche Unterstützung der Arbeit gedankt. Durch diese Förderung wurde die Arbeit erst ermöglicht.

Mein besonderer Dank gilt auch allen Kollegen, Studenten und wissenschaftlichen Hilfskräften des Instituts, die durch ihre freundliche Unterstützung und durch anregende Diskussionen zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Maximilian Fischer

Hannover, im November 2005

Kurzfassung

Die Anforderungen an Verbrennungsmotoren sind hauptsächlich ein immer geringerer Kraftstoffverbrauch und letztendlich keine Schadstoffemissionen. Ein Schwerpunkt liegt hierbei in der Entwicklung neuer Brennverfahren, um die Entstehung von Schadstoffen bereits während der Verbrennung zu verhindern. In vorliegender Arbeit wird in diesem Zusammenhang das homogenisierte dieselmotorische Brennverfahren (HCCI) betrachtet. Neueste Forschungsarbeiten beschäftigen sich zudem mit einer Potenzialabschätzung bei Verwendung alternativer Brennstoffe.

Die CFD-Simulation bietet im Rahmen dieser Entwicklungsarbeiten die Möglichkeit, umfangreiche Kraftstoff- und Parametervariationen als Vorauslegung für experimentelle Untersuchungen durchzuführen. So können damit notwendige kostenintensive experimentelle Untersuchungen stark reduziert werden. Voraussetzung hierfür ist jedoch eine möglichst genaue Modellierung der verwendeten Kraftstoffe, um die Vorgänge während der Verdampfung und Gemischbildung wiedergeben zu können. Darüber hinaus müssen für eine Modellierung der Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung aus dem Verdampfungsmodell entsprechende Eingangsgrößen vorliegen, um die Berechnung dieser Prozesse durchführen zu können.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde daher ein Multikomponenten-Verdampfungsmodell entwickelt, welches reale Kraftstoffgemische mittels zweier statistischer Verteilungsfunktionen beschreibt. Der gewählte Ansatz ermöglicht es somit, Kraftstoffbestandteile aus zwei verschiedenen Gruppen homologer Komponenten (Alkane und Aromaten) zu berücksichtigen. Dieses Modell wird in den CFD-Code KIVA-3V implementiert und mit Berechnungen zur Verdampfung von Einzeltropfen sowie durch Mie-Streulicht-Untersuchungen einfacher Einspritzvorgänge an einer schnellen Kompressionsmaschine validiert. Den Abschluss dieser Arbeit bildet die Berechnung der Gemischbildung verschiedener Kraftstoffe mittels einer für das HCCI-Dieselmotorenverfahren ausgelegten Einspritzstrategie.

Stichworte:

Verdampfung - Multikomponenten - CFD - Kontinuierliche Thermodynamik -
Homogenisierte Dieselmotorenverbrennung

Abstract

Two important requirements of combustion engines are minimal values of pollutant emissions and low fuel consumption. The main focus being the development of new combustion processes like the Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) method to minimize the amount of pollutant emissions already during the combustion process. Additionally, in this context the potential of using synthetic fuels is also investigated. In this case the CFD-simulation offers the possibility of carrying out fuel and parameter variations, reducing cost intensive experimental studies. But an assumption for these calculations is a realistic modelling of the fuel mixtures being used. The fuel behaviour during evaporation and carburation must be described exactly. Furthermore, for modelling the following processes like ignition, combustion and emission formation, the right input parameters have to be present. Only under these boundary conditions can reasonable CFD-investigations be realised.

Therefore, within this project a multicomponent evaporation model was developed, which uses the statistically based approach of continuous thermodynamics to describe several fuel mixtures with distribution functions instead of describing them with a single component surrogate fuel. In the present model formulation the composition and the properties of fuels can be described with two different distribution functions in dependence of the molecular weight. This approach offers the possibility of considering two different homologous groups of hydrocarbons (alkanes and aromatics) contained in real fuels. The model was implemented into the CFD-code KIVA-3V and validated with single droplet calculations, Mie-Scatter- and Schlieren-investigations in a rapid compression machine. Finally, CFD-simulations with a multistage fuel injection strategie for the HCCI-combustion process are made to analyse the carburation behaviour of different fuel mixtures.

Keywords:

Evaporation - Multicomponent - CFD - continuous thermodynamics -

Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI)

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-------------|
| Abkürzungen und Formelzeichen | VIII |
| 1 Einleitung | 1 |
| 2 Stand der Forschung | 3 |
| 2.1 Grundlagen der homogenisierten dieselmotorischen Verbrennung | 3 |
| 2.1.1 Beschreibung der Zündung im HCCI-Verfahren | 8 |
| 2.1.2 Gemischbildung beim HCCI-Verfahren | 12 |
| 2.2 Alternative Kraftstoffstrategien für zukünftige motorische Anwendungen | 16 |
| 2.3 Modelle zur Abbildung von Kraftstoffgemischen | 21 |
| 2.4 Grundlagen der Verdampfungsmodellierung | 27 |
| 2.4.1 Phasenübergang Flüssigkeit - Dampf | 29 |
| 2.4.2 Gasphasenmodell | 30 |
| 2.5 Bewertung | 32 |
| 3 Aufgabenstellung | 33 |
| 4 Modellierung der Multikomponenten-Verdampfung | 35 |
| 4.1 Modellansatz mit zwei Verteilungsfunktionen | 35 |
| 4.2 Modellierung der flüssigen Phase | 38 |
| 4.2.1 Tropfentemperaturänderung | 39 |
| 4.2.2 Molstromdichte und Molstromanteile | 40 |
| 4.2.3 Tropfenradiusänderung | 41 |
| 4.2.4 Änderung der Zusammensetzung der flüssigen Phase | 43 |
| 4.3 Modellierung des Phasengleichgewichts | 47 |
| 4.4 Beschreibung der Gasphase | 52 |
| 4.5 Thermodynamische Zustandsgrößen zur Beschreibung von Stoffeigenschaften | 53 |
| 4.6 Numerische Umsetzung | 57 |
| 4.7 Bewertung | 59 |

| | | |
|----------|--|------------|
| 5 | Validierung des Verdampfungsmodells | 61 |
| 5.1 | Untersuchungen an Einzeltropfen..... | 61 |
| 5.2 | Untersuchungen an Einspritzstrahlen | 80 |
| 5.2.1 | Randbedingungen der experimentellen und theoretischen Untersuchungen | 80 |
| 5.2.2 | Ergebnisse | 83 |
| 5.3 | Bewertung..... | 95 |
| 6 | Berechnung der Gemischbildung in einem HCCI-Einzylinder Forschungsmotor | 97 |
| 6.1 | Randbedingungen der theoretischen Untersuchungen..... | 97 |
| 6.2 | Ergebnisse | 100 |
| 6.3 | Bewertung..... | 108 |
| 7 | Zusammenfassung | 111 |
| 8 | Ausblick | 113 |
| | Literaturverzeichnis | 115 |
| | Anhang | 123 |
| | Lebenslauf | 133 |

Abkürzungen und Formelzeichen

Abkürzungen

| | |
|-------------------------------|---|
| BTL | Biomass To Liquid |
| CFD | Computational Fluid Dynamics |
| C_6H_{14} | n-Hexan |
| C_7H_8 | Toluol |
| $C_{14}H_{30}$ | n-Tetradekan |
| $C_{12}H_{26}$ | n-Dodekan |
| $C_{16}H_{34}$ | n-Hexadekan |
| CO | Kohlenmonoxid |
| CO ₂ | Kohlenstoffdioxid |
| CTL | Coal To Liquid |
| DBU | Deutsche Bundesstiftung Umwelt |
| DI | Direct Injection |
| ETBE | Ethyl-Tertiär-Butyl Ester |
| ETW | Einhubtriebwerk |
| FAME | Fettsäuremethylester |
| GTL | Gas To Liquid |
| HC | Kohlenwasserstoffe |
| HCCI | Homogeneous Charge Compression Ignition |
| H ₂ O | Wasser |
| H ₂ O ₂ | Wasserstoffperoxid |
| HO ₂ • | Hydroperoxyradikal |
| HTO | High Temperature Oxidation |
| KW | Kurbelwinkel |
| L1 | Synthetischer Kraftstoff |

| | |
|----------------------|--|
| LTO | Low Temperature Oxidation |
| M | Stabilisierungsmolekül |
| MK-1VT | Multikomponenten-Verdampfungsmodell mit einer Verteilungsfunktion |
| MK-2VT | Multikomponenten-Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen |
| NO _x | Stickoxide |
| NTC | Negative Temperature Coefficient |
| O ₂ | molekularer Sauerstoff |
| OH [•] | Hydroxylradikal |
| OR'' O [•] | Peroxy-Brennstoffradikal |
| R [•] | Brennstoffradikal |
| RH | Brennstoffmolekül |
| RME | Rapsymethylester |
| R ' OOH [•] | Brennstoffrestradikal mit einem Karbonsäurerest |
| SMDS | Shell Middle Destilate Synthesis |
| STD | Standard-Verdampfungsmodell (Einzelkomponente) |
| ZOT | Oberer Totpunkt des Kolbens bei Zündung |

Arabische Formelzeichen

| | | |
|----------|---|-------------------|
| a_B | Korrelationsparameter (Siedetemperatur) | [K] |
| a_c | Korrelationsparameter (kritische Temperatur) | [K] |
| a_{cp} | Korrelationsparameter (Wärmekapazität) | [-] |
| a_h | Korrelationsparameter (Verdampfungsenthalpie) | [J/mol] |
| a_{KC} | Korrelationsparameter (Wärmeleitfähigkeit) | [W/mK] |
| a_{KT} | Korrelationsparameter (Wärmeleitfähigkeit) | [-] |
| a_v | Korrelationsparameter (kritisches Volumen) | [m ³] |
| A | Tropfenoberfläche | [m ²] |
| A | Hilfsvariable | [-] |

| | | |
|-----------------|--|-----------------------|
| b_B | Korrelationsparameter (Siedetemperatur) | [-] |
| b_c | Korrelationsparameter (kritische Temperatur) | [-] |
| b_{cp} | Korrelationsparameter (Wärmekapazität) | [-] |
| b_h | Korrelationsparameter (Verdampfungsenthalpie) | [-] |
| b_{KC} | Korrelationsparameter (Wärmeleitfähigkeit) | [-] |
| b_{KT} | Korrelationsparameter (Wärmeleitfähigkeit) | [-] |
| b_v | Korrelationsparameter (kritisches Volumen) | [-] |
| B | Transfer Zahl nach Spalding | [-] |
| B | Hilfsvariable | [-] |
| c | molare Dichte | [mol/m ³] |
| $c_{p,L}$ | Wärmekapazität der flüssigen Phase | [J/kgK] |
| c_p | Wärmekapazität des Brennstoffdampfes | [J/mol] |
| $\hat{C}_{p,L}$ | molare Wärmekapazität | [J/molK] |
| D | Tropfendurchmesser | [m] |
| \bar{D} | Diffusionskoeffizient | [m ² /s] |
| f | Fugazität | [Pa] |
| $f(I)$ | Verteilungsfunktion | [-] |
| $F(I)$ | Integral über Verteilungsfunktion $f(I)$ | [-] |
| $g(I)$ | Verteilungsfunktion | [-] |
| $G(I)$ | Integral über Verteilungsfunktion $g(I)$ | [-] |
| h_v | molare Verdampfungsenthalpie | [J/mol] |
| I | Verteilungsvariable, hier: Molgewicht | [g/mol] |
| m | Masse | [kg] |
| \dot{m} | Massenstrom | [kg/s] |
| M^n | Moment der Ordnung n einer Verteilungsfunktion | [-] |
| MW | Molgewicht | [g/mol] |

| | | |
|-----------|------------------------------|------------------------|
| \dot{n} | Molstromdichte | [mol/m ² s] |
| Nu | Nusselt-Zahl | [-] |
| p | Druck | [Pa] |
| p_v | Dampfdruck | [Pa] |
| Pr | Prandtl-Zahl | [-] |
| \dot{q} | Wärmestromdichte | [J/m ² s] |
| \dot{Q} | Wärmestrom | [J/s] |
| r | Radius | [m] |
| R | Radius | [m] |
| \bar{R} | universelle Gaskonstante | [J/molK] |
| Re | Reynolds-Zahl | [-] |
| s_v | Verdampfungsentropie | [J/kgK] |
| Sc | Schmidt-Zahl | [-] |
| Sh | Sherwood-Zahl | [-] |
| t | Zeit | [s] |
| T | Temperatur | [K] |
| v_{rel} | Relativgeschwindigkeit | [m/s] |
| V | Tropfenvolumen | [m ³] |
| y | Molanteil der Gasphase | [-] |
| Y | Massenanteil in der Gasphase | [-] |
| x | Molanteil der Flüssigphase | [-] |

Griechische Formelzeichen

| | | |
|----------|----------------------|-------|
| α | Verteilungsparameter | [-] |
| β | Verteilungsparameter | [-] |
| γ | Verteilungsparameter | [-] |
| Γ | Gamma Funktion | [-] |

| | | |
|------------|--|----------------------|
| Δ | Differenz | [-] |
| Θ | Mittelwert / erstes Moment | [g/mol] |
| λ | Luftverhältnis | [-] |
| λ | Wärmeleitfähigkeit des verdampften Brennstoffs | [W/mK] |
| μ | Chemisches Potenzial | [J/mol] |
| ξ | Molstromanteile | [-] |
| ρ | Dichte | [kg/m ³] |
| σ | Standardabweichung | [-] |
| σ^2 | Varianz | [-] |
| ν | Atomare Diffusionsvolumina | [-] |
| Φ_H | Hilfsvariable | [-] |
| Ψ | Zweites Moment | [-] |
| ϕ | Hilfsvariable | [-] |
| ∇ | Nabla-Operator | [-] |

Indices

| | |
|--------------|---------------------------------|
| θ | Ausgangszustand |
| <i>atm</i> | auf die Atmosphäre bezogen |
| <i>B</i> | auf die Siedetemperatur bezogen |
| <i>c, cr</i> | kritisch |
| <i>conv</i> | konvektiv |
| <i>C</i> | auf die Verbrennung bezogen |
| <i>d</i> | auf den Tropfen bezogen |
| <i>F</i> | auf den Kraftstoff bezogen |
| <i>g</i> | auf die Gasphase bezogen |
| <i>gas</i> | auf die Gasphase bezogen |
| <i>ges.</i> | Gesamtanteil |

| | |
|---------------|---|
| <i>Grenz</i> | Phasengrenzfläche |
| <i>h</i> | auf die Enthalpie bezogen |
| Θ | auf den Mittelwert / erstes Moment bezogen |
| <i>i</i> | Komponente i, Zählindex |
| <i>j</i> | Zählvariable |
| <i>L</i> | auf Flüssigkeit bezogen |
| <i>m</i> | gemittelt |
| <i>mass</i> | massenbasiert |
| <i>molar</i> | molarbasiert |
| <i>n</i> | Zählindex der Momente einer Verteilungsfunktion |
| <i>p</i> | auf den Druck bezogen |
| <i>rel</i> | relativ |
| <i>R</i> | Radius (auf die Tropfenoberfläche bezogen) |
| <i>s</i> | Oberfläche |
| <i>S</i> | auf den Einspritzstrahl bezogen |
| <i>System</i> | auf das System bezogen |
| <i>Tr</i> | Tropfen |
| <i>v</i> | dampfförmig |
| <i>v</i> | auf das Volumen bezogen |
| Ψ | auf das zweite Moment bezogen |
| ∞ | in unendlich großem Abstand |

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 CO₂-Ausstoß 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 Wärme-freisetzungsratesowie 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 (**Biomass To Liquid**) [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 (**Computational Fluid Dynamics**) 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 Dieselmotorischen Verbrennung 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 Voraussetzungen 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.

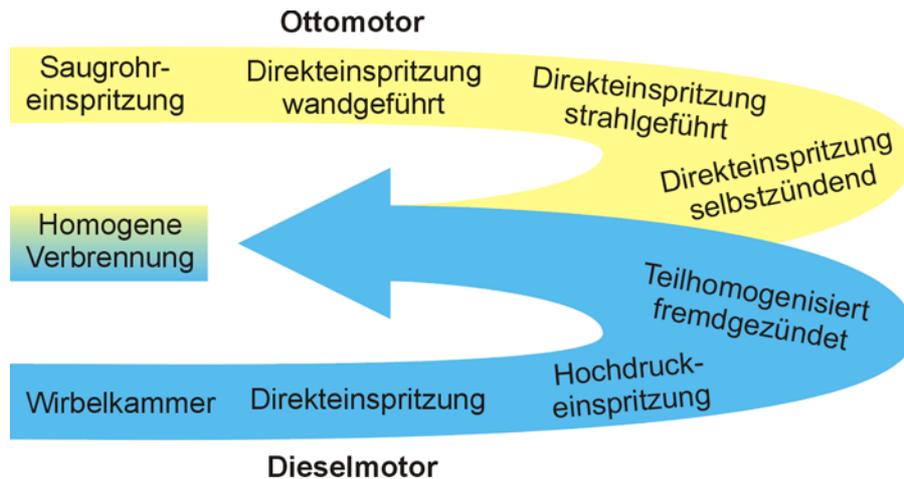


Bild 2.1: Wege zur homogenen Verbrennung [SKS01]

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.

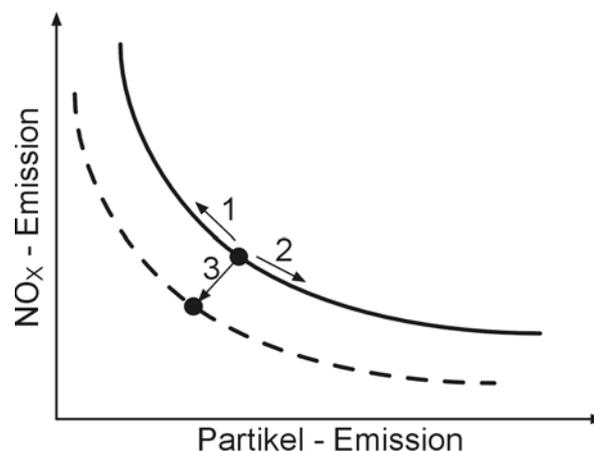


Bild 2.2: Partikel/NO_x Trade Off [MSS04]

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 Dieselerverbrennung dominanten Schadstoffkomponenten Stickoxide (NO_x) und Ruß vermieden. Im Gegensatz zur konventionellen Dieselerverbrennung 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.

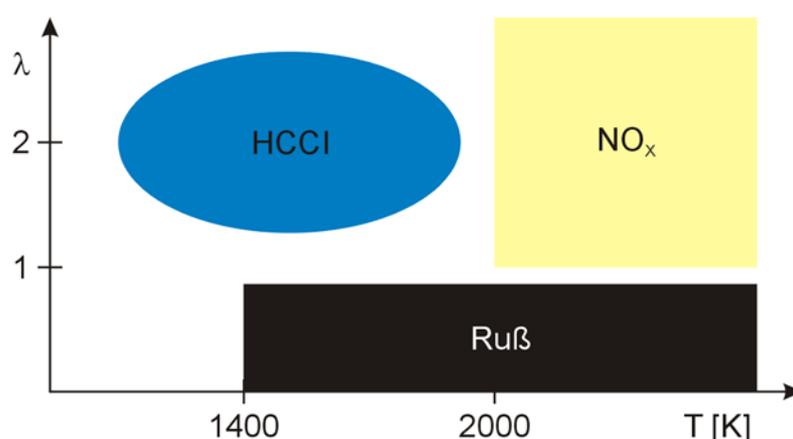


Bild 2.3: Vermeidung von Ruß und NO_x beim HCCI-Brennverfahren [MSS04]

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].

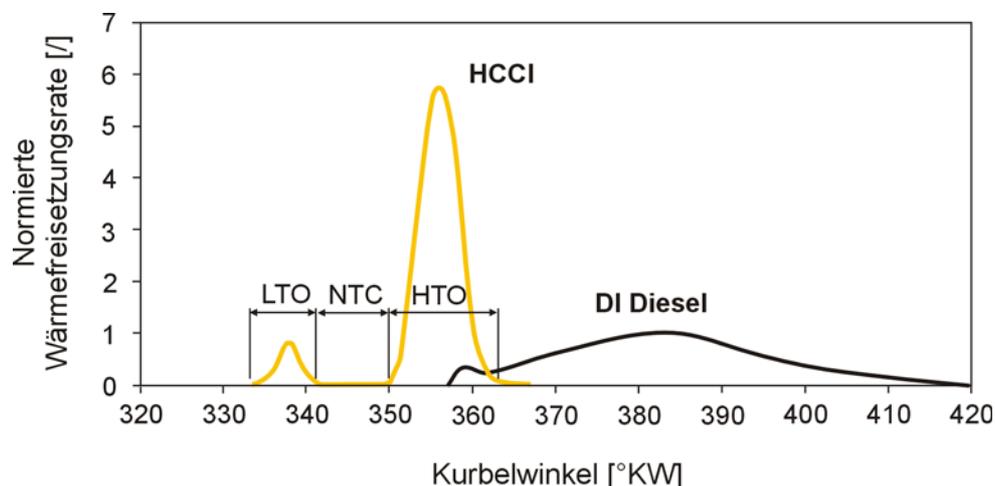


Bild 2.4: Zweistufige Zündung und Verbrennung beim HCCI-Verfahren

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 Dieselerbrennung 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 Dieselerbrennung 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 Dieselerbrennung 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 Dieselerbrennung 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.

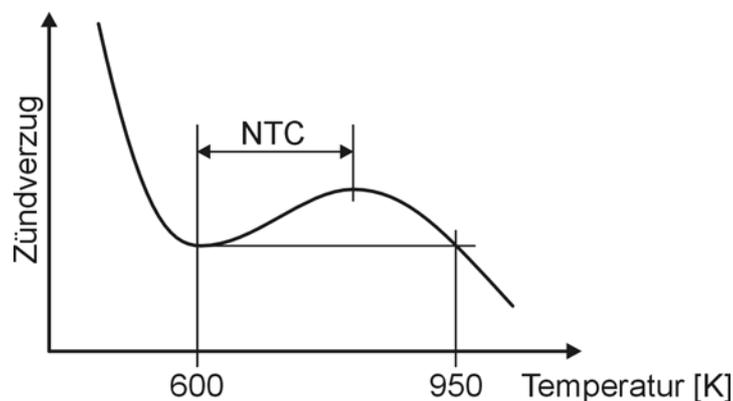


Abb. 2.5: Bereich des negativen Temperaturkoeffizienten (NTC) [Sti03]

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.



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



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)



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:



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



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

weiter zu Wasserstoffperoxid (H_2O_2) reagieren, welches sich zunächst inert verhält [GMü02].



Der nächste Reaktionsschritt findet erst dann statt, wenn die Aktivierungsenergie zur Zersetzung von Wasserstoffperoxid durch eine erneute Temperatursteigerung im Brennraum infolge weiterer Verdichtung überschritten wird. Bis zu dem Zeitpunkt hat sich eine große Menge H_2O_2 angesammelt. Bei Temperaturen oberhalb von ca. 1000 K kommt es schließlich zu einer sehr schnellen Zersetzungsreaktion (2.8) [WPL91], wodurch die zweite Zündstufe eingeleitet wird.



Erst mit dieser Zersetzung von Wasserstoffperoxid werden große Mengen OH^\bullet -Radikale produziert, welche die Zündung beschleunigen und zu einer hohen zweiten Wärmefreisetzung, der Hochtemperatur-Oxidation (Hauptverbrennung) führen.

Grundsätzlich ist zu erwähnen, dass die Reaktionen der Niedrigtemperatur-Oxidation im Vergleich zur Hochtemperatur-Oxidation langsamer ablaufen. Dieses führt dazu, dass die größte Wärmefreisetzung während der zweiten Zündstufe stattfindet. Der Niedrigtemperatur-Prozess hat jedoch durch seinen Startzeitpunkt und die in der ersten Zündstufe freigesetzte Wärmemenge einen erheblichen Einfluss auf den zeitlichen Verlauf der HTO-Reaktionen [Wes00].

Das beschriebene Reaktionsschema zur Zündung von Alkanen kann in guter Näherung für alle kettenförmigen Kohlenwasserstoffe angewendet werden. Jedoch ergeben sich im Ablauf der Verbrennung wesentliche Unterschiede für verschieden zusammengesetzte Kraftstoffe. Von entscheidender Bedeutung ist hierbei die Größe und Struktur der im Kraftstoff enthaltenen Moleküle [WLP91]. Anhand der Kraftstoffmoleküle n-Heptan (zündwillig) und iso-Oktan (zündunwillig) soll dieser Einfluss im Folgenden verdeutlicht werden. Zur Veranschaulichung sind in Bild 2.6 die Strukturformeln dieser beiden Moleküle dargestellt sowie die verschiedenen gebundenen Wasserstoffatome definiert. Die an das Kohlenstoffgerüst angelagerten Wasserstoffatome sind primäre, sekundäre und tertiäre H-Atome (Bild 2.6).

Die Bindungsenergie primärer H-Atome ist relativ hoch [WPL91], [SHK94]. Bei den sekundären Wasserstoffatomen ist die Bindungsenergie und damit auch die Aktivierungsenergie einer Wasserstoffabspaltung deutlich geringer.

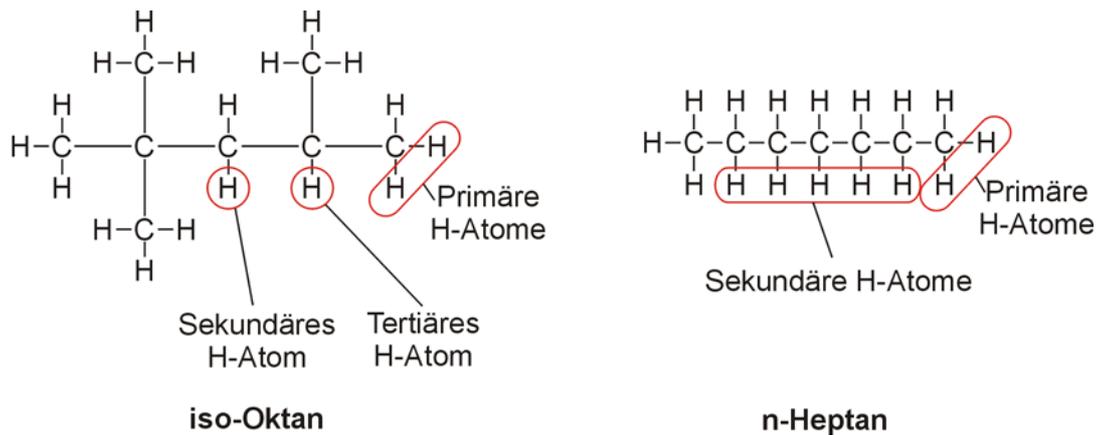


Abb. 2.6: Strukturformeln der Moleküle iso-Oktan und n-Heptan [Eck03]

Beim Vergleich der Molekülstrukturen der beiden Beispielmoleküle sieht man, dass n-Heptan deutlich mehr sekundäre Wasserstoffatome besitzt. Das iso-Oktan Molekül besitzt dagegen fast ausschließlich primäre H-Atome. Daher ist bei n-Heptan die Wahrscheinlichkeit, dass eine sekundäre Bindung aufbricht, erheblich größer als bei iso-Oktan und es ergibt sich somit für n-Heptan eine höhere Reaktivität bei der Bildung von Brennstoffradikalen durch Wasserstoffabspaltung, Gleichung (2.1). Die Reaktivität geradkettiger Kraftstoffmoleküle nimmt darüber hinaus mit steigender Kettenlänge zu, da die Anzahl der sekundären H-Atome mit zunehmender Moleküllänge steigt.

Zusammenfassend lässt sich somit feststellen, dass die Zusammensetzung von Kraftstoffen sowohl in Bezug auf die Bandbreite der Kohlenstoffkettenlängen als auch in Bezug auf die Struktur der enthaltenen Moleküle, einen maßgeblichen Einfluss auf das Zünd- und Verbrennungsverhalten hat.

2.1.2 Gemischbildung beim HCCI-Verfahren

Neben den entscheidenden Einflussgrößen Ladedruck, Ladelufttemperatur, Abgasrückführrate sowie Ventilsteuerzeiten, Verdichtungsverhältnis und Motordrehzahl zur Steuerung des homogenisierten Brennverfahrens, kommt der Gemischbildung eine besondere Bedeutung zu. Zielsetzung ist hierbei ein homogenes Kraftstoff/Luft-Gemisch vor dem Einsetzen der Selbstzündung im Brennraum zu erzeugen. Eine Übersicht über die weiteren oben genannten Einflussgrößen zur Steuerung der homogenen Verbrennung findet sich in [Bau05], [Pöt05].

In der motorischen Anwendung stehen zwei verschiedene Gemischbildungsverfahren zur Verfügung (Bild 2.7), wobei man zwischen innerer und äußerer Gemischbildung unterscheidet. Bei der inneren Gemischbildung handelt es sich um eine direkte Einspritzung des Kraftstoffs in den Brennraum, die äußere Gemischbildung erfolgt durch Einspritzen des Kraftstoffs in den Luft-Einlasskanal.

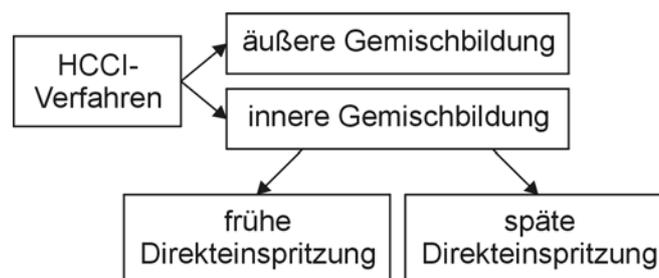


Bild 2.7: Gemischbildungskonzepte für das HCCI-Verfahren [MGR01]

Die äußere Gemischbildung eignet sich besonders für flüssige leichtsiedende oder gasförmige Kraftstoffe. Für den Einsatz von schwersiedendem Dieseldieselkraftstoff ist dieses Gemischbildungsverfahren ungeeignet. Es kann aufgrund der schlechteren Verdampfungseigenschaften während der Einspritzung zu Wandauftrag im Einlasskanal und am Einlassventil und somit zu höheren HC- und CO-Emissionen, einem höheren Kraftstoffverbrauch sowie einer Ölverdünnung kommen.

Die inneren Gemischbildungsverfahren können in zwei verschiedene Ansätze, die frühe und die späte Homogenisierung, unterteilt werden. Die frühe Homogenisierung eignet sich besonders für den Einsatz beim HCCI-Verfahren und ist auch die am häufigsten eingesetzte Methode [Bau05]. Deshalb wird dieser Ansatz im Folgenden detailliert beschrieben. Für weitergehende Betrachtungen zur späten Homogenisierung sei an dieser Stelle auf [KAS04] und [KKH00] verwiesen.

Bei der frühen Homogenisierung wird die gesamte Einspritzmenge vor dem oberen Totpunkt in den Brennraum eingebracht. Wird der Kraftstoff bereits in einer frühen Phase des Kompressionstaktes eingespritzt, so hat das im Brennraum befindliche Gas eine geringe Dichte und Temperatur. Hinzu kommt die geringe Flüchtigkeit von Dieselmotorkraftstoff oder dieselähnlichen Kraftstoffen bei niedrigen Temperaturen. In der Auswahl und Auslegung eines geeigneten Einspritzsystems und dem entsprechenden Einspritzverlauf ist daher besonders darauf zu achten, dass ein Wandauftrag durch zu weit in den Brennraum eindringende Einspritzstrahlen vermieden und eine optimale Homogenisierung des Kraftstoff/Luft-Gemisches erreicht wird. Diese Randbedingungen erfordern den Einsatz von Einspritzsystemen mit hochflexiblen Düsenöffnungs- und Schließzeiten sowie speziell auf das HCCI-Verfahren abgestimmte Einspritzverläufe und Einspritzdüsen. In bisherigen Arbeiten wurden bereits intensive Anstrengungen unternommen, entsprechende Injektoren zu entwickeln [DGM03], [GWA02], [Sch03], [Pöt05]. Als Lösung für diese Problemstellung bietet sich die Hochdruckeinspritzung unter Verwendung von Einspritzdüsen mit einer großen Anzahl von Düsenlöchern an. Aufgrund des hohen Einspritzdrucks ist eine bessere Zerstäubung des Kraftstoffes möglich. Mit der großen Anzahl von Einspritzlöchern können weite Bereiche des Brennraumes erfasst werden. Eine zusätzliche Möglichkeit die Eindringtiefe der Einspritzstrahlen zu reduzieren, bietet sich in der gepulsten Einspritzung.

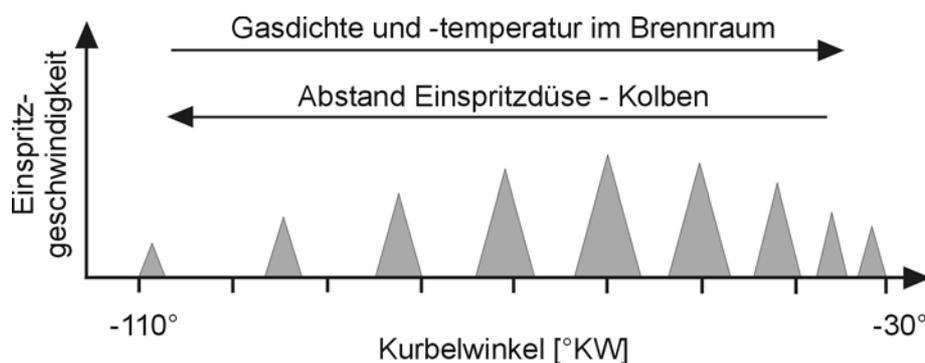


Bild 2.8: 9-Puls-Einspritzstrategie bei früher Homogenisierung [Pöt05]

Hierbei wird die Gesamteinspritzmenge in mehrere Einzelpulse mit unterschiedlichen Teileinspritzmengen zerlegt. Bild 2.8 veranschaulicht dieses Vorgehen anhand einer 9-Puls-Einspritzstrategie [Pöt05]. Die Fläche unter den Dreieckspulsen kennzeichnet die jeweils eingespritzte Masse. Bei niedriger Brennraumdicke und -temperatur werden nur geringe Mengen Kraftstoff eingespritzt. Diese kleinen Teileinspritz-

mengen haben einen geringeren Geschwindigkeitsimpuls und dringen daher weniger weit in den Brennraum ein. So kann ein Auftrag von Kraftstoff auf die Brennraumwände vermieden werden. Mit zunehmender Temperatur und Dichte kann im Verlauf der Einspritzung auch die Masse der Einzelpulse erhöht werden. Nähert sich jedoch der Kolben zum Ende der Kompressionsphase dem oberen Totpunkt, müssen die Massen der Einspritzpulse wieder reduziert werden, um einen Kraftstoffauftrag auf den Kolben zu vermeiden.

Das Konzept der frühen Homogenisierung bei innerer Gemischbildung im HCCI-Verfahren erfordert darüber hinaus eine Anpassung der Strahlagenwinkel der verwendeten Einspritzdüse. Im Vergleich zum konventionellen Dieselmotorenverfahren, bei dem die Kraftstoffeinspritzung kurz vor dem oberen Totpunkt erfolgt, befindet sich zu Beginn der Einspritzung zwischen Kolben und Einspritzdüse hier deutlich mehr Volumen. Dieser Unterschied ist in Bild 2.9 (linke Seite: HCCI-Verfahren, rechte Bildhälfte: konventionelle Dieseleinspritzung) dargestellt.

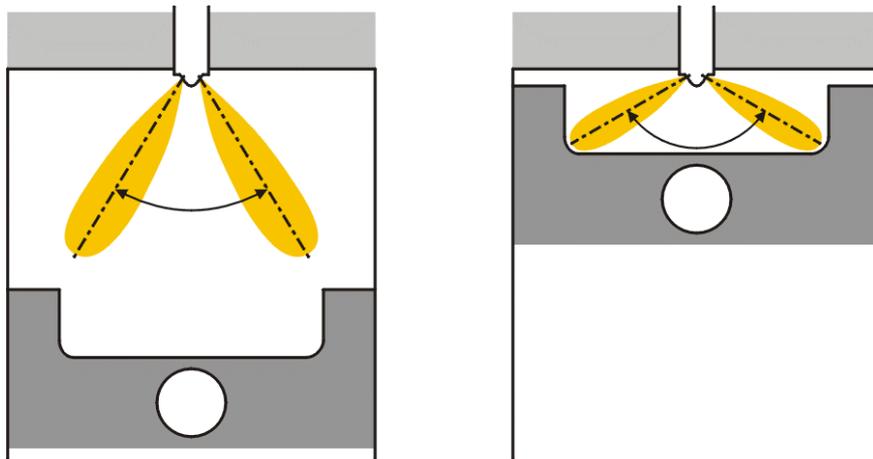


Bild 2.9: Anpassung des Strahlagenwinkels bei früher Einspritzung

Um bei der frühen Homogenisierung eine zufriedenstellende Vermischung des Kraftstoffs mit der Luft zu erreichen und einen Kraftstoffwandauftrag zu verhindern, muss der Winkel zwischen den Mittelachsen der Einspritzstrahlen verringert werden. Die Einspritzstrahlen zeigen dadurch steiler in Richtung Kolben und durchdringen das bei früher Einspritzung vorhandene größere Zylindervolumen deutlich besser.

Als Beispiel einer für das HCCI-Verfahren entworfenen Einspritzdüse ist in Bild 2.10 eine 13-Loch Minisacklochdüse mit drei unterschiedlichen Strahllagen [Pöt05] abgebildet.

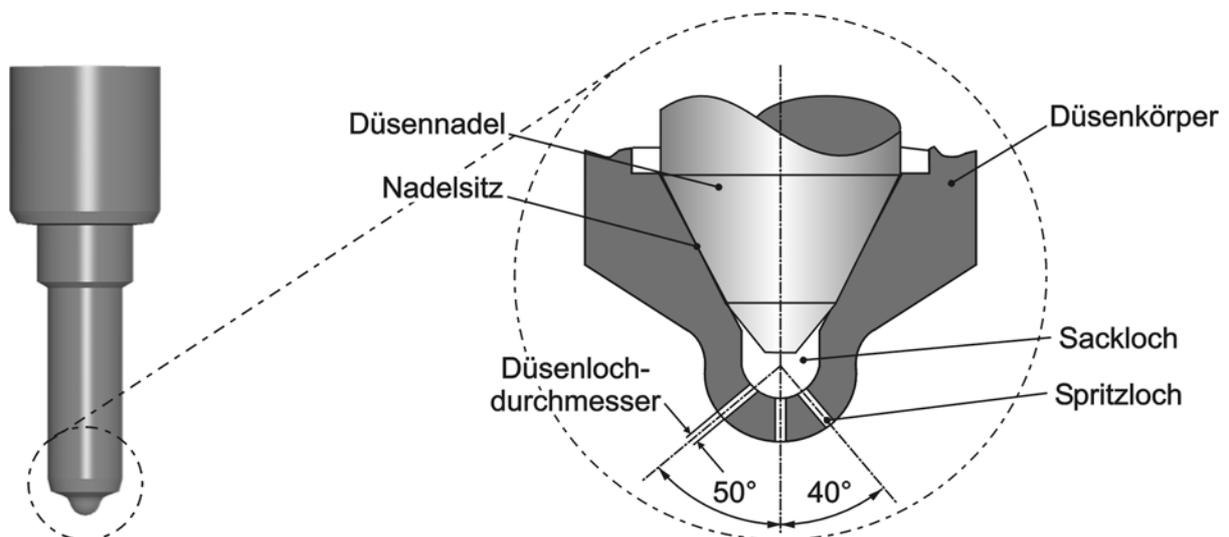


Bild 2.10: Düsengeometrie einer 13-Loch-Einspritzdüse

Diese Düse besitzt ein zentral angeordnetes Düsenloch mit einem Durchmesser von 0,1 mm. Alle weiteren Löcher sind mit einem Durchmesser von 0,12 mm gefertigt und verteilen sich auf zwei weitere Spraylagen, wobei sich jeweils sechs Löcher auf einem Höhenwinkel von 40° bzw. 50° befinden. In der Draufsicht auf die Düsenkuppe sind diese Löcher gleichzeitig um 30° zu den Löchern mit dem Höhenwinkel von 40° versetzt. Eine Mehrpuls-Einspritzstrategie, siehe Bild 2.8, kann unter Verwendung eines hochflexiblen Einspritzsystems, wie es am Institut für Technische Verbrennung der Universität Hannover entwickelt wurde [MKK02], umgesetzt werden. In Kombination mit einer für das HCCI-Verfahren ausgelegten oben beschriebenen Vielloch-Einspritzdüse sind somit die notwendigen Randbedingungen geschaffen, um die Gemischbildung bei früher Homogenisierung optimal auf das homogenisierte Brennverfahren abzustimmen.

Die innerhalb dieses Abschnitts beschriebene Einspritzstrategie (Bild 2.8), unter Verwendung der in Bild 2.10 dargestellten Einspritzdüse, bildet die Basis für die in Kapitel 6 durchgeführten CFD-Simulationen hinsichtlich des Verdampfungs- und Homogenisierungsverhaltens verschiedener Kraftstoffe.

2.2 Alternative Kraftstoffstrategien für zukünftige motorische Anwendungen

Der Verbrauch fossiler Kraftstoffe muss als Antwort auf die weltweit steigende Nachfrage, sowie aufgrund der Tatsache, dass die verfügbaren Erdölvorkommen begrenzt sind, verringert werden. Einen weiteren Grund für eine Reduzierung des Verbrauchs liefert die Klimarelevanz fossiler Kraftstoffe. Die Entwicklung alternativer Kraftstoffstrategien für zukünftige motorische Anwendungen ist daher für die Sicherung von Mobilität durch Verbrennungsmotoren von wesentlicher Bedeutung. Mit der Entwicklung von Strategien für alternative Kraftstoffe werden im Wesentlichen folgende Ziele verfolgt:

- Absenken des Verbrauchs fossiler Kraftstoffe und damit Verringerung der Abhängigkeit vom Öl.
- Vermindern des Ausstoßes des Treibhausgases CO₂ aus dem Verkehrsbereich.
- Weitere Reduzierung der Schadstoffemissionen moderner Motoren.

Zu den bekanntesten alternativen Kraftstoffstrategien zählen im wesentlichen Erdgas bzw. Autogas/Flüssiggas sowie Biodiesel, welche neben den konventionellen Otto- und Dieselmotoren im motorischen Bereich eingesetzt werden.

Erdgas (überwiegend Methan) und Autogas/Flüssiggas (Propan/Butan-Gemisch) können direkt als Kraftstoff eingesetzt werden. Erdgas ist aufgrund seiner hohen Oktanzahl für entsprechend modifizierte Ottomotoren geeignet. Die Vorteile von Erdgas im Vergleich zu den herkömmlichen Otto- und Dieselmotoren liegen in den besonders geringen Stickoxid- und Partikelemissionen sowie im geringeren Kraftstoffverbrauch. **Biodiesel** wird aus Fetten (Fettsäuremethylester, FAME) oder aus Ölpflanzen (Raps, Sonnenblumen; Rapsmethylester, RME) unter Zugabe von Methanol gewonnen. Die Verwendung von **Pflanzenöl in reiner Form** als Kraftstoff beschränkt sich auf den Einsatz von Rapsöl. **Bioethanol** wird über die biotechnologische Vergärung zuckerhaltiger Rohstoffe gewonnen. **ETBE** (Ethyl-Tertiär-Butyl-Ester), eine chemische Verbindung aus regenerativem Ethanol und fossilem Isobutylen, wird nicht als Reinstoff, sondern als Beimischung von bis zu 15% dem Ottokraftstoff zugegeben. **Biogas** ist ein Stoffwechselprodukt von Methanbakterien, das beim Abbau organischer Stoffe, wie Biomasse oder organischen Abfällen entsteht. Nach einer Reinigung erhält Biogas die Qualität von Erdgas und kann in erdgasbetriebenen Fahrzeugen verwendet werden.

Die größte marktrelevante Bedeutung bei den Biokraftstoffen hat als Reinkraftstoff nur Biodiesel, siehe Tabelle 2.1. Zu erwähnen ist, dass seit dem 1. Januar 2004 neben Biodiesel als Reinkraftstoff auch Mischungsanteile von Biokraftstoffen (Biodiesel, Bioethanol, ETBE) in fossilen Kraftstoffen, von der Mineralölsteuer ausgenommen sind. Seitdem werden in Deutschland fossilem Dieselkraftstoff bis zu 5% Biodiesel beigemischt, wobei dieser Anteil dem gesetzlichen Grenzwert entspricht [Bun04]. Tabelle 2.1 zeigt darüber hinaus die deutlich geringeren Verbrauchsanteile von Erdgas bzw. Autogas/Flüssiggas im Vergleich zu Biodiesel. Die übrigen biogenen Kraftstoffe spielen in dieser Betrachtung keine Rolle.

| Kraftstoffe | Verbrauch [1000 T] | Anteil am Gesamt- verbrauch [%] |
|--------------------------------------|-----------------------|---------------------------------------|
| Dieseldkraftstoff | 27600 | 51,5 |
| Ottokraftstoff | 25840 | 48,22 |
| Autogas/Flüssiggas | 113 | 0,2 |
| Erdgas | 47 | 0,08 |
| darunter biogene Kraftstoffe: | | |
| Biodiesel | 800 | 1,4 |
| reines Rapsöl | 5 | 0 |
| ETBE | 0 | 0 |
| Bioethanol | 0 | 0 |
| Biogas | 0 | 0 |
| | | |
| Gesamtverbrauch | 53600 | |

Tabelle 2.1: Verbrauch von Kraftstoffen in Deutschland im Jahr 2003 [Bun04]

Über die bisherigen Ansätze hinaus, gibt es weitere Neuentwicklungen alternativer Kraftstoffstrategien. In diesem Zusammenhang sind besonders **synthetische Kraftstoffe** zu nennen, welche aus Synthesegas mittels der Fischer-Tropsch-Synthese hergestellt werden. Das Synthesegas kann wiederum aus fossiler Kohle (Coal To Liquid, CTL), aus Erdgas (Gas To Liquid, GTL) oder aber auch aus Biomasse (Biomass To Liquid, BTL) erzeugt werden.

Des Weiteren gibt es den Ansatz **Bioethanol** aus den Rohstoffen Holz, Stroh oder anderen cellulosehaltigen Pflanzen herzustellen. Hier wurden erst in letzter Zeit Verfahren entwickelt, wie diese „Holzverzuckerung“ umgesetzt werden kann [Sch04]. Somit kann die Rohstoffbasis Biomasse zur Erzeugung von Bioethanol deutlich vergrößert werden. **Wasserstoff** kann grundsätzlich mit Hilfe verschiedenster Energieformen (regenerativer, nuklearer oder fossiler Energie) hergestellt werden.

Einsetzbar ist Wasserstoff sowohl im Verbrennungsmotor als auch in der Brennstoffzelle. Bei der Herstellung von Wasserstoff mittels regenerativer Energie sowie bei der anschließenden Umsetzung des Wasserstoffs im Fahrzeug, ist zu betonen, dass keine CO₂-Emissionen entstehen.

In den weiteren Betrachtungen wird der Schwerpunkt auf den synthetischen Brennstoffen, im besonderen den GTL- und BTL-Kraftstoffe liegen. Für diese Kraftstoffe haben sich die Begriffe „SunFuel“ (BTL-Kraftstoff) sowie „SynFuel“ für GTL-Kraftstoff durchgesetzt [Bar03]. Diesen, in der Entwicklung befindlichen Strategien, wird aufgrund der im Folgenden aufgeführten Aspekte ein hohes Potenzial zugeschrieben.

- Zur Herstellung von GTL-Kraftstoff kann das bei der Förderung von Erdöl in großen Mengen auftretende Begleitgas (Erdgas) verwendet werden. Bisher wurde dieses Begleitgas ungenutzt abgefackelt.
- Ausgangsstoff für die Herstellung von BTL-Kraftstoffen ist Synthesegas, welches grundsätzlich aus jeder Art von Biomasse gewonnen werden kann.
- Die Kraftstoffe zeichnen sich dadurch aus, dass sie fast vollständig aromaten- und schwefelfrei sind. Sie bestehen aus reinen Alkan-Gemischen und besitzen hohe Cetanzahlen im Bereich zwischen 60 - 70.
- Vorteil des BTL-Kraftstoffs gegenüber dem GTL-Ansatz ist die ausgeglichene CO₂-Bilanz durch die Verwendung von Biomasse als Rohstoff.
- Beide Kraftstoffe sind als Beimischungen zu konventionellem Dieselkraftstoff jedoch auch als Reinkraftstoff in modernen Dieselmotoren direkt einsetzbar.

Das Verfahren der Fischer-Tropsch-Synthese wird heute von allen Mineralölkonzernen verwendet [Bar03]. Hervorzuheben ist hierbei die Firma Shell AG, welche in Bintulu, Malaysia bereits die erste großindustriell genutzte Anlage zur Herstellung von GTL-Kraftstoff aus Erdgas [CLL04] betreibt.

Die Prozesse zur Herstellung synthetischer Kraftstoffe aus Biomasse wurden erst in den letzten Jahren entscheidend weiterentwickelt und ermöglichen heute eine stabile Prozesskette zur Produktion von BTL-Kraftstoff aus Biomasse [Bar03]. In diesem Zusammenhang hat sich besonders die Firma Choren Industries GmbH hervorgetan [Bar03], [Bar04]. Im Jahr 2003 wurde in Freiberg, Sachsen eine erste Pilotanlage zur Herstellung von synthetischem BTL-Kraftstoff in Betrieb genommen [Cho03]. Bei beiden Herstellverfahren, dem GTL- und dem BTL-Verfahren, ist die Fischer-Tropsch-Synthese wesentlicher Bestandteil der Prozesskette. In diesem Prozessabschnitt wird das vorher durch Erdgas oder Biomasse gewonnene Synthesegas in

Kraftstoff umgewandelt. Für eine nähere Beschreibung der Herstellverfahren sei auf [Bar03], [CCM03], [Mot03], [Bar04] und [CLL04] verwiesen.

Die Zusammensetzung der Syntheseprodukte kann durch die Wahl der Prozessparameter gezielt beeinflusst werden [Rud04]. Es besteht somit die Möglichkeit, bereits bei der Herstellung der synthetischen Kraftstoffe über die Zusammensetzung, deren Eigenschaften, wie z.B. das Siedeverhalten, gezielt bestimmen zu können. So sind leichtflüchtige Kraftstoffe, aber auch dem Dieseldieselkraftstoff ähnliche schwerere flüchtige Kraftstoffe, herstellbar. In Tabelle 2.2 sind neben Dieseldieselkraftstoff zwei synthetische Kraftstoffe mit diesen unterschiedlichen Eigenschaften aufgeführt.

| | Diesel | SMDS | L1 |
|-------------------|---------------|-------------|-----------|
| Bandbreite | C6-C28 | C10-C25 | C8-C12 |
| Alkane | 73% | >99% | >99% |
| Aromaten | 27% | <0,5% | <0,5% |
| Cetan-Zahl | 53 | 73 | 63 |

Tabelle 2.2: Zusammensetzung von Dieseldieselkraftstoff [DGM02], SMDS [Koh03] und L1 [SSK04]

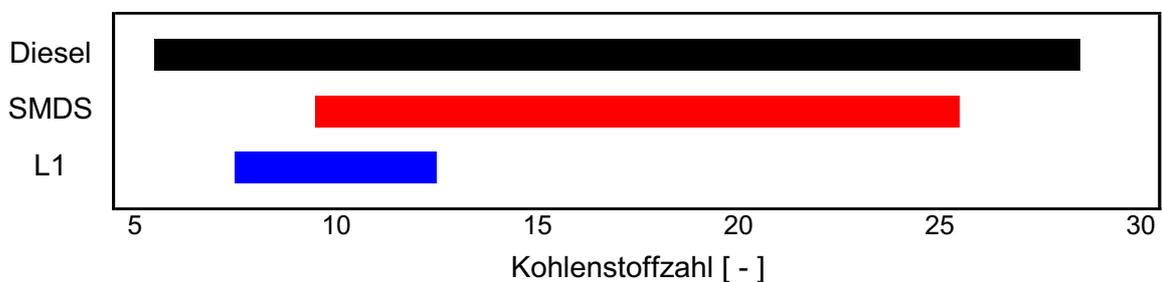


Bild 2.11: Bandbreite von Dieseldieselkraftstoff [DGM02], SMDS [Koh03] und L1 [SSK04]

SMDS (Shell Middle Destilate Synthesis) ist ein breitbandiger schwersiedender Kraftstoff mit einer hohen Cetan-Zahl. Der Kraftstoff L1 hat dagegen eine sehr schmale Bandbreite und enthält leichtflüchtige Bestandteile. In Bild 2.11 sind die unterschiedlichen Bandbreiten der synthetischen Brennstoffe im Vergleich zu konventionellem Dieseldieselkraftstoff nochmals anschaulich dargestellt. Anhand der Siedelinien (Bild 2.12) für Dieseldieselkraftstoff, SMDS und L1 sind die sich aus den verschiedenen Bandbreiten ergebenden unterschiedlichen Siedeeigenschaften zu erkennen.

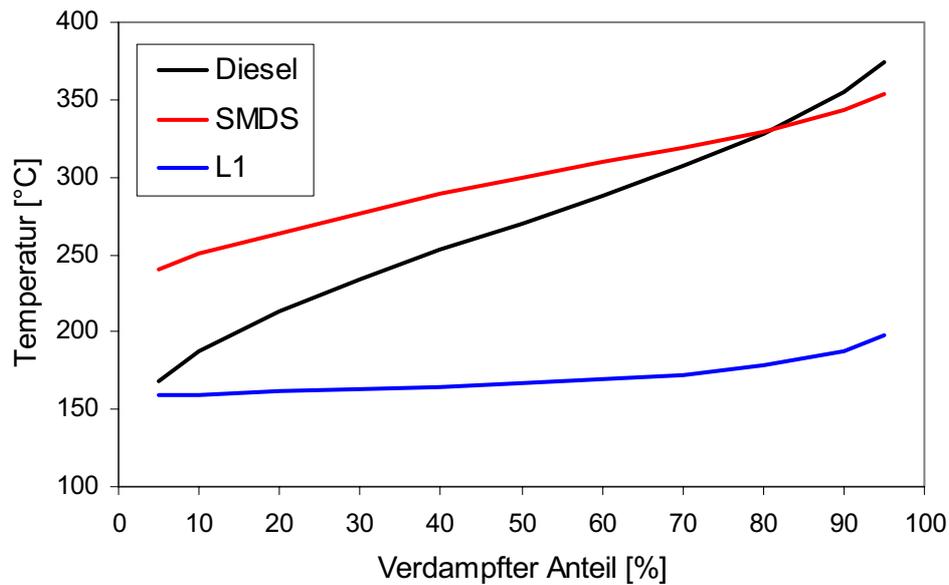


Bild 2.12: Siedelinien von Dieselkraftstoff [DGM02], SMDS und L1 [Koh03]

Im Rahmen bisheriger umfangreicher Untersuchungen, sowohl an Prüfständen als auch bei motorischen Erprobungen, haben synthetische Kraftstoffe ihr Potenzial zur Reduzierung des Schadstoffausstoßes schon bewiesen [FHM03], [SWL03], [SSK04]. Im Vergleich zu konventionellem Dieselkraftstoff wurden bis zu 50% geringere Partikelemissionen und 20% niedrigere NO_x -Emissionen gemessen [SWL03].

In Verbindung mit der Entwicklung moderner Brennverfahren, wie z.B. der homogenisierten dieselmotorischen Verbrennung, kommen den Kraftstoffeigenschaften und -zusammensetzungen immer mehr Bedeutung zu. So besteht die Möglichkeit, bereits im Herstellprozess über gezielte Veränderungen in der Zusammensetzung das Verdampfungs- und Zündverhalten synthetischer Kraftstoffe dahingehend zu beeinflussen, dass bei der motorischen Anwendung ein optimales Zusammenspiel von Kraftstoff, Brennverfahren und Einsatzbedingungen erreicht wird. Zusätzlich zur Schadstoffreduzierung infolge der Verbrennungsoptimierung kann der Ausstoß von Schadstoffen durch die veränderten Kraftstoffbestandteile vermieden bzw. reduziert werden, da schadstoffrelevante Komponenten, wie aromatische Kohlenwasserstoffe nicht bzw. nur in geringen Mengen enthalten sind und daher während der Verbrennung bestimmte Schadstoffgruppen erst gar nicht entstehen.

2.3 Modelle zur Abbildung von Kraftstoffgemischen

Eine möglichst genaue Modellierung der Kraftstoffeigenschaften in dreidimensionalen CFD-Codes ist eine Voraussetzung dafür, die innermotorischen Prozesse Verdampfung, Gemischbildung sowie Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung berechnen zu können. Das grundlegende Problem bei der theoretischen Betrachtung von realen Kraftstoffen ist die Auswahl entsprechender Vergleichsbrennstoffe. Diese müssen die unterschiedlichen Eigenschaften der zu untersuchenden Brennstoffe ausreichend genau wiedergeben. Die Abbildung realer Kraftstoffe durch Einzelkomponenten-Ersatzkraftstoffe gilt in der heutigen Zeit immer noch als Standardverfahren. So wird für Dieselkraftstoff z.B. Tetradekan verwendet. Zur Abbildung von Kraftstoffgemischen, bestehend aus mehreren Komponenten, gibt es jedoch bereits verschiedene Modelle, die im Folgenden beschrieben werden.

Um die Verdampfungseigenschaften eines fossilen Mehrkomponenten-Kraftstoffes zu berücksichtigen, verwendet Kneer [Kne93] ein Zwei-Komponenten-Gemisch, welches aus Heptan und Dodekan bzw. aus Hexan und Tetradekan besteht.

Klingsporn [Kli95] erweitert den Ansatz von Kneer [Kne93], um realen Dieselkraftstoff abzubilden und somit den Anteil aromatischer Komponenten zusätzlich zu berücksichtigen. Dabei wird ein Zwei-Komponenten-Gemisch aus n-Dekan und α -Methylnaphtalin untersucht, bei dem eine Komponente die physikalischen Eigenschaften, die andere Komponente die chemischen Eigenschaften realen Dieselkraftstoffs wiedergibt.

Jin und Borman [JBo85] haben ein Verdampfungsmodell entwickelt, mit welchem ein n-Alkan-Gemisch aus Pentan und Oktan im Mischungsverhältnis von 50:50 untersucht wird. In [Agg87] wird mit diesem Modell darüber hinaus ein Gemisch aus 50% Hexan und 50% Dekan betrachtet.

Ayoub und Reitz [ARe95] wenden das Modell aus [JBo85] an, um die Verdampfung und Zündung in Dieselmotoren zu berechnen. Dafür wurde das Modell in den CFD-Code KIVA-II [AOB89] implementiert und mit verschiedenen n-Alkan-Gemischen bestehend aus Dekan, Dodekan, Tetradekan sowie Hexadekan verifiziert.

Bei den Standard-Einzelkomponenten-Ersatzkraftstoffen und den vorgestellten Zwei-Komponenten-Modellen ist der Modellierungsaufwand überschaubar und die erforderliche Theorie bereits hinreichend bekannt. Diese Ersatzkraftstoffe können die tatsächlichen Eigenschaften realer Brennstoffe jedoch nur in ausgewählten Punkten zutreffend abbilden (z.B. Dichte, Heizwert). In vielen Fällen können bestimmte Kraft-

stoffeigenschaften, wie z.B. der Siedebereich, die Struktur enthaltener Komponenten oder während der Verdampfung auftretende Entmischungsvorgänge im Kraftstoff gar nicht abgebildet werden.

Rosseele und Sierens [RSi95] haben ein Modell entwickelt, bei dem der abzubildende Dieselmotorkraftstoff mittels zehn diskreter Komponenten abgebildet wird. Das Gemisch setzt sich dabei aus n-Alkanen und polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen zusammen. Die Bandbreite umschließt Kohlenwasserstoffe im Bereich der Kohlenstoffzahlen C_{10} bis C_{20} .

Prinzipiell sind komplexe reale Kraftstoffe als Vielstoffgemische mit einer Anzahl von x -Spezies durch eine diskrete Modellierung der einzelnen enthaltenen Komponenten darstellbar. Es entsteht dadurch jedoch einmalig ein erheblicher Programmieraufwand, da für jede zusätzliche Spezies eine weitere Gleichung für den Massetransport zu implementieren und zu lösen ist. Zudem steigt die erforderliche Rechenzeit für ein derartiges diskretes Modell drastisch an. Es ist jedoch fraglich, ob die genaue Wiedergabe des Kraftstoffs diesen Anstieg rechtfertigt.

Eine weitere Möglichkeit zur Beschreibung der Zusammensetzung von Gemischen mit einer Vielzahl von Komponenten und ihres Verdampfungsprozesses stellt der Ansatz der Thermodynamik kontinuierlicher Gemische dar. Dieser besagt, dass Gemische nicht mehr als die Summe diskreter Einzelkomponenten abgebildet werden, sondern vielmehr das Gemisch im Ganzen mittels Verteilungsfunktion (Bild 2.13) dargestellt wird. Grundsätzlich kann so der steigende Modellierungsaufwand, der jedoch von der Anzahl der verwendeten Verteilungsfunktionen abhängig ist, umgangen werden.

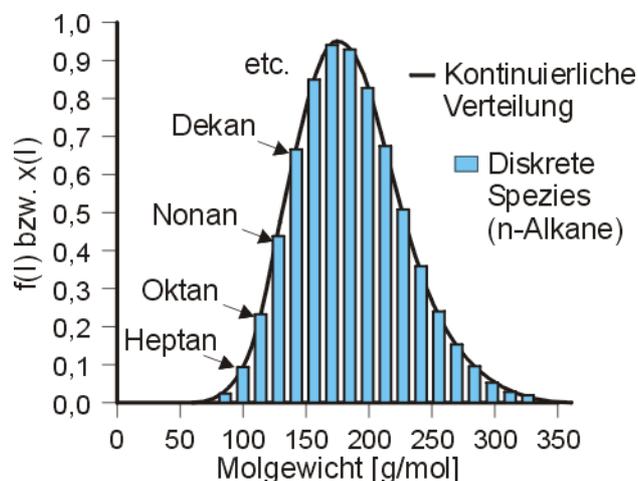


Bild 2.13: Kontinuierliche und diskrete Darstellung eines Alkangemisches

Der Vorteil der kontinuierlichen Thermodynamik liegt in der vereinfachten Behandlung der Gemische. Während bei herkömmlichen diskreten Gemischen zum Beispiel das Gleichgewicht an der Phasengrenzfläche für jede einzelne Spezies separat gelöst werden muss, genügt in der kontinuierlichen Thermodynamik eine Gleichung, da diese ein Kontinuum innerhalb des Gemisches beschreibt. Der Modellierungsaufwand ist zwar beim kontinuierlichen Ansatz größer, da zur Beschreibung der Verteilungsfunktion zwei zusätzliche Gleichungen für Mittelwert und Varianz gelöst werden müssen. Dieser zusätzliche Aufwand relativiert sich jedoch mit steigender Anzahl der Komponenten.

Die Thermodynamik kontinuierlicher Gemische hat ihre Wurzeln in den 30er Jahren [KBr33], wurde aber erst in den letzten 20 Jahren entscheidend weiterentwickelt. In den Arbeiten von Cotterman et al. [CBP85] aus dem Jahre 1985 findet man einen der ersten Ansätze zur Anwendung der kontinuierlichen Thermodynamik.

Im Allgemeinen bildet eine Verteilungsfunktion ein Gemisch aus Komponenten einer homologen Gruppe ab, wobei dieses besonders bei der Betrachtung der Eigenschaften eines bestimmten Gemisches von Bedeutung ist. Im Bereich der Kohlenwasserstoffverbindungen stellen z.B. Alkane und Aromaten homologe Komponenten-Gruppen dar. Grundsätzlich ist dieser Ansatz aber nicht auf die Abbildung homologer Gruppen beschränkt.

Die Verteilungsfunktion charakterisiert eine makroskopische Eigenschaft der im abgebildeten Gemisch enthaltenen Komponenten, wie zum Beispiel Molmasse, Siedetemperatur, Anzahl der Kohlenstoffatome und Grad der Aromatizität. Welche Eigenschaft des Gemisches als Verteilungsvariable zum Einsatz kommt, hängt im Wesentlichen von der Zielsetzung und von den vorhandenen Daten und Korrelationen zur Abbildung der Gemischeigenschaften ab. Wie bereits in den Arbeiten von Tamim und Hallett [THa95], Lippert und Reitz [LRe97] sowie von Reitz und Zhu [ZRX01] wird auch in der vorliegenden Arbeit die Molmasse als Distributionsvariable verwendet. Neben der Verteilungsvariablen spielt auch die Art der Verteilungsfunktion bei der Beschreibung von kontinuierlichen Gemischen eine wesentliche Rolle. Entscheidende Randbedingungen sind hierbei eine treffende Abbildung der zu untersuchenden Brennstoffgemische sowie eine nach Möglichkeit einfache mathematische Handhabung. Es sind in diesem Zusammenhang die Gaußverteilung, die Beta-Verteilung aber auch die Gamma-Verteilung, siehe Gleichung (2.9), bekannt. Letztere, auch als Pearson Type III Verteilung [Pap84] bezeichnet, ist vor allem im Zusammenhang mit der Abbildung von Kohlenwasserstoffverbindungen bekannt geworden [CBP85], [THa95] und wird im weiteren Verlauf verwendet.

$$f(I) = \frac{(I-\gamma)^{\alpha-1}}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} \exp\left(-\frac{(I-\gamma)}{\beta}\right) \quad (2.9)$$

Die Variablen α und β stellen hierbei Formparameter dar, welche das Aussehen der Funktion beschreiben. Mit dem Parameter γ wird die Verschiebung der Verteilungsfunktion zum Ursprung bestimmt. Als Verteilungsvariable kommt, wie bereits erwähnt, die Molmasse zum Einsatz und ist durch die Variable I in der Funktion enthalten. $\Gamma(\alpha)$ ist die Eulersche Gammafunktion, welche durch das folgende uneigentliche Integral beschrieben wird:

$$\Gamma(\alpha) = \int e^{-t} t^{\alpha-1} dt, \quad \text{mit } \alpha > 0. \quad (2.10)$$

Die beschriebene Gamma-Verteilung ist eine normierte Verteilungsfunktion:

$$F(I) = \int f(I) dI = 1. \quad (2.11)$$

Laut [Pap84] lassen sich einer Verteilungsfunktion n Momente zuordnen, welche allgemein durch folgende Formel ausgedrückt werden:

$$M^n = \int f(I) \cdot I^n dI \quad (2.12)$$

Das erste Moment (auch: zentrales Moment) einer Verteilungsfunktion stellt den Mittelwert Θ der Funktion dar.

$$M^1 = \Theta = \int f(I) \cdot I dI \quad (2.13)$$

Für das zweite Moment, dem Maß für die Varianz einer Verteilung, gilt:

$$M^2 = \Psi = \int f(I) \cdot I^2 dI. \quad (2.14)$$

In der vorliegenden Arbeit werden lediglich α und β als veränderliche und voneinander unabhängige Formparameter verwendet. Der Parameter γ stellt eine konstante Größe dar. Daher reicht eine Betrachtung der ersten beiden Momente für eine Berechnung der Verteilungsfunktion aus. Aufgrund der Eigenschaften der Gamma-Verteilung ergeben sich gemäß [THa95], [Lip99] aus den Gleichungen (2.13) und (2.14) folgende einfache Ausdrücke für das erste und zweite Moment:

$$\Theta = \alpha \cdot \beta + \gamma \quad (2.15)$$

$$\Psi = \Theta^2 + \sigma^2 \quad (2.16)$$

mit der Varianz σ^2 , dem Quadrat der Standardabweichung:

$$\sigma^2 = \alpha \cdot \beta^2. \quad (2.17)$$

Die Parameter α , β und γ der Verteilungsfunktion müssen so gewählt werden, dass die physikalischen und chemischen Eigenschaften des abzubildenden Brennstoffs bzw. eines Gemisches bestimmter Einzelkomponenten wiedergegeben werden. In Tabelle 2.3 sind beispielhaft die Parameter der Modellbrennstoffe für Diesel und Benzin aufgeführt [THa95]. Bild 2.14 zeigt schließlich jeweils die Verteilungsfunktionen für Benzin und Diesel gemäß der Formparameter α , β und γ aus Tabelle 2.3.

| Brennstoff | Diesel | Benzin |
|------------|--------|--------|
| α | 18.5 | 5.7 |
| β | 10 | 15 |
| γ | 0 | 0 |

Tabelle 2.3: Verteilungsparameter für verschiedene Modellbrennstoffe [THa95]

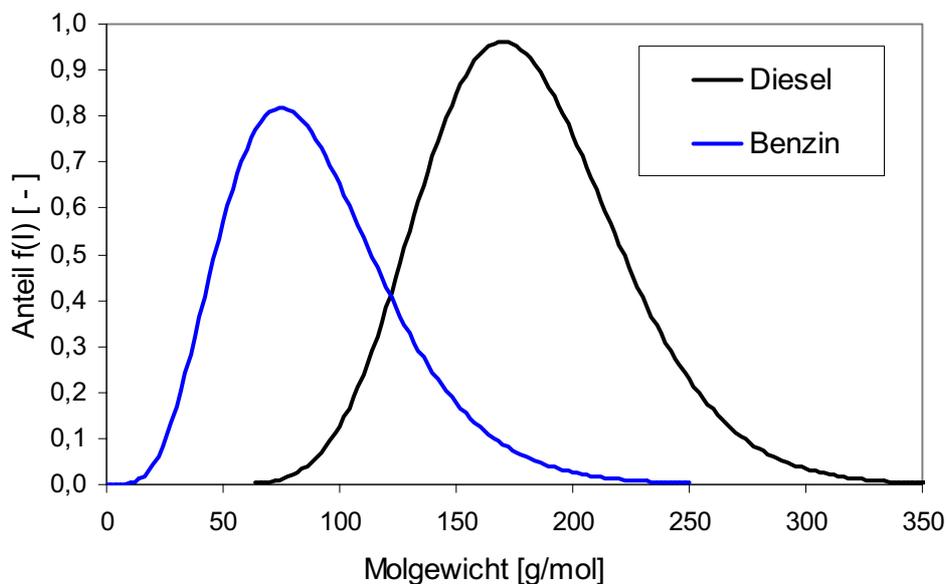


Bild 2.14: Verteilungsfunktionen für verschiedene Modellbrennstoffe

Der Mittelwert der Verteilungsfunktion für Diesel liegt deutlich über dem Mittelwert für Benzin. Dieses ist auf den deutlich höheren Anteil an schwerflüchtigen Bestandteilen im Dieseldieselbrennstoff gegenüber Benzin zurückzuführen. Weiterhin ist zu erwähnen, dass die Verteilungsfunktion, welche die Zusammensetzung eines Komponentengemisches in der flüssigen Phase beschreibt, eine molare Verteilungsfunktion ist. Die Verteilungsfunktion des während des Verdampfungsvorganges entstehenden Brennstoffdampfes wird jedoch als massenbasierte Verteilung dargestellt. Dieses bedingt sich dadurch, dass bei der Berechnung eines Verdampfungsprozesses mit dem CFD-Code KIVA-3V [Ams97] in der Gasphase eine massenbasierte Darstellung der

Verteilungsfunktion benötigt wird. Die massenbasierte Verteilung des Brennstoffdampfes ist bei genauer Betrachtung zwar keine Gammaverteilung jedoch mit dieser verwandt. Lippert [Lip99] zeigt, dass die zur Beschreibung der massenbasierten Verteilung benötigten Momente immer mit dem nächsthöheren Moment der molbasierten Verteilung verwandt sind:

$$M_{mass}^n = \frac{I}{\Theta_{molar}} \int f_{molar}(I) I^{n+1} dI = \frac{M_{molar}^{n+1}}{\Theta_{molar}}. \quad (2.18)$$

So können das erste und zweite Moment der Verteilung des Brennstoffdampfes aus dem zweiten und dritten Moment der molbasierten Verteilung der Flüssigphase berechnet werden. Ausgehend von Gleichung (2.16) ergibt sich für das zweite molbasierte Moment der im Folgenden aufgeführte Ausdruck:

$$M_{molar}^2 = \Psi_{molar} = \alpha(\alpha+1)\beta^2 + 2\alpha\beta\gamma + \gamma^2. \quad (2.19)$$

Für das dritte Moment, welches ein Maß für die Schiefe der Verteilung darstellt, ergibt sich mit

$$M_{molar}^3 = \Phi = \int f(I) \cdot I^3 dI \quad (2.20)$$

folgende Gleichung:

$$M_{molar}^3 = \Phi_{molar} = \alpha\beta^3(\alpha+1)(\alpha+2) + 3\alpha\beta^2\gamma(\alpha+1) + 3\alpha\beta\gamma^2 + \gamma^3. \quad (2.21)$$

Mit der in Gleichung (2.18) beschriebenen Beziehung, ergeben sich für das erste und zweite Moment auf Massenbasis die folgenden Ausdrücke:

$$M_{mass}^1 = \Theta_{mass} = \frac{\alpha(\alpha+1)\beta^2 + 2\alpha\beta\gamma + \gamma^2}{\alpha\beta + \gamma}, \quad (2.22)$$

$$M_{mass}^2 = \Psi_{mass} = \frac{\alpha\beta^3(\alpha+1)(\alpha+2) + 3\alpha\beta^2\gamma(\alpha+1) + 3\alpha\beta\gamma^2 + \gamma^3}{\alpha\beta + \gamma}. \quad (2.23)$$

Für den Fall, dass der Parameter γ zu null gewählt wird, ergeben sich deutlich vereinfachte Ausdrücke für die Momente auf mol- und massenbasierter Seite:

Molbasiert:

$$M^1 : \Theta_{molar} = \alpha\beta \quad (2.24)$$

$$M^2 : \Psi_{molar} = \alpha(\alpha+1)\beta^2 \quad (2.26)$$

Massenbasiert:

$$\Theta_{mass} = (\alpha+1)\beta \quad (2.25)$$

$$\Psi_{mass} = (\alpha+1)(\alpha+2)\beta^2 \quad (2.27)$$

Mit diesen Beziehungen lässt sich daher eine bereits auf Molbasis beschriebene Verteilungsfunktion mit wenig Aufwand in eine massenbasierte Verteilung umwandeln.

2.4 Grundlagen der Verdampfungsmodellierung

Die Modellierung der Verdampfung von Kraftstofftropfen bzw. Einspritzstrahlen innerhalb der CFD-Simulation innermotorischer Prozesse hat einen entscheidenden Einfluss auf die sich der Verdampfung anschließenden Prozesse, wie Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung. Ungenauigkeiten in der Modellierung des Verdampfungsmodells werden so auf alle nachfolgenden Modelle übertragen. Deshalb ist eine genaue Abbildung der Verdampfungsvorgänge zur Untersuchung der Gemischbildung im Brennraum aber auch für die Modellierung sich anschließender Prozesse unabdingbar. In diesem Abschnitt werden daher die notwendigen Grundlagen für diese Verdampfungsvorgänge beschrieben. Es werden darüber hinaus wichtige Vereinfachungen und Annahmen erläutert, welche für eine sinnvolle Verdampfungsmodellierung bei vertretbarer Komplexität zu treffen sind.

Die Begriffe Verdampfung und Verdunstung werden zur Beschreibung des Wärme- und Stoffaustausches eines Tropfens mit einem umgebenden Gas häufig synonym verwendet. Sie können nach [GW74] folgendermaßen gegeneinander abgegrenzt werden:

Verdampfung: Es erfolgt eine Flüssigkeitsvergasung in den eigenen Dampf hinein. Der von einer Flüssigkeit abgegebene Dampf tritt in eine Gasumgebung ein, in welcher sich nur der bereits von der Flüssigkeit abgegebene Dampf befindet. Dabei sind der Gesamtdruck der Gasumgebung und der Partialdruck des Flüssigkeitsdampfes identisch.

Verdunstung: Es erfolgt eine Flüssigkeitsvergasung in ein Gasgemisch hinein. In der Gasumgebung ist außer dem von der Flüssigkeit abgegebene Dampf mindestens ein weiteres Gas enthalten. Der Gesamtdruck in dieser Umgebung ist größer als der Partialdruck des entstehenden Dampfes.

Unter motorischen Bedingungen befindet sich im Brennraum (Zylinder) während des Brennstoffvergasungsprozesses immer auch Luft. Somit müsste laut der oben aufgeführten Überlegungen von einem Verdunstungsprozess gesprochen werden. Es hat sich jedoch der Begriff Verdampfung in diesem Zusammenhang in der Literatur durchgesetzt, so dass hier ebenfalls der Begriff der Verdampfung verwendet wird.

Die Verdampfung eines Einspritzstrahles im Brennraum hat neben den Kriterien der Strahlausbreitung und des Strahlaufbruchs einen wesentlichen Einfluss auf die Gemischbildung und Homogenisierung. Im weiteren Verlauf wirkt sich diese dann entscheidend auf die Zündung und Verbrennung und somit auch auf die Schadstoff-

bildung aus. Hierbei sind der zeitliche Verlauf und die Orte der Dampfbildung von besonderer Bedeutung. Während des Verdampfungsvorgangs entsteht der für die chemische Umsetzung des Brennstoffs benötigte Kraftstoffdampf. Die zur Aufheizung der einzelnen Tropfen und zur Deckung der Verdampfungsenthalpie erforderliche Energie wird der Gasumgebung entzogen und kühlt diese dadurch ab. Infolge dessen ändern sich Geschwindigkeit, Temperatur und Zusammensetzung sowohl der jeweiligen Tropfen als auch der umgebenden Gasphase. Darüber hinaus hängt die Verdampfungsrate vom Brennraumdruck, sowie den chemischen und physikalischen Eigenschaften des jeweiligen Brennstoffs ab.

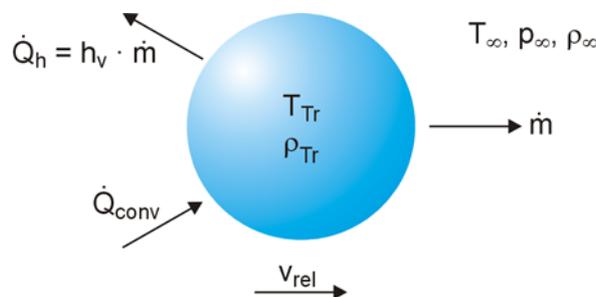


Bild 2.15: Schematische Darstellung der Tropfenverdampfung

Zur mathematischen Beschreibung der Verdampfung im Rahmen der Simulation motorischer Prozesse, werden im Allgemeinen die folgenden Vereinfachungen bzw. Näherungen verwendet [Olt93], [Pag03]:

- Kraftstofftropfen werden als ideale Kugel betrachtet.
- An der Oberfläche des Tropfens herrscht Phasengleichgewicht.
- Die umgebende Gasphase wird als ideales Gasgemisch betrachtet.
- Vernachlässigung des Einflusses der Wärmestrahlung.
- Der Einfluss der Oberflächenspannung auf den Dampfdruck wird nicht berücksichtigt.
- Wechselwirkungen der Tropfen untereinander werden nicht betrachtet.
- Das Umgebungsgas ist im Tropfen nicht löslich.
- Der Einfluss der Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gasumgebung auf Wärmeübergang und Stofftransport wird mittels empirischer Gesetzmäßigkeiten beschrieben. Die Turbulenz hat dabei keinen direkten Einfluss.

Zu Beginn des Verdampfungsprozesses wird der im Vergleich zur Gasumgebung meistens kalte Brennstofftropfen durch einen Wärmestrom \dot{Q}_{conv} , siehe Bild 2.15, aus dem umgebenden heißen Gas aufgeheizt. Mit Beginn der Aufheizung des Tropfens startet der Verdampfungsprozess. Es herrscht an der Oberfläche der zur Tropfentemperatur zugehörige Sättigungsdampfdruck. Aufgrund des vorhandenen Konzentrationsgefälles zwischen Tropfenoberfläche und Gasphase diffundiert der Brennstoff dann entgegen dem Wärmestrom von der Oberfläche in die Gasumgebung. Bedingt durch den weiteren Wärmeeintrag steigt die Temperatur des Tropfens weiter an und es bildet sich im Tropfeninneren ein Temperaturprofil aus. Dieses Profil wird in der vorliegenden Arbeit nicht berechnet. Es kommt stattdessen das Mischungsmodell [Olt93], bei dem der Tropfen als homogen durchmischte angesehen wird, zum Einsatz. Die zur Verdampfung benötigte Energie wird dem Tropfen in Form des Wärmeflusses der Verdampfungsenthalpie \dot{Q}_h entzogen. Die Aufheizphase des Tropfens ist zu dem Zeitpunkt beendet, wenn sich zwischen der Gasumgebung und der Tropfenoberfläche ein Gleichgewicht zwischen zugeführter Wärmemenge und dem Enthalpiestrom vom Tropfen in die Gasphase ausbildet. Die sich in diesem Fall einstellende Tropfentemperatur wird auch als Gleichgewichtstemperatur bezeichnet, da die gesamte zugeführte Wärmemenge ausschließlich für die Verdampfung eingesetzt wird. Dieser quasi-stationäre Zustand bildet sich hauptsächlich bei Einzelkomponenten aus. Bei der Verdampfung von Gemischen ist dieser Effekt nicht zu beobachten.

2.4.1 Phasenübergang Flüssigkeit – Dampf

Für eine Berechnung der an der Phasengrenze zwischen Flüssigkeit und Gasphase auftretenden Massen- und Wärmeströme werden Kenntnisse über die dort vorherrschenden thermodynamischen Zustände benötigt. Zur Bestimmung des Phasenübergangs wird an der Phasengrenzfläche von einem sich einstellenden Gleichgewichtszustand ausgegangen. Es wird hierbei vorausgesetzt, dass der Phasenübergang, im Vergleich zum Transport des Dampfes von der Grenzfläche in die Gasumgebung, wesentlich schneller abläuft. Darüber hinaus wird angenommen, dass sich bei einer Zustandsänderung der Gasumgebung oder der Tropfenoberfläche der Gleichgewichtszustand sofort einstellt. Es bleiben somit instationäre Vorgänge in der Grenzschicht unberücksichtigt.

Mittels der Thermodynamik des Phasengleichgewichts kann die Dampfkonzentration an der Tropfenoberfläche bestimmt werden. Hierfür werden die Temperatur und die Zusammensetzung der Flüssigkeit an der Grenzfläche sowie der Systemdruck benötigt. Der Temperaturverlauf an der Phasengrenzfläche ist stetig. Daher kann die

allgemeingültige Bedingung für das chemische Gleichgewicht durch das chemische Potenzial μ oder durch die daraus abgeleiteten Fugazitäten f_i ausgedrückt werden. Laut [RSh66] gilt:

$$T_{d,s} = T_{g,s} \quad (2.28)$$

$$\mu_{i,d,s} = \mu_{i,g,s} \quad (2.29)$$

$$f_{i,d,s} = f_{i,g,s} \quad (2.30)$$

Bei idealen Gasen entsprechen die Fugazitäten den jeweiligen Partialdrücken. Bei der Betrachtung idealer Flüssigkeiten gilt die Annahme, dass die mittleren intermolekularen Kräfte und die Temperatur beim Mischen der Komponenten konstant sind. Bei chemisch ähnlichen Stoffen ist dies in guter Näherung erfüllt. Die Löslichkeit des umgebenden als inert angenommenen Gases ist aufgrund der im Prozess vorliegenden Drücke gering. Der Massenanteil des gelösten Stickstoffs beträgt nach [JGo93] weniger als 3% und kann daher vernachlässigt werden. Es muss somit nur das Gleichgewicht der verdampfenden Komponenten betrachtet werden. Mit der Annahme eines idealen Verhaltens der Gasphase und der verdampfenden Flüssigkeit folgt aus Gleichung (2.30) das Raoult'sche Gesetz:

$$y_i = x_i \frac{p_v(T_{Tr})}{p_{System}} \quad (2.31)$$

Das Gesetz besagt, dass die Molanteile y_i der Komponenten i im Dampf proportional zu den Molanteilen x_i der Komponenten in der flüssigen Phase sind. Das Raoult'sche Gesetz gilt sowohl für Einzelkomponenten als auch für Stoffgemische.

2.4.2 Gasphasenmodell

Die Aufheizung und Verdampfung eines Tropfens wird von den Zuständen im Tropfen aber auch von den Transportvorgängen in der Grenzschicht bestimmt. Der Energie- und Stofftransport zwischen der Tropfenoberfläche und der Gasumgebung wird mittels der Erhaltungsgleichungen für Masse und Energie beschrieben [BSL60]. Die unbeeinflusste Gasumgebung wird hierbei als homogen angesehen, so dass eine eindimensionale Betrachtung bei der Lösung der erforderlichen Gleichungen möglich ist. Die Homogenität kann deshalb angenommen werden, da bei der Implementierung des Verdampfungsmodells in den CFD-Code KIVA-3V das Verhältnis zwischen Tropfendurchmesser und Gitterabstand als klein anzusehen ist.

Zur Lösung der Erhaltungsgleichungen bedarf es der Einführung einer idealisierten den Tropfen umgebenden Grenzschicht, siehe Bild 2.16.

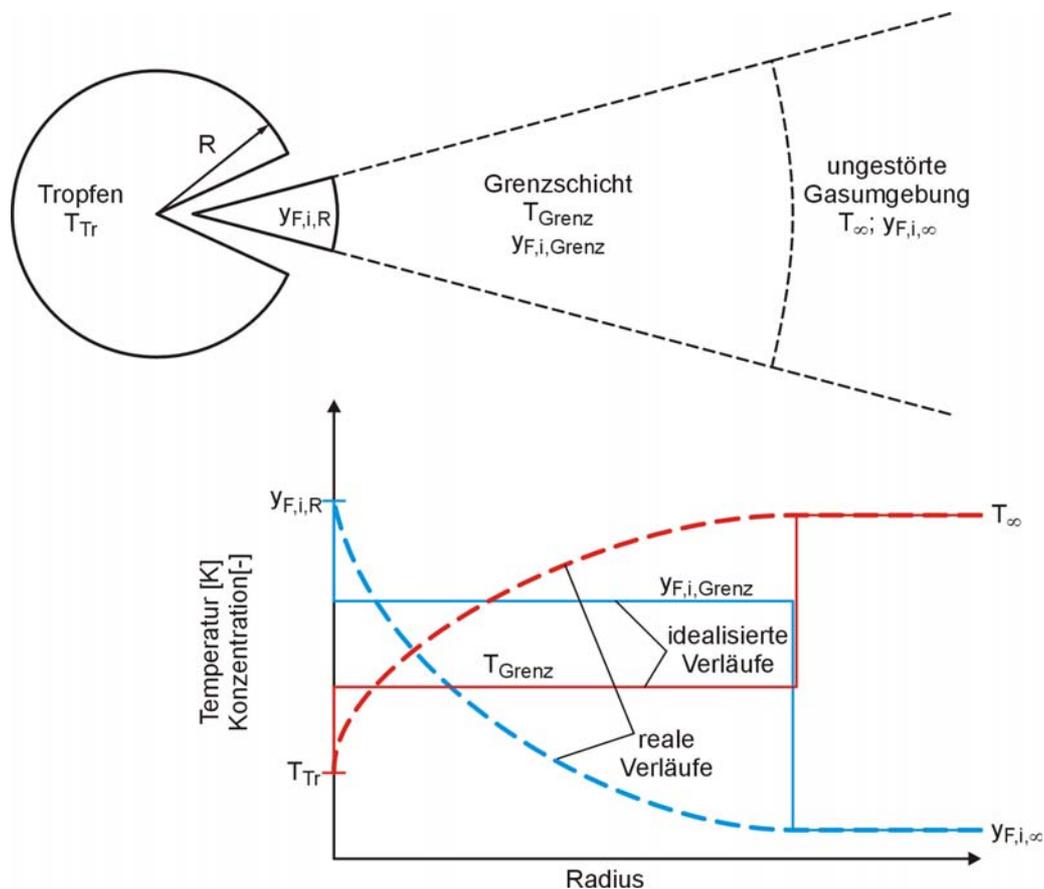


Bild 2.16: Modellvorstellung der Gasumgebung um einen Tropfen

Laut [HDM75] kann diese idealisierte Grenzschicht mit einem quasi-stationären Ansatz beschrieben werden. Dies besagt, dass sich in jedem Zeitintervall aufgrund veränderter Randbedingungen sofort die entsprechenden Gleichgewichtszustände einstellen.

$$T_{Grenz} = T_{Tr.} + \frac{1}{3}(T_{\infty} - T_{Tr.}) \quad (2.32)$$

$$y_{F,i,Grenz} = y_{F,i,R} - \frac{1}{3}(y_{F,i,R} - y_{i,\infty}) \quad (2.33)$$

Daher können die Größen Temperatur und Dampfkonzentration in der Grenzschicht nach [RYu83] als konstant angenommen werden. In [HDM75] wird hierfür die Verwendung des 1/3-Gesetzes aus [SGr58] zur Berechnung der idealisierten Verläufe für Temperatur und Dampfkonzentration vorgeschlagen. Somit werden auch die Stoffgrößen der Gasphase über diese Mittelwerte bestimmt.

2.5 Bewertung

Abschließend werden die wesentlichen Erkenntnisse aus dem Stand der Forschung kurz zusammengefasst. Für das homogenisierte dieselmotorische Brennverfahren stellt sich folgendes Bild dar:

- Das homogene Brennverfahren besitzt ein hohes Potenzial zur Reduzierung von Stickoxid- und Rußemissionen.
- Ein idealerweise homogenes mageres Kraftstoff/Luft-Gemisch im Brennraum entzündet sich gleichzeitig an unendlich vielen Stellen im Brennraum selbst (Raumzündung). Es findet eine sehr hohe und kurze Wärmefreisetzung statt.
- Das Zündverhalten ist abhängig von der Kraftstoffzusammensetzung sowie von Struktur und Kettenlänge der enthaltenen Komponenten.
- Das Verfahren der frühen inneren Gemischbildung gilt als zielführend für die Schaffung des homogenen Kraftstoff/Luft-Gemisches vor Zündbeginn.

Alternative Kraftstoffstrategien bieten folgende Potenziale:

- Reduzierung der Abhängigkeit vom Erdöl. Es bestehen Ansätze eine ausgeglichene CO₂-Bilanz, welche für den Klimaschutz relevant ist, zu realisieren.
- Synthetische Kraftstoffe, hergestellt aus Erdgas und/oder Biomasse, besitzen aufgrund der Aromaten- und Schwefelfreiheit ein hohes Potenzial zur Schadstoffreduzierung.
- Kraftstoffeigenschaften (Siede- und Zündverhalten) der synthetischen Kraftstoffe sind im Herstellprozess so beeinflussbar, dass verschieden zusammengesetzte Brennstoffe erzeugt werden können. Es besteht so die Möglichkeit, moderne Brennverfahren und Kraftstoffe optimal aufeinander abzustimmen.

Modellierung der Verdampfung von Kraftstoffgemischen:

- Es bestehen verschiedene Modellansätze zur Beschreibung diskreter Kraftstoffgemische mit bis zu zehn Komponenten.
- Der Ansatz der kontinuierlichen Thermodynamik bietet die größten Freiheitsgrade zur Abbildung von Kraftstoffgemischen verschiedener Bandbreite und Zusammensetzung.
- Die Grundlagen der Verdampfungsmodellierung mit den notwendigen Annahmen und Vereinfachungen bieten die Basis für eine treffende Modellentwicklung zur Verdampfung von Kraftstoffgemischen.

3 Aufgabenstellung

Die dreidimensionale Simulation innermotorischer Prozesse wird in der Motorenentwicklung immer wichtiger. Mit diesem Werkzeug können Potenzialabschätzungen und Vorauslegungen sowohl von Motoren als auch von neuartigen Brennverfahren kostengünstig durchgeführt werden. Allerdings ist eine ausreichend genaue Modellierung der motorischen Teilprozesse Gemischbildung, Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung eine wesentliche Voraussetzung für eine aussagekräftige Berechnung der innermotorischen Vorgänge. Hierbei bedarf es einer sinnvollen Abschätzung zwischen Programmieraufwand und Rechenzeit auf der einen und der Genauigkeit der Modelle auf der anderen Seite. Es muss ein Kompromiss zwischen diesen Einflussgrößen gefunden werden, der sich zudem auch an den Einsatzbereichen der Simulationsprogramme orientiert.

In Zusammenhang mit Entwicklungsarbeiten zur Umsetzung der homogenisierten dieselmotorischen Verbrennung, kommt der Gemischbildung eine besondere Bedeutung zu. Wie bereits in Kapitel 2.1 beschrieben wurde, besteht die Zielsetzung, bis zum Beginn der Selbstzündung ein homogenes Kraftstoff/Luft-Gemisch im Brennraum zu schaffen. Dabei werden neben konventionellem Dieselmotorkraftstoff auch alternative synthetische Kraftstoffe erprobt, da die Zusammensetzungen und Eigenschaften dieser Kraftstoffe beim Herstellprozess gezielt definierbar sind und so ein optimales Zusammenspiel von Brennverfahren und Kraftstoff erreicht werden kann. Zusätzlich bieten synthetische Kraftstoffe aufgrund ihrer strategischen Bedeutung (Kapitel 2.2) weitere Vorteile. Für umfangreiche Parameterstudien zur Auslegung dieses Brennverfahrens und der Ermittlung einer optimalen Kraftstoffzusammensetzung, bietet sich der Einsatz der CFD-Simulation an, um so das Potenzial des HCCI-Verfahrens ausschöpfen zu können.

Im Rahmen dieser Arbeit ist daher ein Verdampfungsmodell zu entwickeln, das die Zusammensetzung der zu untersuchenden Kraftstoffe während des gesamten Verdampfungsprozesses berücksichtigt. Das Modell soll die Möglichkeit bieten, Kraftstoffkomponenten unterschiedlicher homologer Gruppen abzubilden. Es sollen zudem Kraftstoffe, bestehend aus verschiedenen Teilgemischen bzw. einem Teilgemisch und einer Einzelkomponente, darstellbar sein.

Bisher wird in kommerziellen CFD-Codes zur Abbildung realer Kraftstoffe im Standardverfahren von Einzelkomponenten-Ersatzkraftstoffen ausgegangen. Konventioneller Dieselmotorkraftstoff wird beispielsweise mit der Einzelkomponente Tetra-

dekan ($C_{14}H_{30}$) dargestellt. Um jedoch die Auswirkungen verschiedener Kraftstoffzusammensetzungen untersuchen zu können, bedarf es einer treffenderen Beschreibung der physikalischen und chemischen Eigenschaften. Zudem ist für die Simulation der Zündung und Verbrennung beim HCCI-Verfahren die Modellierung detaillierter Chemie notwendig, da der Zündverzug sehr lang ist und wichtige Reaktionen in Abhängigkeit der Zusammensetzung (Kettenlänge, Struktur, Siedeeigenschaften) stattfinden (Kapitel 2.1.1). Eine detaillierte Darstellung der Kraftstoffe ist somit bereits im Verdampfungsmodell erforderlich, um für eine Zündmodellierung alle benötigten Freiheitsgrade zur Verfügung stellen zu können.

Als Modellbasis dient der Ansatz der kontinuierlichen Thermodynamik, da dieser eine ausreichende Genauigkeit in der Abbildung von Kraftstoffen bei vertretbaren Rechenzeiten ermöglicht. In das Verdampfungsmodell sind zwei Verteilungsfunktionen einzubinden, mit denen zwei Teilgemische unterschiedlicher Eigenschaften und verschiedener homologer Gruppen, wie z. B. Alkane und Aromaten, beschrieben werden. Das Modell muss die Zusammensetzungsveränderung der flüssigen und gasförmigen Phase während des Verdampfungsprozesses beschreiben, um so das frühe Verdampfen leichtflüchtiger Komponenten gegenüber schwerer flüchtigen Bestandteilen zu berücksichtigen. Des Weiteren müssen die zeitlich und örtlich veränderlichen Konzentrationsprofile sowie die Zusammensetzung der Brennstoffbestandteile im Brennraum bestimmbar sein, um für eine detaillierte Modellierung des sich anschließenden Zünd- und Verbrennungsprozesses die erforderlichen Eingangsparameter zu erhalten.

Das Multikomponenten-Verdampfungsmodell wird in den CFD-Code KIVA-3V implementiert. Die Allgemeingültigkeit des Modells soll anhand von Berechnungen zur Verdampfung von Einzeltropfen sowie Untersuchungen einfacher Einspritzvorgänge bewiesen werden. Optische Untersuchungen an einer schnellen Kompressionsmaschine dienen hierbei zum Abgleich mit den Ergebnissen aus den Berechnungen der Einspritzvorgänge. Abschließend soll das entwickelte Multikomponenten-Verdampfungsmodell zur Berechnung der Gemischbildung verschiedener Kraftstoffe im Rahmen des homogenisierten dieselmotorischen Brennverfahrens angewendet werden. Die in Kapitel 2.1.2 beschriebene Gemischbildungsstrategie mit 9-Puls Mehrfacheinspritzung soll dabei diesen Untersuchungen zugrunde gelegt werden.

4 Modellierung der Multikomponenten-Verdampfung

4.1 Modellansatz mit zwei Verteilungsfunktionen

Die theoretische Untersuchung der Verdampfung und Gemischbildung verschiedener synthetischer Brennstoffe sowie handelsüblichem Dieselkraftstoff im homogenisierten dieselmotorischen Brennverfahren, erfordert den Einsatz eines Multikomponenten-Verdampfungsmodells. Wie bereits in der Aufgabenstellung formuliert wurde, muss das Verdampfungsmodell in der Lage sein, die Zusammensetzungen und die sich daraus ergebenden unterschiedlichen Verdampfungseigenschaften der zu untersuchenden Kraftstoffe treffend abzubilden. Als Basis für das Multikomponenten-Verdampfungsmodell dient daher die in Kapitel 2.3 beschriebene Theorie der kontinuierlichen Thermodynamik. Mit diesem Ansatz lassen sich mittels einer Verteilungsfunktion Multikomponentengemische homologer Komponenten darstellen.

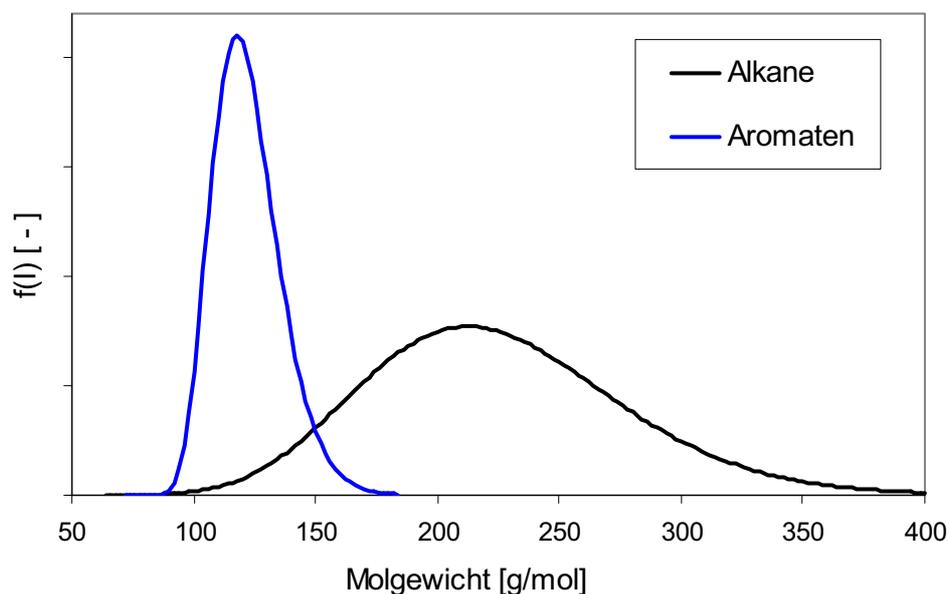


Bild 4.1: Verteilungsfunktionen für Alkane und Aromaten im Dieselkraftstoff

In der vorliegenden Arbeit wird ein Verdampfungsmodell entwickelt, welches neben dem Multikomponentencharakter der zu untersuchenden Kraftstoffe auch die Eigenschaften zweier verschiedener im Brennstoff enthaltener Stoffgruppen (z.B. Alkane und Aromaten) wiedergibt. In Bild 4.1 ist dieser Sachverhalt am Beispiel von Dieselkraftstoff dargestellt. Es zeigt die Zusammensetzung von Dieselkraftstoff bei der Dar-

stellung durch zwei Verteilungsfunktionen für Alkane und Aromaten. Diese beiden bedeutendsten im Dieselkraftstoff enthaltenen Stoffgruppen, können aufgrund ihrer unterschiedlichen Eigenschaften nicht mit einer gemeinsamen Verteilungsfunktion abgebildet werden. Um jedoch den Einfluss zweier verschiedener Stoffgruppen mit jeweils homologen Komponenten von Brennstoffen berücksichtigen zu können, wird ein Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen entwickelt.

Als Basis für das neue Modell mit zwei Verteilungsfunktionen kommt die in Gleichung (2.9) erwähnte Gamma-Verteilung zum Einsatz. Hierbei werden die Formparameter α_1 , β_1 , γ_1 und α_2 , β_2 , γ_2 auf das jeweils abzubildende Teilgemisch eines Brennstoffs angepasst.

$$f_1(I) = \frac{(I - \gamma_1)^{\alpha_1 - 1}}{\beta_1^{\alpha_1} \Gamma(\alpha_1)} \exp\left(-\frac{(I - \gamma_1)}{\beta_1}\right) \quad (4.1)$$

$$f_2(I) = \frac{(I - \gamma_2)^{\alpha_2 - 1}}{\beta_2^{\alpha_2} \Gamma(\alpha_2)} \exp\left(-\frac{(I - \gamma_2)}{\beta_2}\right) \quad (4.2)$$

Da es sich bei den beiden Funktionen um normierte Verteilungen handelt, wie bereits in Kapitel 2.3, Gleichung (2.11) beschrieben ist, gilt wiederum:

$$F_1(I) = \int f_1(I) dI = 1, \quad (4.3)$$

$$F_2(I) = \int f_2(I) dI = 1. \quad (4.4)$$

Die resultierende Gesamtverteilungsfunktion $g(I)$, ist als Überlagerung der beiden Einzelverteilungen f_1 und f_2 , gewichtet mit den Molanteilen x_j ($j = 1, 2$) der Einzelgemische am Gesamtgemisch in der Flüssigphase, zu sehen [RFS05]:

$$g(I) = x_1 \cdot f_1(I) + x_2 \cdot f_2(I). \quad (4.5)$$

Für die Summe der beiden Molanteile x_j besteht der im Folgenden aufgeführte Zusammenhang:

$$x_1 + x_2 = 1. \quad (4.6)$$

Somit erhält man auch für die resultierende Gesamtverteilungsfunktion $g(I)$ eine normierte Verteilung:

$$G(I) = \int g(I) dI = 1. \quad (4.7)$$

Für die zur Berechnung notwendigen Momente (Mittelwert bzw. zentrales Moment und zweites Moment) ergeben sich aus den Gleichungen (2.15) und (2.16) des Kapitels 2.3 die folgenden Zusammenhänge:

$$\Theta_1 = \alpha_1 \cdot \beta_1 + \gamma_1, \tag{4.8}$$

$$\Psi_1 = \Theta_1^2 + \sigma_1^2, \tag{4.9}$$

$$\Theta_2 = \alpha_2 \cdot \beta_2 + \gamma_2, \tag{4.10}$$

$$\Psi_2 = \Theta_2^2 + \sigma_2^2. \tag{4.11}$$

Bei der Umsetzung dieses Verdampfungsmodells ist eine Programmierung der Parameter γ_1 und γ_2 durchzuführen. Wie in Kapitel 2.3 in Bild 2.14 anhand der Verteilungen für Diesel und Benzin gezeigt wird, ist die Abbildung von Gemischen zwar auch ohne diesen Formparameter möglich. In der Anwendung des neuen Verdampfungsmodells wird dieser Parameter aber zur Abbildung schmalbandiger Gemische und Einzelkomponenten benötigt.

| Verteilungsparameter | L1 | Toluol C ₇ H ₈ |
|----------------------|-------|---|
| α | 131,5 | 100,0 |
| β | 0,8 | 0,1 |
| γ | 38,0 | 82,1 |
| Θ [g/mol] | 142,4 | 92,1 |
| σ | 9,1 | 1,0 |

Tabelle 4.1: Verteilungsparameter für L1 und für Toluol

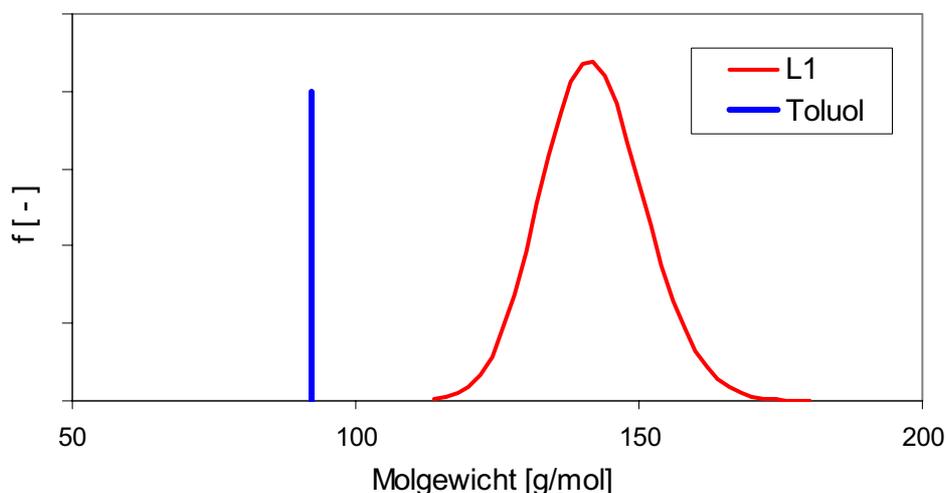


Bild 4.2: Verteilung und Peak für L1 und Toluol

Einzelkomponenten lassen sich jeweils mit einer Verteilungsfunktion darstellen. Dabei werden die Formparameter α und β so variiert, dass die Verteilungsfunktion einen unendlich hohen Einzelimpuls mit der Varianz $\sigma = 1$ darstellt, wie in Tabelle 4.1 und in Bild 4.2 zu erkennen ist. Mit dem Parameter γ wird dieser Einzelimpuls auf das entsprechende Molgewicht der abzubildenden Einzelkomponente justiert. Die Verteilungsfunktion zur Beschreibung eines Gemisches mit stark begrenzter Bandbreite muss mit dem Parameter γ auf den entsprechenden Molgewichtsbereich, der im Gemisch enthaltenen Komponenten, eingestellt werden.

4.2 Modellierung der flüssigen Phase

Ausgangspunkt von Verdampfungsprozessen ist die flüssige Phase bzw. der Tropfen. Der Verdampfungsvorgang wird durch nachfolgend aufgeführte Größen und Zustandsänderungen beschrieben:

- Tropfentemperaturänderung
- Molstromdichte
- Molstromanteile
- Tropfenradiusänderung
- Änderung der Zusammensetzung der flüssigen Phase

Um diese Größen und Änderungen jedoch vollständig berechnen zu können, werden Informationen über die Zustände an der Phasengrenzfläche und in der Gasphase sowie Angaben über die Eigenschaften der verdampfenden Komponenten benötigt. Diese Betrachtungen sind daher im Anschluss an die Beschreibung der flüssigen Phase zu finden.

Im Folgenden werden die Zustandsänderungen anhand eines einzelnen Tropfens beschrieben. In der späteren Anwendung können mit dem entwickelten Modell sowohl die Verdampfung einzelner Tropfen als auch die Verdampfungsvorgänge in eingespritzten Brennstoffstrahlen berechnet werden.

4.2.1 Tropfentemperaturänderung

Das in der vorliegenden Arbeit verwendete Mischungsmodell (Rapid-Mixing-Modell) [Olt93] zur Beschreibung eines Tropfens geht von einer zeitlich instationären aber räumlich konstanten Tropfentemperatur aus [Olt93]. Der zeitliche Temperaturverlauf des sich aufheizenden und verdampfenden Tropfens wird zu jedem Zeitschritt durch die Energiebilanz an der Tropfenoberfläche bestimmt. Diese berechnet sich aus dem konvektionsbedingten Wärmefluss über die Phasengrenzfläche \dot{Q}_{conv} , welcher sich aus dem Wärmefluss der Verdampfungsenthalpie \dot{Q}_h und dem zur Tropfentemperaturerhöhung benötigten Wärmefluss \dot{Q}_L zusammensetzt.

$$\dot{Q}_{conv} = \dot{Q}_h + \dot{Q}_L \quad (4.12)$$

$$\dot{Q}_h = h_v \cdot \frac{dm_{Tr}}{dt} \quad (4.13)$$

$$\dot{Q}_L = m_{Tr} \cdot c_{p,L} \cdot \frac{dT_{Tr}}{dt} \quad \text{mit: } m_{Tr} = \frac{\pi}{6} D^3 \cdot \rho_L(t) \quad (4.14)$$

Die zeitliche Temperaturänderung ergibt sich aus der Energiebilanz an der Tropfenoberfläche somit zu:

$$\frac{dT_{Tr}}{dt} = \frac{l}{m_{Tr} \cdot c_{p,L}} \left(\dot{Q}_{conv} - \frac{dm_{Tr}}{dt} \cdot h_v \right). \quad (4.15)$$

Da die flüssige Phase auf Molbasis betrachtet wird (Kapitel 2.3), muss die Gleichung (4.15) von der massenbasierten in eine molbasierte Betrachtung umgeformt werden. Darüber hinaus wird die Gleichung auf die Oberfläche des Tropfens normiert und man erhält:

$$\frac{dT_{Tr}}{dt} = \frac{3}{c_L \hat{C}_{p,L} R} \left(\dot{q}_{conv} - \dot{n} \cdot \bar{h}_v \right). \quad (4.16)$$

Die in Gleichung (4.16) enthaltene konvektive Wärmestromdichte \dot{q}_{conv} lässt sich folgendermaßen berechnen:

$$\dot{q}_{conv} = \frac{\lambda}{2 \cdot R} (T_\infty - T_{Tr}) \frac{\ln(1+B)}{B} \cdot Nu. \quad (4.17)$$

In dieser Gleichung wird mit λ die Wärmeleitfähigkeit des verdampften Brennstoffes bezeichnet, siehe Gleichung (4.86) in Kapitel 4.5. Die Spalding Transfer Number B wird als die Triebkraft eines Vorganges aufgrund des Konzentrationsgefälles an

Brennstoffdampf zwischen der Phasengrenzfläche und der unberührten Gasumgebung bezeichnet [Mas79] und ergibt sich zu:

$$B = \frac{y_{F,R} - y_{F,\infty}}{1 - y_{F,R}}. \quad (4.18)$$

Mit Nu wird die Wärmetransferzahl nach Nusselt beschrieben. $Nu = 2$ entspricht einem in sich ruhenden Tropfen. Da der Einfluss der Turbulenz und der Relativgeschwindigkeit nicht explizit berechnet wird, ergibt sich für den Fall einer Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gasumgebung folgender Korrekturfaktor [RMa52]:

$$Nu = 2 + 0.6 Re^{1/2} Pr^{1/3}. \quad (4.19)$$

Dieser impliziert dadurch einen aufgrund von Turbulenz und/oder einer Relativgeschwindigkeit gesteigerten Wärmetransport.

Weiterhin setzt sich Gleichung (4.16) für die zeitliche Tropfentemperaturänderung aus der Molstromdichte \dot{n} , welche im folgenden Kapitel beschrieben wird, sowie der molaren Verdampfungsenthalpie \bar{h}_v , siehe Kapitel 4.5, zusammen.

4.2.2 Molstromdichte und Molstromanteile

Die Molstromdichte \dot{n} von einem verdampfenden Tropfen in eine Gasumgebung stellt ein Maß für den Molfluss, der im Zuge der Verdampfung den Tropfen verlässt, dar und berechnet sich im allgemeinen Fall zu:

$$\dot{n} = \frac{c_g \cdot \bar{D}}{2 \cdot R} \cdot \ln(1 + B) \cdot Sh, \quad (4.20)$$

wobei c_g die molare Dichte des umgebenden Gases und \bar{D} den binären Diffusionskoeffizient zwischen Brennstoffdampf und Luft darstellt. Mit B wird, wie im vorherigen Abschnitt, die Spalding Transfer Number beschrieben. Sh stellt die Massentransferzahl nach Sherwood dar, welche analog zur Nusselt-Zahl einen Korrekturfaktor für Turbulenz und Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gas beschreibt [RMa52].

$$Sh = 2 + 0.6 Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (4.21)$$

Im hier vorliegenden Fall, der Verwendung von zwei Verteilungsfunktionen, müssen für jedes einzelne Teilgemisch die Molstromdichten separat berechnet werden. Die einzelnen Molflussdichten der jeweiligen Verteilungen werden gegenüber der

Gesamtmolstromdichte, die den Tropfen verlässt, mit den Molstromanteilen ξ_j gewichtet [HGr01].

$$\xi_j = \dot{n}_j / \dot{n}_{ges.} \quad \text{mit } j = 1, 2 \quad (4.22)$$

$$\xi_1 + \xi_2 = 1 \quad (4.23)$$

Für die Gesamtmolstromdichte $\dot{n}_{ges.}$ ergibt sich somit der im Folgenden dargestellte Zusammenhang:

$$\dot{n}_{ges.} = \xi_1 \cdot \frac{c_g \cdot \bar{D}_1}{2 \cdot R} \cdot \ln(1 + B_1) \cdot Sh + \xi_2 \cdot \frac{c_g \cdot \bar{D}_2}{2 \cdot R} \cdot \ln(1 + B_2) \cdot Sh. \quad (4.24)$$

Im Unterschied zur Spalding Transfer Number in Gleichung (4.20), fließen im Fall des Verdampfungsmodells mit zwei Verteilungen, in die modifizierte Transfer Spalding Number, die Molstromanteile ξ_j mit ein [HGr01]:

$$B_j = \frac{y_{F,j,R} - y_{F,j,\infty}}{\xi_j - y_{F,j,R}} \quad \text{mit } j = 1, 2. \quad (4.25)$$

Die Berechnung der Molstromanteile erfolgt laut [HGr01] über die Zusammenhänge in den Gleichungen (4.22) bis (4.25). Setzt man in das entstehende Gleichungssystem die Werte für $j = 1$ ein und löst nach ξ_2 auf, so erhält man:

$$\xi_2 = y_{F,2,R} + \frac{y_{F,2,R} - y_{F,2,\infty}}{(1 + B_1)^{\bar{D}_1/\bar{D}_2} - 1}. \quad (4.26)$$

ξ_1 berechnet sich über die Bedingung aus Gleichung (4.23). Da die beiden Gleichungen (4.23) und (4.26) nur die Unbekannten ξ_1 und ξ_2 enthalten, ist dieses Gleichungssystem somit eindeutig lösbar.

4.2.3 Tropfenradiusänderung

Die Verringerung der Tropfenmasse während des Verdampfungsprozesses wird über die Berechnung der Tropfenradiusänderung beschrieben. Diese wird über die Gesamtmolstromdichte an der Tropfenoberfläche berechnet. Allgemein ergibt sich für die Molstromdichte über der Tropfenoberfläche:

$$\dot{n} = -\frac{1}{A} \frac{d}{dt}(c_L V), \quad (4.27)$$

wobei V das Tropfenvolumen, c_L die molare Dichte des flüssigen Tropfens und A die Tropfenoberfläche darstellen. Für das Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungen erhält man aus Gleichung (4.27) für die Gesamtmolstromdichte:

$$\dot{n} = -\frac{1}{A} \frac{d}{dt} (c_{L,1} \cdot V_1 + c_{L,2} \cdot V_2), \quad (4.28)$$

mit den jeweiligen molaren Dichten der Teilgemische. Es wird eine mittlere molare Dichte $c_{L,m}$ für die flüssige Phase eingeführt:

$$c_{L,m} = c_{L,1} \cdot x_1 + c_{L,2} \cdot x_2, \quad (4.29)$$

welche sich aus den molaren Dichten der Teilgemische, jeweils gewichtet mit den Molanteilen der Teilgemische der flüssigen Phase, zusammensetzt. So erhält man für die Molflussdichte folgende Formulierung:

$$\dot{n} = -\frac{1}{A} \frac{d}{dt} (c_{L,m} \cdot V). \quad (4.30)$$

Durch Einsetzen der Tropfenoberfläche und des Volumens in Gleichung (4.30) ergibt sich:

$$\dot{n} = -c_{L,m} \cdot \frac{dR}{dt} - \frac{R}{3} \cdot \frac{dc_{L,m}}{dt}. \quad (4.31)$$

Für die zeitliche Änderung des Tropfenradius lässt sich durch Umformen aus Gleichung (4.31) folgern:

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{R}{3 \cdot c_{L,m}} \cdot \frac{dc_{L,m}}{dt} - \frac{\dot{n}}{c_{L,m}}. \quad (4.32)$$

Mit der Bedingung für die Summe der Molanteile der Teilgemische in der flüssigen Phase:

$$x_1 + x_2 = 1 \quad (4.33)$$

und der zeitlichen Ableitung für die mittlere molare Dichte der Flüssigphase in folgender Gleichung:

$$\frac{dc_{L,m}}{dt} = (c_{L,1} - c_{L,2}) \frac{dx_1}{dt} + x_1 \left(\frac{dc_{L,1}}{dt} - \frac{dc_{L,2}}{dt} \right) + \frac{dc_{L,2}}{dt}, \quad (4.34)$$

erhält man zur Berechnung der Tropfenradiusänderung infolge des Verdampfungsprozesses:

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{R}{3c_{L,m}} \left[(c_{L,1} - c_{L,2}) \frac{dx_1}{dt} + x_1 \left(\frac{dc_{L,1}}{dt} - \frac{dc_{L,2}}{dt} \right) + \frac{dc_{L,2}}{dt} \right] - \frac{\dot{n}}{c_{L,m}}. \quad (4.35)$$

Die in Gleichung (4.35) enthaltenen zeitlichen Ableitungen der einzelnen molaren Dichten sind im Folgenden definiert:

$$\frac{dc_{L,j}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\rho_{L,j}}{\Theta_{L,j}} \right) = -\frac{c_{L,j}}{\Theta_{L,j}} \cdot \frac{d\Theta_{L,j}}{dt} \quad \text{mit } j = 1, 2. \quad (4.36)$$

Hierbei gilt die Annahme aus dem CFD-Code KIVA-3V [Ams97], dass die jeweiligen Dichten $\rho_{L,j}$ der Teilgemische in der flüssigen Phase konstant sind.

Die Tropfenradiusänderung und somit die Massenänderung des Tropfens ist abhängig von den Änderungen in den Zusammensetzungen der beiden Teilgemische, dargestellt durch die Änderung der Mittelwerte der Verteilungsfunktionen. Im folgenden Abschnitt wird daher die Änderung der Zusammensetzung der flüssigen Phase während des Verdampfungsprozesses betrachtet.

4.2.4 Änderung der Zusammensetzung der flüssigen Phase

Aufgrund der Tropfentemperaturänderung und des damit einsetzenden Verdampfungsprozesses, welcher auch eine Tropfenradius- und somit eine Massenänderung zur Folge hat, ändert sich auch die Zusammensetzung des flüssigen Tropfens. Dieser Vorgang stellt eine wesentliche Eigenschaft des Multikomponenten-Ansatzes nach der Theorie der kontinuierlichen Thermodynamik dar.

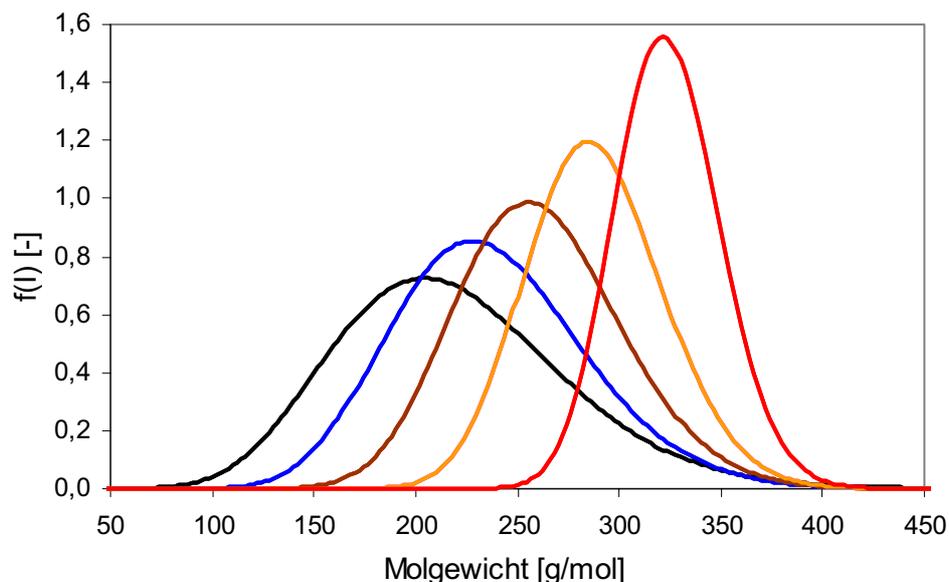


Bild 4.3 Verdampfungsprozess: Änderung der Form der Verteilungsfunktion

Dadurch, dass mit einer Verteilungsfunktion ein Gemisch homologer Komponenten abgebildet wird, ist der Effekt, dass die leichtflüchtigen Bestandteile des Gemisches früher als die schwerer flüchtigen Komponenten verdampfen, darstellbar. Ausgehend von der Anfangsverteilung eines Gemisches, in Bild 4.3 als schwarze Verteilungsfunktion dargestellt, verschiebt sich der Mittelwert der Funktion im Lauf des Verdampfungsprozesses zu höheren Molgewichten. Zudem nimmt die Varianz der Funktion ab. Es werden somit die schnellere Verdampfung leichtflüchtiger Bestandteile sowie die Änderung der Zusammensetzung der gesamten flüssigen Phase während der Verdampfung mit diesem Ansatz wiedergegeben.

Diese Verschiebung und Verschmälerung der Verteilungsfunktion wird über die Berechnung der Änderung des ersten und zweiten Momentes zur Beschreibung der Form der Verteilungsfunktion wiedergegeben. Die Herleitung der maßgeblichen Formeln zur Berechnung dieser Änderungen ist im Folgenden beschrieben.

Im allgemeinen Fall berechnet sich die Molstromdichte \dot{n}_i an der Tropfenoberfläche einer verdampfenden Einzelkomponente in Abhängigkeit der Gesamtmolstromdichte aus Gleichung (4.27) zu:

$$\dot{n}_i = -\frac{1}{A} \frac{d}{dt} (x_i c_L V) = x_i \cdot \dot{n}_{ges.} - c_L \frac{R}{3} \frac{dx_i}{dt}. \quad (4.37)$$

Hierbei stellt x_i den flüssigen Anteil der Einzelkomponente in der gesamten Flüssigphase dar. Nach [THa95] gilt für die Molstromdichte in der Gasphase:

$$\dot{n}_i = \dot{n}_{ges.} \cdot y_{i,R} - c D_{i,m} \frac{\partial y_i}{\partial r}. \quad (4.38)$$

Das Gleichsetzen der Gleichungen (4.37) und (4.38) ergibt demnach:

$$\dot{n}_{ges.} (x_i - y_{i,R}) = -c \cdot D_{i,m} \frac{\partial y_i}{\partial r} + c_L \frac{R}{3} \frac{dx_i}{dt}. \quad (4.39)$$

Durch eine weitere Umformung der Gleichung (4.39) erhält man für die zeitliche Änderung des Flüssiganteils einer Einzelkomponente:

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{3}{c_L R} \left[\dot{n}_{ges.} (x_i - y_{i,R}) + c \cdot D_{i,m} \frac{\partial y_i}{\partial r} \right]. \quad (4.40)$$

Führt man die kontinuierliche Betrachtungsweise eines Gemisches mittels einer Verteilungsfunktion ein, so erhält man für den Molanteil einer einzelnen Komponente eines Gemisches in der flüssigen und in der gasförmigen Phase:

$$x_i = f_L(I)_i \Delta I_i, \quad y_i = y_F f(I)_i \Delta I_i. \quad (4.41)$$

Die flüssige Phase wird hierbei mit der Verteilung $f_L(I)$, die Verteilung in der Gasphase mit $f(I)$ beschrieben. ΔI_i stellt den zugehörigen Intervall zur betrachteten Einzelkomponente i innerhalb des kontinuierlichen Gemisches dar. Mit y_F wird der Anteil an Brennstoffdampf in der Gasphase bezeichnet.

Die Gewichtung von Gleichung (4.40) mit I bzw. I^2 und anschließender Integration liefert, wie in [THa95] beschrieben, die Differentialgleichungen für die Berechnung der Änderungen des ersten und zweiten Momentes während des Verdampfungsprozesses.

$$\frac{d\Theta_L}{dt} = \frac{3}{c_L R} \left[\dot{n}(\Theta_L - y_F \Theta) + c\tilde{D} \frac{\partial}{\partial r} (y_F \Theta) \right]_R \quad (4.42)$$

$$\frac{d\Psi_L}{dt} = \frac{3}{c_L R} \left[\dot{n}(\Psi_L - y_F \Psi) + c\hat{D} \frac{\partial}{\partial r} (y_F \Psi) \right]_R \quad (4.43)$$

Der Index „R“ in den Gleichungen (4.42) und (4.43) bezeichnet die Bedingungen an der Tropfenoberfläche. Die Annahme von Phasengleichgewicht an der Oberfläche liefert laut [Hal99] für die Konzentrationsprofile des Brennstoffs sowie der beiden Momente in der Gasphase die folgenden Gleichungen:

$$y_F(r) = 1 - (1 - y_{F\infty})(1 + B)^{-R/r}, \quad (4.44)$$

$$\phi(r) = \phi_R - \frac{1}{B}(\phi_R - \phi_\infty) \left[(1 + B)(1 + B)^{-R/r} - 1 \right]. \quad (4.45)$$

Hierbei steht ϕ für $y_F \cdot \Theta$ bzw. $y_F \cdot \Psi$, mit r wird die radiale Koordinate für die Zustände in der Gasumgebung des Tropfens bezeichnet. Das Einsetzen der Gleichungen (4.44) und (4.45) in die Gleichungen (4.42) und (4.43) ergibt nach weiteren Umformungen, wie in [Hal99] näher erläutert, für die Änderungen des Mittwertes (erstes Moment) und des zweiten Momentes:

$$\frac{d\Theta_L}{dt} = \frac{3 \cdot \dot{n}}{c_L R} \left[\Theta_L - y_{F,R} \Theta_R + \frac{1}{B} (\Theta_\infty y_{F,\infty} - \Theta_R y_{F,R}) \right], \quad (4.46)$$

$$\frac{d\Psi_L}{dt} = \frac{3 \cdot \dot{n}}{c_L R} \left[\Psi_L - y_{F,R} \Psi_R + \frac{1}{B} (\Psi_\infty y_{F,\infty} - \Psi_R y_{F,R}) \right]. \quad (4.47)$$

Diese Ausdrücke zur Beschreibung der Änderung der Zusammensetzung der flüssigen Phase hängen lediglich von den aus dem Phasengleichgewicht an der Tropfenoberfläche (R) berechneten Werten und den Bedingungen in der Gasphase (∞) ab. Erweitert man die kontinuierliche Betrachtungsweise um eine zweite Ver-

teilungsfunktion, so ergibt sich für den Molanteil einer einzelnen Komponente eines Gemisches in der flüssigen und in der gasförmigen Phase:

$$x_i = x_j \cdot f_{L,j}(I)_i \Delta I_i, \quad y_i = y_j \cdot f_j(I)_i \Delta I_i, \quad (4.48)$$

wobei x_j mit $j = 1, 2$ die Molanteile der Teilgemische in der flüssigen Phase und mit y_j jeweils die Molanteile des Dampfes beschrieben werden. Die Konzentrationsverläufe der Brennstoffanteile bzw. des ersten und zweiten Momentes werden analog zu den Gleichungen (4.44) und (4.45) formuliert, wobei Gleichung (4.49) um den Molstromanteil ξ_j erweitert wird.

$$y_{F,j}(r) = \xi_j - (\xi_j - y_{F,j,\infty}) (I + B_j)^{-R/r} \quad (4.49)$$

$$\phi_j(r) = \phi_{R,j} - \frac{I}{B_j} (\phi_{R,j} - \phi_{\infty,j}) \left[(I + B_j)^{(I-R/r)} - I \right] \quad (4.50)$$

In diesem Fall steht ϕ_j für $y_{F,j} \cdot \Theta_j$ bzw. $y_{F,j} \cdot \Psi_j$. Die Gleichungen zur Berechnung der Änderungen der Mittelwerte und zweiten Momente der beiden Verteilungsfunktionen j (mit: $j = 1, 2$) lassen sich so analog zu den Gleichungen (4.46) und (4.47), siehe [HGr01], folgendermaßen bestimmen:

$$\frac{d\Theta_{L,j}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{x_j c_{L,m} R} \left[\Theta_{L,j} \xi_j - \Theta_{R,j} y_{F,j,R} + \frac{I}{B_j} (\Theta_{\infty,j} y_{F,j,\infty} - \Theta_{R,j} y_{F,j,R}) \right], \quad (4.51)$$

$$\frac{d\Psi_{L,j}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{x_j c_{L,m} R} \left[\Psi_{L,j} \xi_j - \Psi_{R,j} y_{F,j,R} + \frac{I}{B_j} (\Psi_{\infty,j} y_{F,j,\infty} - \Psi_{R,j} y_{F,j,R}) \right]. \quad (4.52)$$

Es ergibt sich eine ähnliche Schreibweise, wie bei der Betrachtung einer einzelnen Verteilungsfunktion. Im vorliegenden Fall der Verwendung von zwei Verteilungsfunktionen geschieht, wie in (4.51) und (4.52) zu erkennen ist, eine Kopplung der beiden Funktionen über die Molstromanteile ξ_j .

Im Verlauf des Verdampfungsprozesses können sich unterschiedliche Verdampfungsraten für die jeweiligen Teilgemische ergeben. Der Grund hierfür liegt in den unterschiedlichen Eigenschaften der Teilgemische. Ein Gemisch mit leichter flüchtigen Bestandteilen hat eine höhere Verdampfungsrates als eines mit schwerer flüchtigen Komponenten. Daraus resultierend, verändert sich die Zusammensetzung, bzw. das Verhältnis der Teilgemische in der Flüssigphase. Dieses Verhältnis wird durch die bereits beschriebenen Molanteile x_j dargestellt. Die zeitliche Änderung dieser Molanteile bzw. der Zusammensetzung wird über das Gleichgewicht der ver-

dampfenden Ströme an der Tropfenoberfläche berechnet und kann durch Einsetzen der Ausdrücke (4.48) in Gleichung (4.40) und anschließender Integration nach [HGr01], wie folgt dargestellt werden:

$$\frac{dx_j}{dt} = \frac{3 \cdot \dot{n}}{c_{L,m} R} \left[(x_j - y_{F,j,R}) + \frac{c \cdot \bar{D}_j}{\dot{n}} \frac{\partial y_j}{\partial r} \Big|_R \right] = \frac{3 \cdot \dot{n}}{c_{L,m} R} [x_j - \xi_j]. \quad (4.53)$$

Somit lässt sich der gesamte Verdampfungsprozess beschreiben. Im folgenden Kapitel werden die Bedingungen an der Phasengrenzfläche näher erläutert und die daraus resultierenden notwendigen Größen zur Berechnung des Verdampfungsprozesses aufgeführt.

4.3 Modellierung des Phasengleichgewichts

Ausgehend von den im Stand der Forschung in Kapitel 2.4.1 beschriebenen Grundlagen zum Phasenübergang, wird nachfolgend das Phasengleichgewicht zwischen flüssiger und dampfförmiger Phase an der Tropfenoberfläche beschrieben. Für eine Einzelkomponente lautet die Formulierung für den Molanteil des verdampften Brennstoffs y_i an der Phasengrenzfläche gemäß dem Raoult'schen Gesetz:

$$y_i = x_i \left(\frac{p_v}{p_{System}} \right), \quad (4.54)$$

wobei x_i den Anteil der Einzelkomponente in der Flüssigphase darstellt. p_v stellt den Dampfdruck der Einzelkomponente und p_{System} den Systemdruck (Umgebungsdruck) dar. Im kontinuierlichen Fall bei der Betrachtung eines Gemisches, dargestellt durch eine Verteilungsfunktion, ergibt sich die folgende Gleichung:

$$y_{F,R} = \int_0^{\infty} f_L(I) \left(\frac{p_v}{p_{System}} \right) dI. \quad (4.55)$$

Hierbei wird der Anteil des flüssigen Brennstoffs durch die Verteilungsfunktion beschrieben, da sich die Zusammensetzung des Tropfens mit fortschreitender Verdampfung und somit auch der Molanteil $y_{F,R}$ an der Tropfenoberfläche ändert.

Bei der Betrachtung eines Gesamtgemisches, wiederum bestehend aus zwei kontinuierlichen Teilgemischen, wie es hier der Fall ist, berechnet sich der Molanteil Brennstoffdampf an der Tropfenoberfläche nach Gleichung (4.56) folgendermaßen:

$$y_{F,ges.,R} = x_1 \int_0^{\infty} f_1(I_1) \left(\frac{p_{v,1}(I_1)}{p_{System}} \right) dI_1 + x_2 \int_0^{\infty} f_2(I_2) \left(\frac{p_{v,2}(I_2)}{p_{System}} \right) dI_2. \quad (4.56)$$

Für jedes Teilgemisch, repräsentiert durch jeweils eine Verteilung, wird der Molanteil des Dampfes an der Phasengrenzfläche separat bestimmt. Dieser wird mit dem jeweiligen Molanteil x_1 bzw. x_2 der Einzelgemische am Gesamtgemisch gewichtet.

Zur Bestimmung des Molanteils an der Phasengrenzfläche benötigt man den Dampfdruck der Einzelkomponente, bzw. des durch eine Verteilung dargestellten Gemisches. Dieser kann mit Hilfe der Clausius-Clapeyron-Gleichung unter den folgenden Annahmen [Bae96] bestimmt werden:

- Das Flüssigkeitsvolumen wird gegenüber dem Dampfvolmen vernachlässigt.
- Gesättigter Dampf wird als ideales Gas betrachtet.
- Die Verdampfungsenthalpie ist keine Funktion der Temperatur und es gilt:

$$h_v(T) = h_{v,0} = const.$$

Nach Integration der Clausius-Clapeyron-Beziehung über eine feste und eine beliebige Grenze, erhält man:

$$\ln \frac{p_v}{p_0} = \frac{h_{v,0}}{R \cdot T_0} \left(1 - \frac{T_0}{T} \right). \quad (4.57)$$

Für den Dampfdruck eines kontinuierlichen Gemisches in Abhängigkeit des Molgewichts der enthaltenen Komponenten, erhält man aus Gleichung (4.57) unter Anwendung der Trouton'schen Regel:

$$p_v(I) = p_{atm} \exp \left[\left(\frac{s_{v,0}}{R} \right) \left(1 - \frac{T_B(I)}{T_{Tr}} \right) \right]. \quad (4.58)$$

Als feste Betrachtungsgrenze wird hier der Siedetemperaturverlauf des Gemisches bei atmosphärischem Druck verwendet:

$$T_B(I) = a_B + b_B \cdot I. \quad (4.59)$$

Für eine homologe Gruppe von Komponenten kann die Siedetemperatur in guter Näherung als lineare Funktion des Molgewichts dargestellt werden. Dieser Zusammenhang ist in Bild 4.4 anhand der Siedepunkte von n-Alkanen und der entsprechenden Korrelation veranschaulicht.

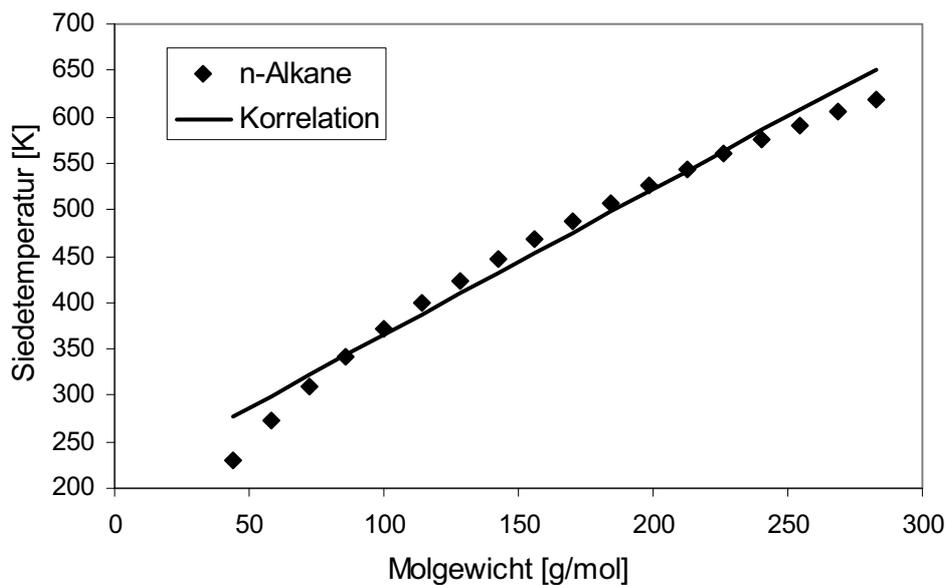


Bild 4.4: Siedepunkte von n-Alkanen mit entsprechender Korrelation [Lip99]

Für das Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungen wird für jedes Teilgemisch jeweils eine Siedetemperaturkorrelation benötigt, da aufgrund der unterschiedlichen Eigenschaften der Teilgemische unterschiedliche Dampfdrücke $p_{v,1}$ und $p_{v,2}$ vorherrschen, siehe auch Gleichung (4.56). So erfolgt eine Anpassung der Parameter für die jeweilige Siedetemperaturkorrelation entsprechend der Stoffdaten der Teilgemische.

$$T_{B,1}(I_1) = a_{B,1} + b_{B,1} \cdot I_1 \quad (4.60)$$

$$T_{B,2}(I_2) = a_{B,2} + b_{B,2} \cdot I_2 \quad (4.61)$$

Mit den folgenden beiden Ausdrücken lässt sich nach [CBP85] und [THa95] Gleichung (4.58) für den Dampfdruck eines Gemisches vereinfachen.

$$A_j = \frac{s_{v,0}}{R} \left(1 - \frac{a_{B,j}}{T_{Tr}} \right) \quad (4.62)$$

$$B_j = \frac{b_{B,j}}{T_{Tr} - a_{B,j}} \quad (4.63)$$

Man erhält dadurch für den Dampfdruck folgende Formulierung:

$$p_{v,j}(I_j) = p_{atm} \exp \left[A_j (1 - B_j \cdot I_j) \right], \quad (4.64)$$

wobei $j = 1, 2$ gilt, da für jede einzelne Verteilung ein separater Dampfdruck berechnet werden muss.

Den Molanteil $y_{F,j,R}$ verdampften Brennstoffs an der Phasengrenzfläche eines Gemisches, bzw. Teilgemisches j , erhält man durch Lösen des Integrals in Gleichung (4.55) bzw. der Integrale in Gleichung (4.56). Unter Verwendung von Gleichung (4.64) für den Dampfdruck sowie den Vereinfachungen A_j und B_j aus den Gleichungen (4.62) und (4.63), erhält man nach [Hal99] für den Molanteil an der Phasengrenzfläche eines Tropfens:

$$y_{F,j,R} = \frac{e^{(A_j(1-\gamma_j \cdot B_j))}}{(1 + A_j \cdot B_j \cdot \beta_j)^{\alpha_j}} \cdot \frac{P_{atm}}{P_{System}}, \quad (4.65)$$

mit den Formparametern α_j , β_j und γ_j der jeweiligen Verteilungsfunktion. Die Parameter α_j , β_j ändern sich während des Verdampfungsprozesses. γ_j stellt jeweils die Verschiebung der Verteilungen zum Ursprung dar und bleibt sowohl in der flüssigen als auch in der gasförmigen Phase während des gesamten Prozesses konstant.

Für das Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungen ergibt sich der gesamte Molanteil Brennstoffdampf an der Tropfenoberfläche zu:

$$y_{F,ges.,R} = x_1 \cdot y_{F,1,R} + x_2 \cdot y_{F,2,R}, \quad (4.66)$$

wie bereits in Gleichung (4.56) in integraler Form dargestellt wurde.

Weiterhin werden zur Beschreibung des Verdampfungsprozesses Informationen zur Zusammensetzung des momentan verdampfenden Brennstoffes benötigt. Hierbei sind der Mittelwert $\theta_{R,j}$ und die Varianz $\sigma_{R,j}^2$ der Verteilungen des Dampfes der Teilgemische an der Tropfenoberfläche von Bedeutung. Diese berechnen sich laut [CBP85] und [THa95] als einfache Beziehungen zu den Parametern $\theta_{L,j}$ und $\sigma_{L,j}^2$ in der flüssigen Phase zu:

$$\theta_{R,j} = \frac{(\theta_{L,j} - \gamma_j)}{1 + \frac{A_j \cdot B_j \cdot \sigma_{L,j}^2}{(\theta_{L,j} - \gamma_j)}} + \gamma_j, \quad (4.67)$$

$$\sigma_{R,j}^2 = \sigma_{L,j}^2 \left[\frac{(\theta_{R,j} - \gamma_j)}{(\theta_{L,j} - \gamma_j)} \right]^2. \quad (4.68)$$

Auch hier gilt $j = 1, 2$, da die oben genannten Parameter beim Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungen für jedes Teilgemisch separat berechnet werden müssen. Für die weiteren Berechnungen in der Gasphase muss der Molanteil verdampften Brennstoffs in den Massenanteil des Dampfes an der Phasengrenzfläche umgeformt

werden. Hierbei ist zwischen dem Verdampfungsmodell mit einer Verteilungsfunktion und dem neuen Modell mit zwei Funktionen zu unterscheiden.

Beim Verdampfungsmodell mit einer Verteilungsfunktion besteht die Phasengrenzfläche aus zwei Stoffgruppen, zum einen dem Brennstoffdampf und zum anderen dem Brennraumgas. Es erfolgt daher eine Mol- zu Massenanteil-Umrechnung unter Berücksichtigung der Anteile dieser zwei Stoffe.

$$y_{F,R,mas} = \frac{\Theta_R \cdot y_{F,R}}{\Theta_R \cdot y_{F,R} + (1 - y_{F,R}) \cdot MW_{Gas}} \quad (4.69)$$

Der Molanteil des Brennraumgases wird über den Zusammenhang $(1 - y_{F,R})$ angegeben. Mit MW_{Gas} wird das Molgewicht des Brennraumgases beschrieben.

Das neue Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen erfordert eine modifizierte Betrachtung. In diesem Fall setzt sich der Brennstoffdampf aus den verdampften Anteilen der beiden Teilgemische zusammen. Der Gesamtmolanteil des Brennstoffdampfes wird daher mittels der beiden Molanteile der Teilgemische an der Phasengrenzfläche beschrieben. Es ergibt sich somit auch in der massenbasierten Betrachtungsweise für jedes Teilgemisch jeweils ein Massenanteil Brennstoffdampf:

$$y_{F,1,R,mas} = \frac{\Theta_{R,1} \cdot x_1 \cdot y_{F,1,R}}{\Theta_{R,1} \cdot x_1 \cdot y_{F,1,R} + \Theta_{R,2} \cdot x_2 \cdot y_{F,2,R} + (1 - x_1 \cdot y_{F,1,R} - x_2 \cdot y_{F,2,R}) \cdot MW_{Gas}} \quad (4.70)$$

Analog ergibt sich für den Massenanteil Brennstoffdampf des zweiten Teilgemisches:

$$y_{F,2,R,mas} = \frac{\Theta_{R,2} \cdot x_2 \cdot y_{F,2,R}}{\Theta_{R,1} \cdot x_1 \cdot y_{F,1,R} + \Theta_{R,2} \cdot x_2 \cdot y_{F,2,R} + (1 - x_1 \cdot y_{F,1,R} - x_2 \cdot y_{F,2,R}) \cdot MW_{Gas}} \quad (4.71)$$

In diesem Fall wird der Molanteil des Brennraumgases über den Zusammenhang $(1 - x_1 \cdot y_{F,1,R} - x_2 \cdot y_{F,2,R})$ angegeben.

Mit diesen Formulierungen lassen sich somit die für den Verdampfungsprozess benötigten Informationen und Variablen vollständig beschreiben. Zudem ermöglichen sie eine Berücksichtigung der unterschiedlichen Eigenschaften, wie Dampfdruck und Siedeverhalten der beiden abgebildeten Teilgemische.

4.4 Beschreibung der Gasphase

Die allgemeinen Transportgleichungen der Gasphase werden analog zu [THa95] und [Lip99] beschrieben. Eine Implementierung in den CFD-Code KIVA-3V wird dadurch erleichtert, dass im verwendeten CFD-Code ebenfalls massenbasierte Lösungsalgorithmen verwendet werden. Zur eindeutigen Beschreibung des Transports in die Gasphase sind neben der Transportgleichung für den Massenanteil auch die Transportgleichungen für das erste und zweite Moment Θ und Ψ der beiden Verteilungsfunktionen zu berücksichtigen.

Beim Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen sind zwei Transportgleichungen für die Massenanteile der beiden Verteilungen sowie jeweils die Transportgleichungen für das erste und zweite Moment der Verteilungsfunktionen zu betrachten.

Für eine einzelne Komponente i lautet die dazugehörige Transportgleichung auf molarer Basis:

$$\frac{\partial}{\partial t}(cy_i) + \nabla(cvy_i) = \nabla(cD_{im}\nabla y_i). \quad (4.72)$$

Hierbei steht c für die molare Dichte, y für den Molanteil verdampften Brennstoffs an der Phasengrenzfläche, v für die mittlere molare Geschwindigkeit und D für den binären Diffusionskoeffizienten.

Die endgültigen Gleichungen lassen sich durch die vollständige Integration über die jeweilige Verteilungsfunktion ermitteln und ergeben sich laut [THa95] zu:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_F) + \nabla(\rho v Y_F) = \nabla(\rho \bar{D} \nabla Y_F) + (S_{Y_F})^C + (S_{Y_F})^S, \quad (4.73)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_F \Theta) + \nabla(\rho v Y_F \Theta) = \nabla(\rho \tilde{D} \nabla (Y_F \Theta)) + (S_\Theta)^C + (S_\Theta)^S, \quad (4.74)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_F \Psi) + \nabla(\rho v Y_F \Psi) = \nabla(\rho \hat{D} \nabla (Y_F \Psi)) + (S_\Psi)^C + (S_\Psi)^S. \quad (4.75)$$

Die drei unterschiedlichen Diffusionskoeffizienten \bar{D} , \tilde{D} und \hat{D} für den Massenanteil sowie für das erste und zweite Moment, sind im laminaren Fall sehr ähnlich zueinander. Im turbulenten Fall ist die turbulente Diffusion maßgeblich und dominiert über die molekulare Diffusion. Nach [Lip99] können die Diffusionskoeffizienten somit gleichgesetzt werden.

Die Terme $(S_x)^{C \text{ bzw. } S}$ stellen Quelltherme für die Verbrennung (C: Combustion) und für die Einspritzung des Brennstoffes (S: Spray Vaporization) dar.

Im vorliegenden neuen Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen müssen die Transportgleichungen (4.73), (4.74) und (4.75) jeweils für $y_{F,1}$, $y_{F,2}$, für θ_1 , θ_2 und für Ψ_1 , Ψ_2 implementiert werden.

4.5 Thermodynamische Zustandsgrößen zur Beschreibung von Stoffeigenschaften

Im vorliegenden Kapitel werden die Stoffwertkorrelationen, welche zur Beschreibung der Multikomponenten-Verdampfung erforderlich sind, aufgeführt. Zu bemerken ist, dass die Stoffwertkorrelationen für das Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen jeweils zweimal implementiert sind. So können mittels der beiden Verteilungsfunktionen zwei Teilgemische mit unterschiedlichen Stoffeigenschaften dargestellt werden. Im Folgenden sind die Stoffwertkorrelationen jedoch jeweils nur einmal aufgeführt, da die grundsätzlichen Ansätze gleich sind. Es werden zur Anpassung an das betreffende Komponentengemisch die einzelnen Parameter verändert. Diese sind im Anhang für die verschiedenen zu untersuchenden synthetischen und konventionellen Kraftstoffe aufgelistet.

Die **Siedetemperatur** eines Stoffes beschreibt den Punkt, an dem die Flüssigkeit zu sieden beginnt und verdampft. Zu jedem Druck gehört eine bestimmte Siedetemperatur und umgekehrt ist jeder Temperatur ein bestimmter Druck, bei dem die Flüssigkeit verdampft, zuzuordnen. Daher wird hier die normale Siedetemperatur betrachtet, welche dem Druck von 101,325 kPa zugehörig ist. Wie bereits in Kapitel 4.3 erwähnt, wird hier eine lineare Korrelation für die Siedetemperatur verwendet:

$$T_B(I) = a_B + b_B \cdot I. \quad (4.76)$$

Die **kritische Temperatur** ist eine von drei Zustandsgrößen neben dem krit. Druck und der krit. Dichte zur Beschreibung des kritischen Punktes eines Stoffes. In der Thermodynamik kennzeichnet der kritische Punkt im Phasendiagramm eines Stoffes den Zustand, an dem sich die Dichte der Flüssigkeit und des Gases angleichen und

damit der Unterschied zwischen beiden aufhört zu existieren. Der Tropfen ist damit nur noch durch seinen 100 prozentigen Anteil des enthaltenen Stoffes von der Umgebung zu unterscheiden [Olt93]. In [THa95] wird eine lineare Funktion für die kritische Temperatur in Abhängigkeit des Molgewichts angegeben:

$$T_C(I) = a_c + b_c I. \quad (4.77)$$

Dieser Ansatz wurde in [Lip99] mit der Methode von Li [RPP87], welche das kritische Volumen als Wichtungsfunktion benutzt, erweitert. Für die Abbildung kontinuierlicher Gemische lautet der Ansatz:

$$T_C = \frac{\int V_{cr}(I) T_{cr}(I) f(I) dI}{\int V_{cr}(I) f(I) dI}. \quad (4.78)$$

Das **kritische Volumen** V_{cr} wird hierbei ebenfalls durch eine lineare Funktion in Abhängigkeit des Molgewichts abgebildet:

$$V_{cr}(I) = a_v + b_v I. \quad (4.79)$$

Das Einsetzen der Gleichungen (4.77) und (4.79) in (4.78) liefert den folgenden Ausdruck für die Korrelation der kritischen Temperatur, gewichtet mit dem kritischen Volumen:

$$T_C = \frac{a_c a_v + a_v b_c \Theta + a_c b_v \Theta + b_c b_v \Psi}{a_v + b_v I}. \quad (4.80)$$

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird die **molare Verdampfungsenthalpie** mittels einer empirischen Korrelation beschrieben. Als zulässige Vereinfachung wird hierbei das ideale Gasgesetz angewendet und somit der Druckeinfluss vernachlässigt. Laut [RPP87] gilt für eine Einzelkomponente folgende Korrelation:

$$h_v = (1.093 \cdot \bar{R} \cdot T_B) \left[\frac{\log p_c - 1.013}{0.930 - T_B/T_C} \right] \left[\frac{T_C - T}{T_C - T_B} \right]^{0.38}. \quad (4.81)$$

T_B stellt die Siedetemperatur, T_C die kritische Temperatur und p_c den kritischen Druck einer Einzelkomponente bei der Temperatur T dar. Dieser Ansatz wurde in [THa95] zur Anwendung bei Mehrkomponentengemischen erweitert. Somit ergibt sich die folgende Gleichung:

$$h_v = \left[a_h + b_h \left((y_F \Theta)_R - \frac{I}{B} \left[(y_F \Theta)_\infty - (y_F \Theta)_R \right] \right) \right] \cdot \Phi_H \left[\frac{J}{\text{kmol}} \right] \quad (4.82)$$

$$\text{mit: } \Phi_H = \frac{(T_C - T_{Tr})^{0.38}}{(T_C - T_B)^{0.38}}. \quad (4.83)$$

Beim Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen ergibt sich nach [HGr01] eine veränderte Gleichung zur Berechnung von h_v , da sich die Verdampfungsenthalpie, abhängig von den Eigenschaften der Teilgemische, berechnet:

$$h_v = \sum_{j=1}^2 \Phi_{H,j} \left[a_{h,j} \cdot \xi_j + b_{h,j} \left((y_{F,j} \Theta_j)_R - \frac{I}{B_j} \left[(y_{F,j} \Theta_j)_\infty - (y_{F,j} \Theta_j)_R \right] \right) \right] \quad (4.84)$$

$$\text{mit: } \Phi_{H,j} = \frac{(T_{C,j} - T_{Tr})^{0.38}}{(T_{C,j} - T_{B,j})^{0.38}}. \quad (4.85)$$

Die Verdampfungsenthalpie berechnet sich als die Summe der Enthalpien der beiden Teilgemische, gewichtet mit den Molstromanteilen ξ_j an der Phasengrenzfläche.

Nach [THa95] kann die **Wärmeleitfähigkeit des dampfförmigen** Brennstoffs als Funktion des Molgewichts und der Temperatur beschrieben werden.

$$\lambda(I, T) = (a_{KC} + a_{KT} \cdot T) + (b_{KC} + b_{KT} \cdot T) \cdot I \quad \left[\frac{W}{mK} \right] \quad (4.86)$$

Die **spezifische Wärmekapazität des Brennstoffdampfes** wird mittels einer Korrelation aus [CPr86] bestimmt. Diese Korrelation verwendet einen linearen Ansatz für das Molgewicht:

$$c_p(I, T) = R(a_{cp} + b_{cp} \cdot I), \quad \left[\frac{kJ}{\text{kmol}} \right] \quad (4.87)$$

jedoch für die Temperatur einen Polynomansatz 3. Ordnung:

$$a_{cp} = a_{c0} + a_{c1} \cdot T + a_{c2} \cdot T^2 + a_{c3} \cdot T^3, \quad (4.88)$$

$$b_{cp} = b_{c0} + b_{c1} \cdot T + b_{c2} \cdot T^2 + b_{c3} \cdot T^3. \quad (4.89)$$

Der Ansatz für den **binären Diffusionskoeffizienten** zwischen dampfförmigem Brennstoff und Luft geht auf Fuller et al. [FSG66] zurück. Diese Korrelation verwendet einen nicht-linearen Ansatz. Weiterhin beinhaltet dieser Ansatz auch die reziproke Druckabhängigkeit, wie von der kinetischen Gastheorie vorausgesagt wird [Lip99]:

$$\bar{D}_{F,A} = \frac{0.00143 \cdot T_{Grenz}^{1.75}}{p \cdot \sqrt{M_{F,A}} \left[\left(\sum \nu \right)_A^{1/3} + \left(\sum \nu \right)_F^{1/3} \right]^2} \quad \left[\frac{m^2}{s} \right] \quad (4.90)$$

$$\text{mit: } M_{F,A} = 2 \left(\frac{1}{MW_{Gas}} + \frac{1}{\Theta_F} \right)^{-1} \quad \left[\frac{g}{mol} \right] \quad (4.91)$$

T_{Grenz} kennzeichnet hierbei die Temperatur in der Grenzschicht, p den Druck in der Gasumgebung und MW_{Gas} das Molgewicht des umgebenden Brennumgebungsgases. Θ_F beschreibt den Mittelwert der Brennstoffdampfverteilung und $\sum \nu$ geben die Summe der atomaren Diffusionsvolumina von Luft und Brennstoff an.

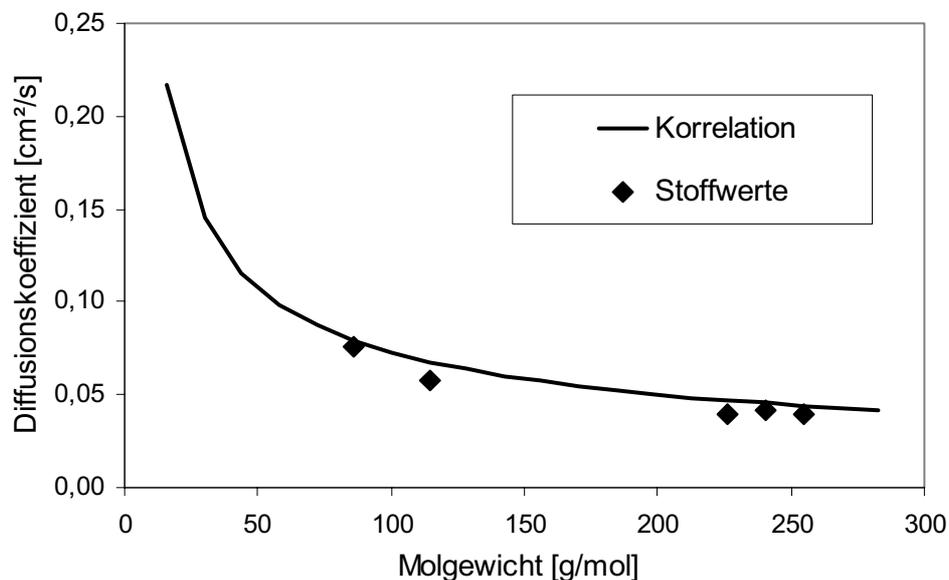


Bild 4.5: Diffusionskoeffizienten für n-Alkane

Am Beispiel von n-Alkanen, wie in Bild 4.5 dargestellt ist, zeigt diese Korrelation eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten aus Vargaftik [Var75].

4.6 Numerische Umsetzung

Zur Berechnung von Verdampfungsprozessen mit dem neuen Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen innerhalb des CFD-Codes KIVA-3V werden numerische Lösungsverfahren benötigt. Die zu lösenden Gleichungssysteme mit den entsprechenden Lösungsverfahren werden daher im Folgenden näher erläutert.

Die Berechnung der Molstromanteile der jeweiligen Teilgemische vom Tropfen in die Gasumgebung, wie bereits in Kapitel 4.2.2 ausführlich beschrieben, erfolgt über die Gleichungen (4.92) und (4.93).

$$\xi_1 + \xi_2 = 1 \quad (4.92)$$

$$\xi_2 = y_{F,2,R} + \frac{y_{F,2,R} - y_{F,2,\infty}}{(1 + B_1)^{\bar{D}_1/\bar{D}_2} - 1} \quad (4.93)$$

Dieses Gleichungssystem besteht aus zwei Unbekannten ξ_1 und ξ_2 sowie zwei voneinander unabhängigen Gleichungen. Somit wäre dieses Gleichungssystem lösbar. Da jedoch in der Spalding Transfer Number B_1 der Molstromanteil ξ_1 des ersten Teilgemisches enthalten ist, siehe Gleichung (4.25) in Kapitel 4.2.2, kann dieses Gleichungssystem nicht explizit gelöst werden. Daher wird das Newton'sche Nullstellenverfahren angewendet. Für eine detaillierte Beschreibung dieses Lösungsverfahrens sei auf [BHW03] verwiesen.

Weiterhin müssen zur Beschreibung des Verdampfungsprozesses im Folgenden aufgeführte Differentialgleichungen für die Zustandsänderungen in der flüssigen Phase gelöst werden. Mit Gleichung (4.94) wird die Tropfentemperaturänderung berechnet.

$$\frac{dT_{Tr}}{dt} = \frac{3}{c_L \hat{C}_{p,L} R} [\dot{q}_{conv} - \dot{n} \cdot \bar{h}_v] \quad (4.94)$$

Die Änderungen der jeweiligen Mittelwerte $\Theta_{L,j}$ ($j = 1, 2$) der beiden Verteilungsfunktionen werden mit Gleichung (4.95) bestimmt.

$$\frac{d\Theta_{L,j}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{x_j c_L R} \left[\Theta_{L,j} \xi_j - \Theta_{R,j} y_{F,j,R} + \frac{1}{B_j} (\Theta_{\infty,j} y_{F,j,\infty} - \Theta_{R,j} y_{F,j,R}) \right] \quad (4.95)$$

Zur Berechnung der Änderung der zweiten Momente $\Psi_{L,j}$ ($j = 1, 2$) beider Verteilungen, werden zwei weitere Differentialgleichungen benötigt, siehe Gleichung (4.96).

$$\frac{d\Psi_{L,j}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{x_j c_L R} \left[\Psi_{L,j} \xi_j - \Psi_{R,j} y_{F,j,R} + \frac{1}{B_j} (\Psi_{\infty,j} y_{F,j,\infty} - \Psi_{R,j} y_{F,j,R}) \right] \quad (4.96)$$

Schließlich müssen die Änderungen der Anteile $x_{F,j}$ ($j = 1, 2$) der Teilgemische in der flüssigen Phase am Gesamtgemisch berechnet werden, um zu jedem Zeitschritt eine genaue Aussage über die Zusammensetzung der Flüssigphase treffen zu können, siehe auch Gleichung (4.53) in Kapitel 4.2.4.

$$\frac{dx_{F,j}}{dt} = \frac{3\dot{n}}{c_L R} [x_{F,j} - \xi_{F,j}] \quad (4.97)$$

Bei allen sechs zu lösenden Gleichungen handelt es sich ausschließlich um gewöhnliche Differentialgleichungen, welche nur von der Zeit abhängig sind. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde analog zu [Pag03] ein Runge-Kutta-Verfahren 4.Ordnung [Fel01] zur Lösung der oben aufgeführten Differentialgleichungen angewandt.

Die sich aus den Zustandsänderungen der flüssigen Phase ergebende Tropfenradiusänderung wird in dieser Modellierung im Anschluss an das Runge-Kutta-Verfahren analog zu Gleichung (4.35) berechnet.

$$\frac{dR}{dt} = -\frac{R}{3c_{L,m}} \left[(c_{L,1} - c_{L,2}) \frac{dx_1}{dt} + x_1 \left(\frac{dc_{L,1}}{dt} - \frac{dc_{L,2}}{dt} \right) + \frac{dc_{L,2}}{dt} \right] - \frac{\dot{n}}{c_{L,m}} \quad (4.98)$$

4.7 Bewertung

In Kapitel 4 – Modellierung der Multikomponenten-Verdampfung – wird ein neues Verdampfungsmodell vorgestellt, welches auf dem Ansatz der kontinuierlichen Thermodynamik zur Abbildung von Multikomponenten-Kraftstoffen basiert. Die im Kraftstoff enthaltenen Komponenten werden in diesem Modell nicht durch die Summe diskreter Einzelkomponenten hinterlegt, sondern als kontinuierliches Gemisch mittels Verteilungsfunktion abgebildet. Die Modellbasis sowie die Leistungsumfänge des entwickelten Multikomponenten-Verdampfungsmodells werden anhand der aufgeführten Punkte nochmals zusammengefasst:

- Das Verdampfungsmodell basiert auf der Kopplung zweier Verteilungsfunktionen. Mit jeder Funktion kann ein separates kontinuierliches Gemisch beschrieben werden. Diese Modellstruktur ermöglicht es, mit jeder einzelnen Verteilung jeweils ein Gemisch homologer Komponenten abzubilden. Es können daher Multikomponenten-Gemische, bestehend aus zwei verschiedenen homologen Gruppen (z.B. Alkane, Aromaten), modelliert werden.
- Mit dem verwendeten Ansatz können sowohl breitbandige als auch schmalbandige aber auch schwer- oder leichtsiedende Kraftstoffe durch Variation der Form und Lage der Verteilungsfunktion abgebildet werden. Darüber hinaus ist jeweils durch Veränderung der Form einer Verteilungsfunktion auch eine Einzelkomponente darstellbar.
- Es findet im Gegensatz zu Einzelkomponenten-Modellen eine zeitliche Änderung der Zusammensetzung von Flüssig- und Gasphase statt.
- Die Zusammensetzungen und Anteile der jeweiligen Teilgemische in flüssiger und gasförmiger Phase sind zu jeder Zeit und an jedem Ort bestimmbar.
- Die benötigten Stoffeigenschaften sind mittels Korrelationen für jedes Teilgemisch separat hinterlegt.

Somit bietet das entwickelte Multikomponenten-Verdampfungsmodell die benötigten Freiheitsgrade, um verschiedene konventionelle, wie synthetische Kraftstoffe untersuchen zu können. Das Modell liefert zudem für eine detaillierte Modellierung nachfolgender Prozesse (Zündung, Verbrennung) die notwendigen Ausgangsparameter.

5 Validierung des Verdampfungsmodells

Um die Allgemeingültigkeit des im Rahmen der vorliegenden Arbeit entwickelten Verdampfungsmodells für Multikomponentenkraftstoffe nachzuweisen, werden verschiedene Validierungsrechnungen durchgeführt. Den ersten Abschnitt dieser Berechnungen bilden Untersuchungen zur Verdampfung von Einzeltropfen. Im zweiten Abschnitt erfolgen Berechnungen einfacher Einspritzvorgänge. Die Ergebnisse dieser Simulationsrechnungen werden mit parallel durchgeführten experimentellen Einspritzstrahluntersuchungen an einer schnellen Kompressionsmaschine (Einhubtriebwerk) abgeglichen.

5.1 Untersuchungen an Einzeltropfen

Die Berechnungen zur Verdampfung von Einzeltropfen unterschiedlicher Zusammensetzung dienen dazu, das neu entwickelte Modell mit zwei Verteilungsfunktionen (im Weiteren: MK-2VT) bezüglich seiner physikalischen und mathematisch-numerischen Richtigkeit durch Überprüfung der Plausibilität der Ergebnisse zu validieren.

Als Referenz für die Einzeltropfenberechnungen mit dem neu entwickelten Verdampfungsmodell, wird das von Pagel [Pag03] entwickelte Verdampfungsmodell herangezogen. Dieses Modell basiert auf einer Verteilungsfunktion zur Kraftstoffabbildung. Eine grundlegende Funktionsüberprüfung dieses Modells findet sich in [Pag03]. Darüber hinaus zeigt [Pag03] einen ausführlichen Vergleich des Ein-Verteilungsfunktionen-Modells (im Weiteren: MK-1VT) mit dem im CFD-Code KIVA-3V [Ams97] implementierten Standard-Verdampfungsmodell (STD-Modell).

Der Schwerpunkt der Untersuchungen wird daher auf die Variation der Zusammensetzung von Kraftstoffgemischen und deren Auswirkungen auf die Verdampfungseigenschaften gelegt. Es werden die allgemeine Funktionsfähigkeit des neuen Verdampfungsmodells mit zwei Verteilungsfunktionen nachgewiesen, sowie die erweiterten Möglichkeiten zur Abbildung verschiedener Zusammensetzungen von Kraftstoffen aufgezeigt. Es ist zu beachten, dass über die Betrachtung von Gemischen mehrerer Komponenten hinaus, auch die in Kapitel 4 beschriebene Fähigkeit des Modells zur Abbildung von Einzelkomponenten, nachgewiesen wird.

Die Auswertungen der Einzeltropfenberechnungen erfolgen nach den Kriterien der Verdampfungsdauer, dem Tropfentemperaturverlauf und der Veränderung der Zu-

sammensetzung sowohl des Tropfens als auch des verdampften Anteils in der Gasphase während des Verdampfungsvorganges. Dieses wird durch den zeitlichen Verlauf der Mittelwerte des jeweils abgebildeten Einzelgemisches in der Flüssig- und Gasphase beschrieben. Zusätzlich zur Verdampfungsdauer wird die Verringerung der Tropfenoberfläche pro Zeiteinheit dargestellt. Vereinfachend wird hierfür das Quadrat des Tropfendurchmessers über der Zeit aufgetragen. Die Zeiträume zwischen Ausgangs- und Endwert dieser Verläufe beschreiben dabei die Verdampfungsdauer des jeweils betrachteten Tropfens.

Die Einzeltropfenberechnungen werden unter den in Tabelle 5.1 aufgeführten Randbedingungen durchgeführt. Bei der Wahl dieser Bedingungen, insbesondere bei den Temperatur- und Druckbedingungen in der Gasumgebung (Luft), ist darauf zu achten, dass keine kritischen Verdampfungsfälle entstehen, um den Tropfen über die gesamte Verdampfungsphase beobachten zu können.

| Einzeltropfen | |
|-----------------------------|------------------|
| Ausgangsdurchmesser: | 20 μm |
| Ausgangstemperatur: | 313,15 K (40°C) |
| Gasumgebung (Luft) | |
| Temperatur: | 753,15 K (480°C) |
| Druck: | 3 MPa (30 bar) |
| Dampfkonzentration bei t=0: | 0% |

Tabelle 5.1: Randbedingungen der Einzeltropfenuntersuchungen

Die Validierungsrechnungen zur Verdampfung von Einzeltropfen werden hinsichtlich der nachfolgend beschriebenen Gesichtspunkte durchgeführt.

- Vergleich mit dem MK-1VT-Modell [Pag03] und dem STD-Modell.
- Berechnung von Kraftstofftropfen bestehend aus zwei Teilgemischen.
- Berechnung von Kraftstofftropfen bestehend aus einem Teilgemisch und einer Einzelkomponente.
- Verwendung von Teilgemischen und Einzelkomponenten verschiedener homologer Gruppen (Alkane, Aromaten).

Aus diesen Rahmenbedingungen gehen insgesamt sechs verschiedene Einzeltropfen-Validierungsfälle hervor, die im Anschluss ausführlich dargestellt werden.

Im **ersten Schritt** erfolgt ein Vergleich des neuen Modells (MK-2VT) mit den bisher vorhandenen Verdampfungsmodellen (MK-1VT, STD). Die flüssige Phase setzt sich hierbei aus einem n-Alkan-Gemisch zusammen, mit welchem das Verdampfungsverhalten von Dieseldieselkraftstoff wiedergegeben wird. In der Literatur ist in diesem Zusammenhang die Verteilungsfunktion nach Lippert [Lip99] bekannt, siehe Tabelle 5.2. Eine weitere Verteilungsfunktion wurde im Rahmen dieser Arbeit über die Anpassung an die Siedekurve von Dieseldieselkraftstoff bestimmt. Diese Vorgehensweise ist im Anhang näher erläutert. Darüber hinaus sind alle im weiteren verwendeten Verteilungsparameter im Anhang nochmals aufgelistet.

| Verteilungsparameter | Lippert [Lip99] | Dieseldieselverteilung | STD-Modell |
|----------------------|-----------------|------------------------|---------------------|
| α | 18,5 | 14,0 | $C_{14}H_{30}$ |
| β | 10,0 | 14,6 | Molgewicht [g/mol]: |
| γ | 0,0 | 0,0 | 198,4 |
| Θ [g/mol] | 185,0 | 204,4 | |
| σ | 43,0 | 54,6 | |

Tabelle 5.2: Verteilungsparameter und Stoffdaten des ersten Validierungsfalls

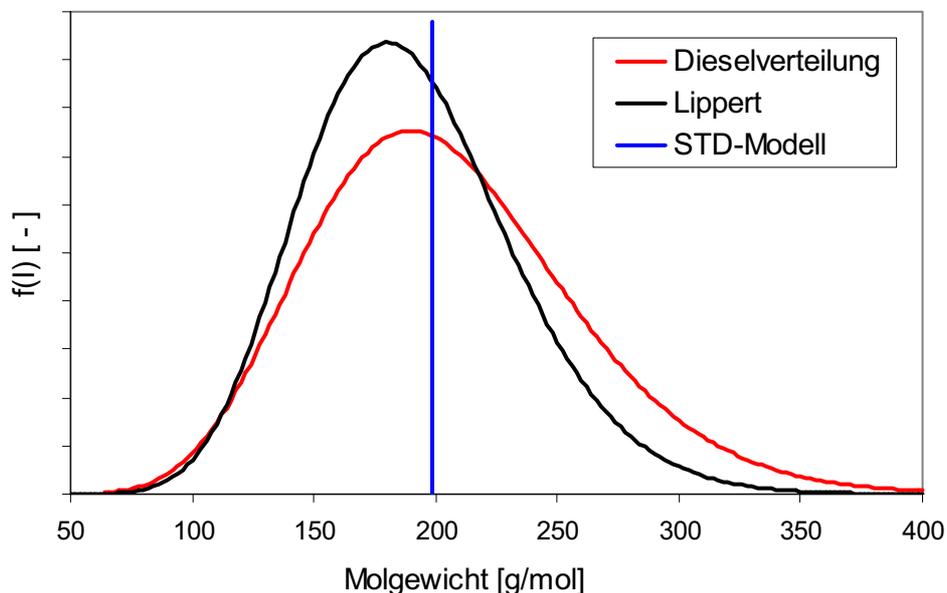


Bild 5.1: Verteilungsfunktionen für konventionellen Dieseldieselkraftstoff

Im STD-Modell ist die Einzelkomponente Tetradekan als Ersatzkraftstoff für Diesel hinterlegt. Die beiden Verteilungen für Dieseldieselkraftstoff sowie die Einzelkomponente Tetradekan sind in Bild 5.1 aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass die Funktion von Lippert [Lip99] geringere Anteile schwerflüchtiger Komponenten einschließt.

Mit der als „Dieselverteilung“ benannten neuen Funktion wurden sowohl mit dem MK-1VT-Modell als auch mit dem neuen MK-2VT-Modell Berechnungen durchgeführt. Beim MK-2VT-Modell haben beide Verteilungsfunktionen jeweils dieselbe Dieselverteilung abgebildet, und es wurden die Anteile dieser durch die beiden Verteilungen dargestellten Einzelgemische von 30:70 über 50:50 bis 70:30 variiert. Als Ergebnis zeigt sich, dass sowohl das MK-1VT- als auch das MK-2VT-Modell (mit allen drei Anteilvariationen) denselben Verdampfungsverlauf aufweisen. In Bild 5.2 liegen die Kurvenverläufe der Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme daher genau übereinander und sind durch den rot eingefärbten Verlauf gekennzeichnet. Auch eine Variation des umgebenden Gasdrucks auf 1 bar zeigt dasselbe Ergebnis.

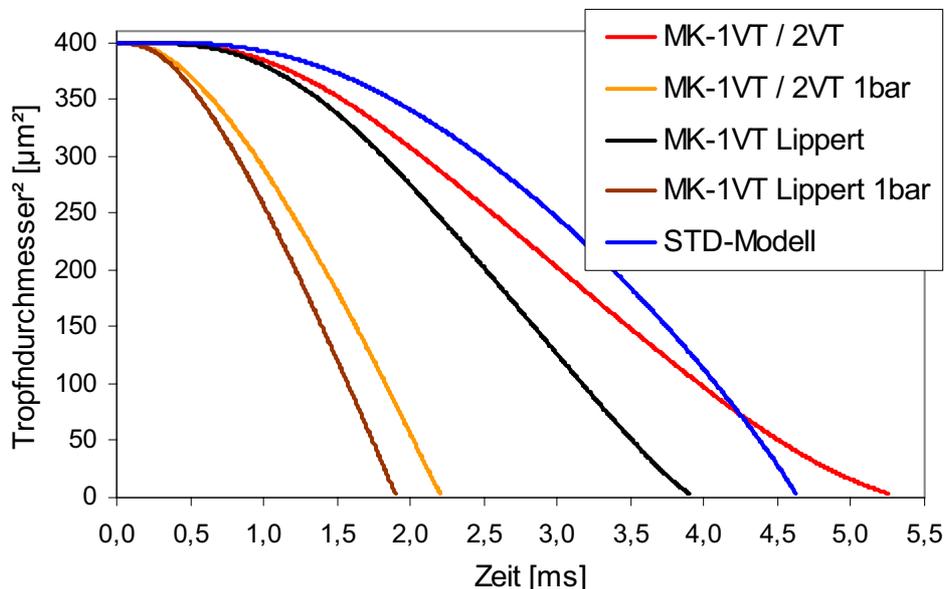


Bild 5.2: Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme über der Zeit

Zum Vergleich sind in Bild 5.2 außerdem der Verlauf der Rechnung mit der Verteilung von Lippert [Lip99] sowie des STD-Modells aufgetragen. Wie an der Zusammensetzung (Bild 5.1) bereits zu erkennen ist, stellt die Verteilung von Lippert ein leichteres Gemisch dar, was zu der erkennbar kürzeren Verdampfungszeit führt. Die Einzelkomponente Tetradekan des STD-Modells verdampft zu Beginn deutlich langsamer als die „Dieselverteilung“. Gegen Ende des Verdampfungsprozesses kehrt sich dieses Verhalten um. Dieses Verhalten entsteht durch die in der Dieselverteilung enthaltenen leichter und schwerer flüchtigen Komponenten im Vergleich zur Einzelkomponente Tetradekan des STD-Verdampfungsmodells. Die zugehörigen Tropfentemperaturverläufe sind in Bild 5.3 dargestellt. Es zeigt sich ein paralleler Verlauf im Anstieg der Tropfentemperatur der Dieselverteilung und der Verteilung von Lippert

bis ca. 3,0 ms. Aufgrund des höheren Anteils schwerer Komponenten in der Dieselverteilung, dauert die Aufheizphase dieses Tropfens länger an. Wie es bei den Berechnungen mit 1bar sowie im Ansatz auch bei der Verteilung von Lippert bei 30 bar zu beobachten ist, steigt die Temperatur zum Ende der Verdampfungszeit deutlich an. Das erklärt sich dadurch, dass infolge des kleiner werdenden Tropfens für die relativ zur Oberfläche geringe Tropfenmasse mehr Energie zur Verfügung steht und die Temperatur dann stark ansteigen kann [Pag03].

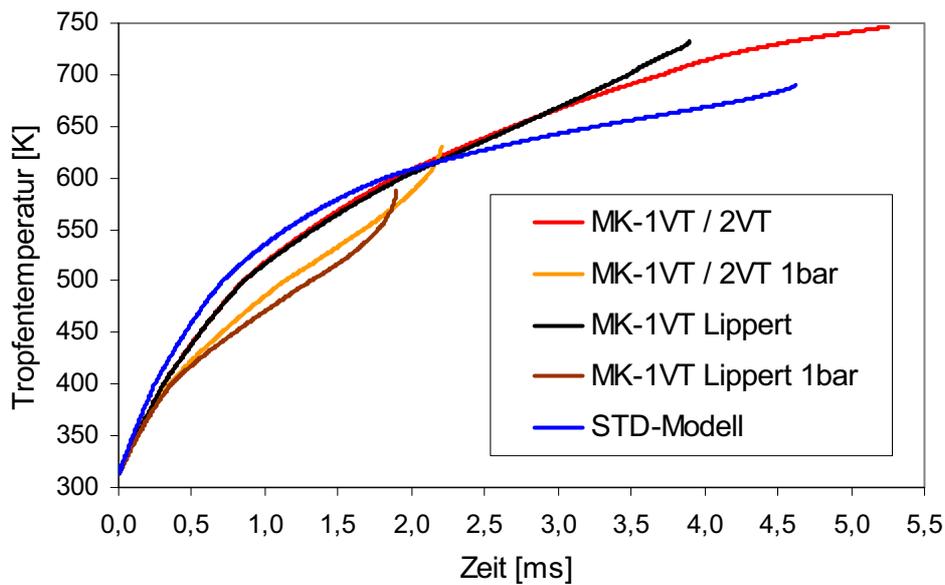


Bild 5.3: Tropfentemperaturverläufe der MK-1/2VT-Modelle und des STD-Modells

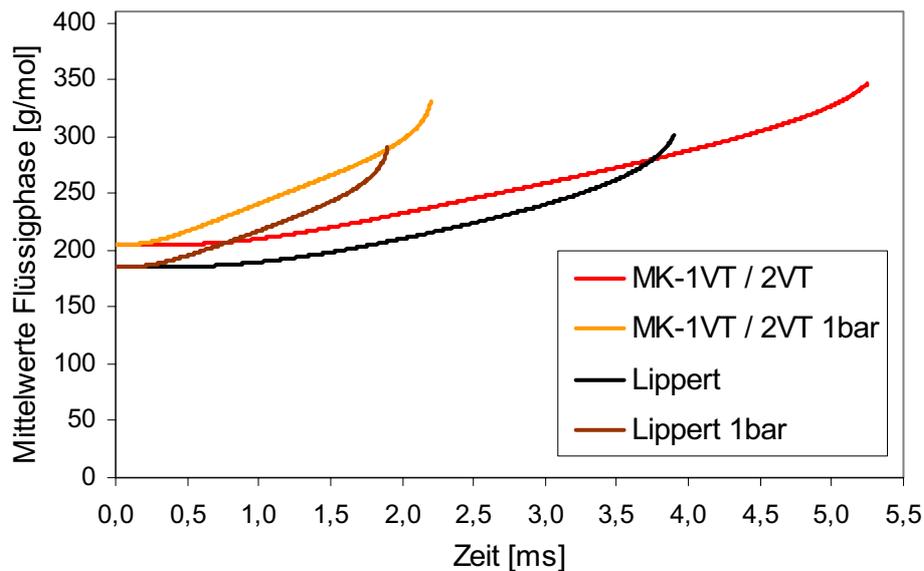


Bild 5.4: Mittelwerte der Flüssigphase der MK-1/2VT Modelle

Bild 5.4 und 5.5 zeigen die zeitlichen Verläufe der Mittelwerte des flüssigen Tropfens und der Gasumgebung. Mit fortlaufendem Verdampfungsprozess erhöhen sich die Mittelwerte der Flüssigphase, da zuerst leichtsiedende Komponenten mit niedrigem Molgewicht verdampfen. Die Mittelwerte der Gasphase gehen von niedrigen Molgewichten zuerst verdampfter Komponenten aus und nähern sich mit fortschreitendem Verdampfungsverlauf den Ausgangswerten der flüssigen Phase an. Dabei ergibt sich am Ende des Verdampfungs Vorganges, unabhängig vom Umgebungsdruck, immer die selbe Zusammensetzung (Mittelwert) in der Gasphase, siehe Bild 5.5.

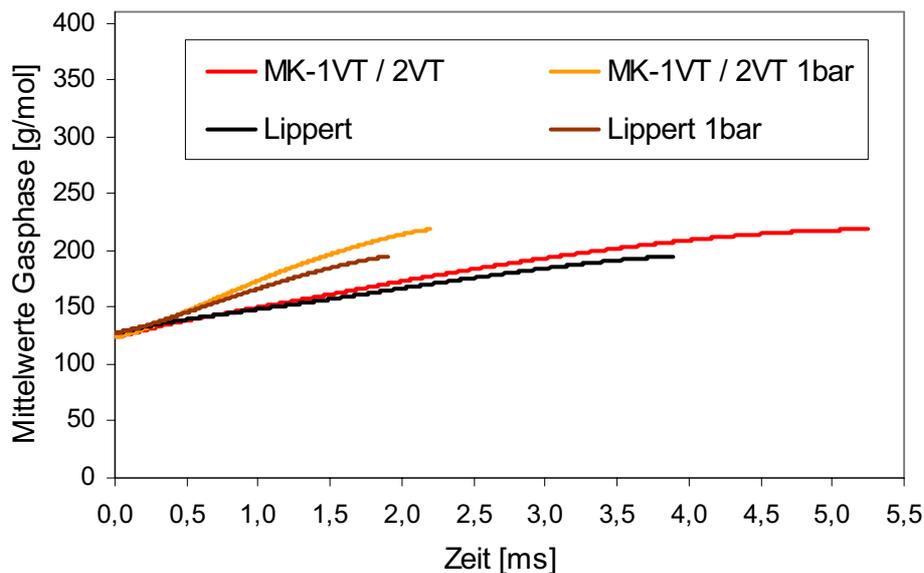


Bild 5.5: Mittelwerte der Gasphase der MK-1/2VT Modelle

Im **zweiten Validierungsfall** wird die Dieselverteilung aus Bild 5.1 in zwei Teilfunktionen zerlegt. Die erste Verteilung stellt ein Gemisch leichtflüchtiger, die zweite Verteilung ein Gemisch schwerflüchtiger Komponenten dar, siehe Bild 5.6. Die Summe der beiden Einzelfunktionen ergibt annähernd wieder die Form und somit auch die Zusammensetzung der Dieselverteilung. Die Unterschiede zwischen der Ausgangsfunktion (Bild 5.6, rote Kurve) und der Summenfunktion (Bild 5.6, blaue Kurve) liegen in den mathematischen Eigenschaften der verwendeten Gamma-Verteilung und ergeben sich aus der Asymmetrie zwischen den aufsteigenden und abfallenden Kurventeilen der beiden Einzelfunktionen. Aufgrund dieser Asymmetrie kann die Summe beider Einzelfunktionen keine vollständige Übereinstimmung mit der Ausgangsfunktion ergeben. Lediglich in einem Sonderfall, in dem sowohl die Ausgangsfunktion als auch die beiden Einzelfunktionen symmetrische Verläufe aufweisen würden, könnte eine vollständige Übereinstimmung erreicht werden.

Wie bereits in Kapitel 2.3 erläutert, ist die Gamma-Verteilung auf den Flächeninhalt eins normiert. In der Darstellung der Verteilungsfunktionen in Bild 5.6 gilt es jedoch zu beachten, dass die beiden Teilfunktionen jeweils auf den Flächeninhalt 0,5 reduziert sind, um in Summe die blau eingefärbte Funktion wiederum mit dem Flächeninhalt eins darzustellen. Nur so kann die Summenfunktion direkt mit der Ausgangsfunktion verglichen werden.

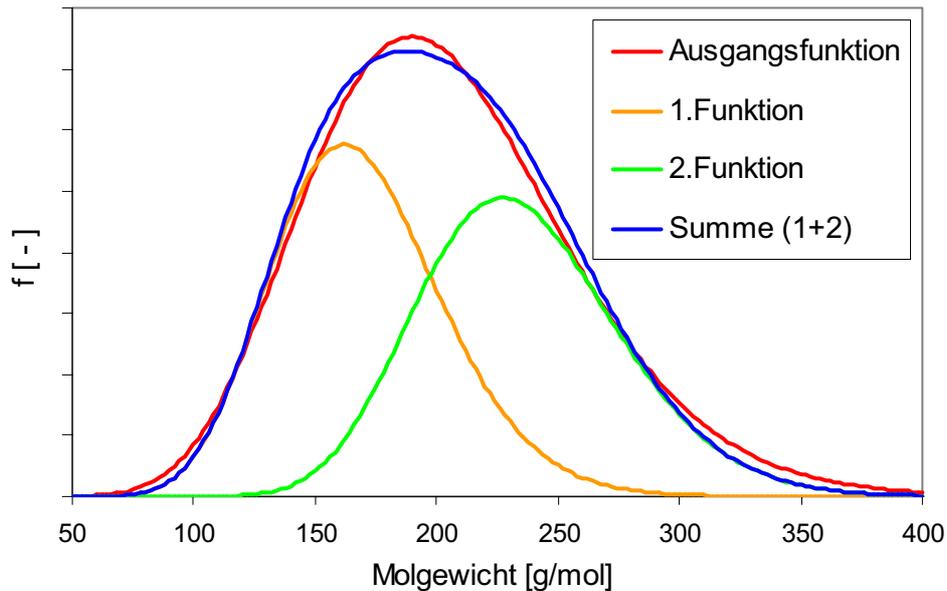


Bild 5.6: Aufspaltung der Dieselverteilung in leichte und schwere Verteilung

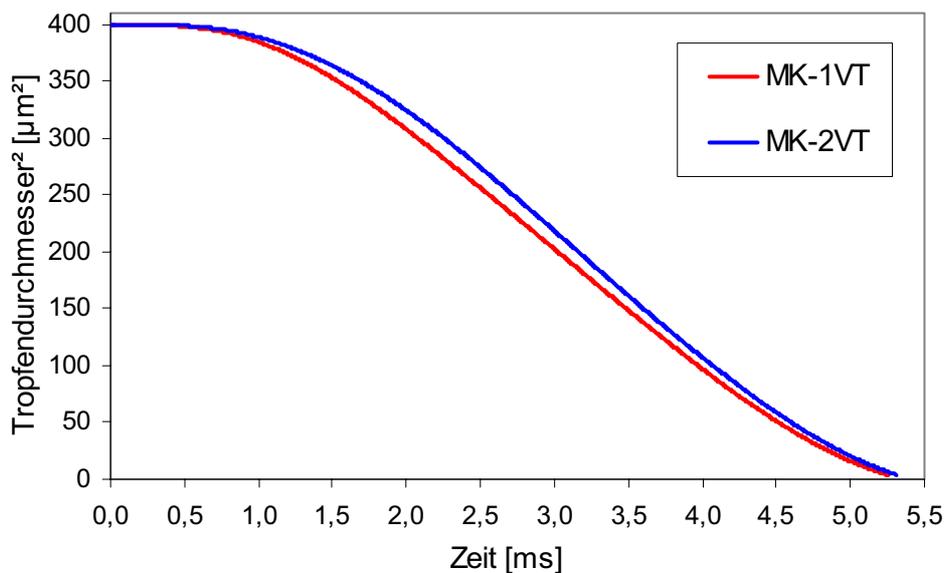


Bild 5.7: Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme über der Zeit

Der Einzeltropfen, bestehend aus den beiden Einzelgemischen, wird mit dem MK-2VT-Modell, die Dieselverteilung mit dem MK-1VT-Modell abgebildet. Der Vergleich

dieser beiden Einzeltropfenrechnungen zeigt in der Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme in Bild 5.7 sowie im Tropfentemperaturverlauf, siehe Bild 5.8, ein nahezu übereinstimmendes Verhalten.

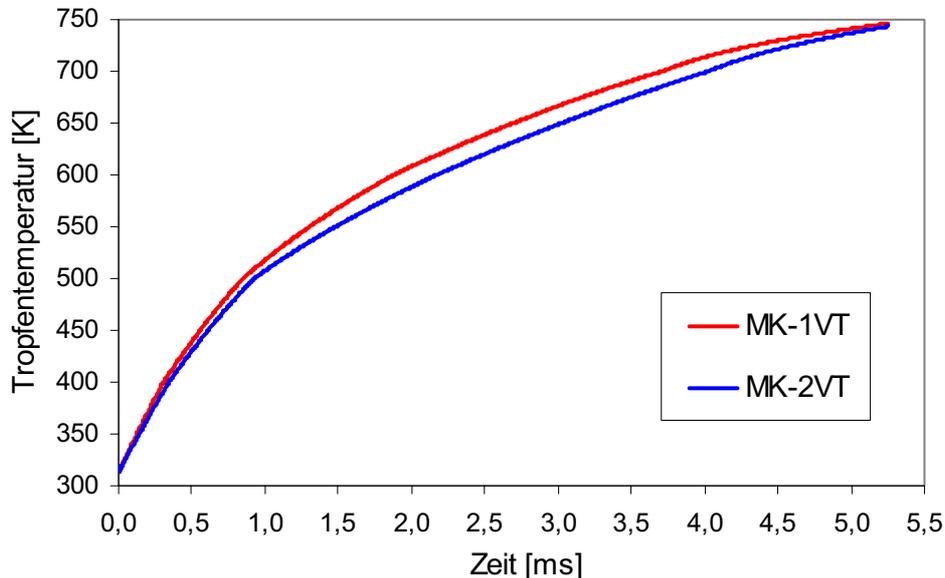


Bild 5.8: Tropfentemperaturverläufe des MK-1VT- und MK-2VT-Modells

Anhand dieses Validierungsfalls wird daher die grundsätzliche Funktionsfähigkeit des neuen Multikomponenten-Verdampfungsmodells deutlich, dass Mischungen unterschiedlicher Einzelgemische im Vergleich zu einem ähnlichen Gesamtgemisch zutreffend wiedergegeben werden.

Der **dritte Validierungsfall** beschreibt die Zumischung eines leichtflüchtigen Alkangemisches, dem synthetischen Kraftstoff „L1“, zur bereits beschriebenen Dieselverteilung unter Verwendung des MK-2VT-Modells. In Tabelle 5.3 sind die Parameter der beiden Verteilungen aufgeführt. Die Mittelwerte der Funktionen verdeutlichen die Leichtflüchtigkeit von L1, zudem fällt die im Vergleich zur Dieselverteilung sehr kleine Standardabweichung auf, siehe auch Bild 5.9.

| Verteilungsparameter | Dieselverteilung | L1 |
|----------------------|------------------|-------|
| α | 14,0 | 131,5 |
| β | 14,6 | 0,8 |
| γ | 0,0 | 38,0 |
| Θ [g/mol] | 204,4 | 142,4 |
| σ | 54,6 | 9,1 |

Tabelle 5.3: Verteilungsparameter für Dieselkraftstoff und L1

In den Einzeltropfenberechnungen dieses Validierungsfalls wird darüber hinaus der Anteil des zugemischten Kraftstoffs L1 zwischen 30% und 70% variiert. Die Ergebnisse bezüglich Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme und Temperaturverlauf sind in den Abbildungen 5.10 und 5.11 dargestellt.

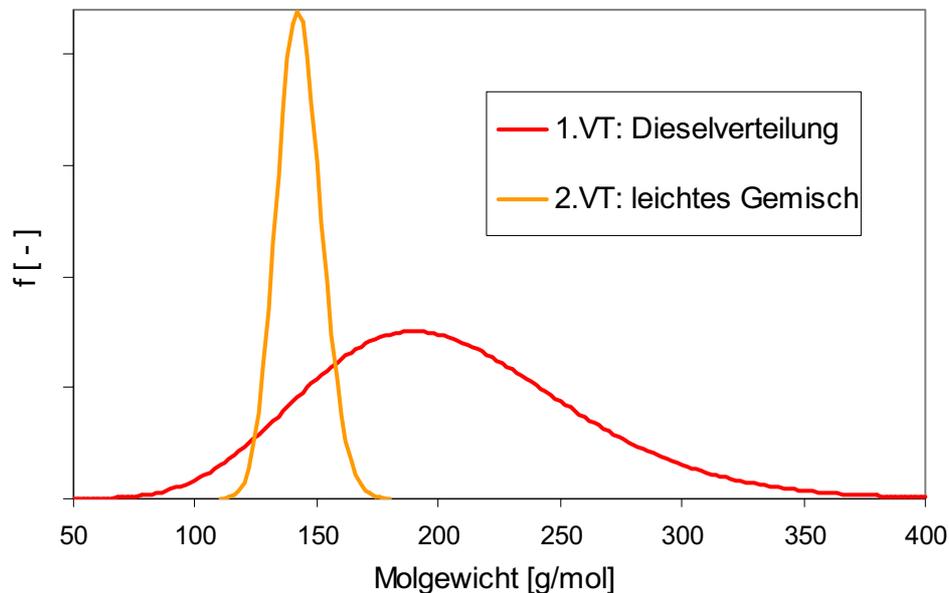


Bild 5.9: Dieselverteilung (rot), leichtflüchtiges Alkangemisch (orange)

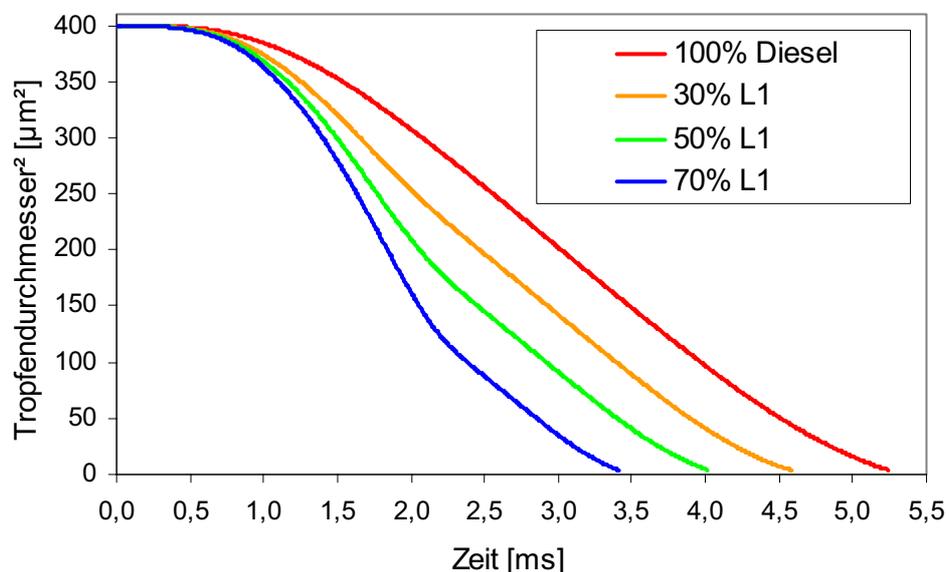


Bild 5.10: Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme über der Zeit

Aufgrund der Zumischung von leichtflüchtigem L1 zum Dieseldieselkraftstoff reduziert sich die Verdampfungszeit des gesamten Tropfens. Mit zunehmendem Anteil von L1 verstärkt sich dieser Effekt. Mit Beginn der Verdampfung reduziert sich zuerst der Anteil des leichtflüchtigen L1 sowie die leichten Komponenten der Dieselverteilung,

was zu dem starken Abfall im Verlauf der Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme führt (Bild 5.10). Nach dem vollständigen Verdampfen von L1 gleicht sich die Kurve dem Verlauf der 100% Diesel-Kurve an. Dieser Vorgang ist bei allen drei zugemischten Anteilen von L1 zu beobachten und prägt sich mit zunehmendem Anteil von L1 deutlicher aus. Im Bereich bis zu 1 ms überdecken sich die Temperaturverläufe nahezu vollständig (Bild 5.11). Es schließt sich eine Phase geringeren Temperaturanstiegs an. Im weiteren Verlauf kommt es zu einem starken Temperaturanstieg, welcher sich mit höherem Anteil von L1 verstärkt. Dieser ist auf den hohen Anteil schwerer Bestandteile sowie auf die mit steigendem Anteil von L1 geringere restliche Tropfenmasse zum Zeitpunkt des Temperaturanstiegs bei ca. 2 ms zurückzuführen.

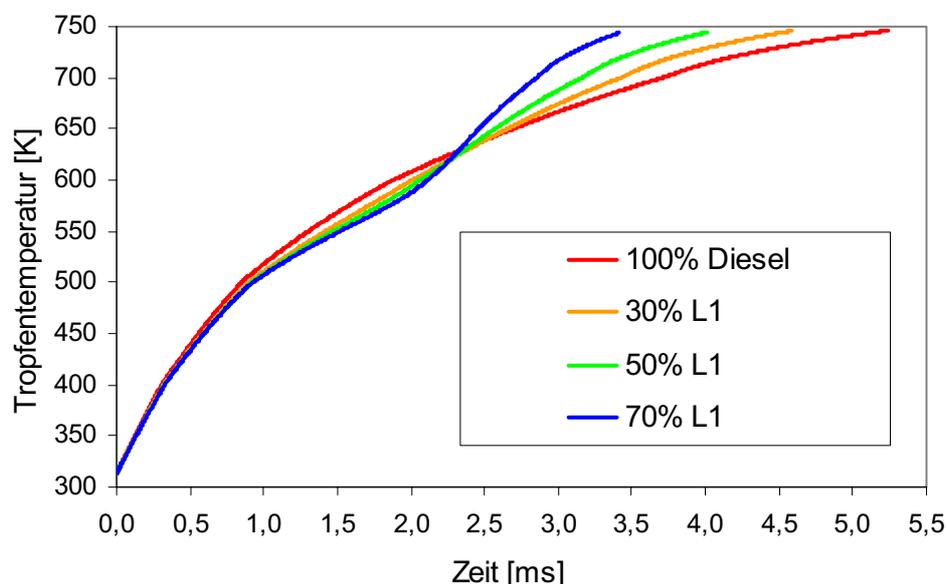


Bild 5.11: Tropfentemperaturverläufe der Diesel/L1-Gemische

Die in den Abbildungen 5.12 und 5.13 dargestellten Mittelwerte der beiden Verteilungsfunktionen für Flüssig- und Gasphase zeigen ebenfalls die Einflüsse des L1-Anteils. Die Mittelwert-Verläufe von Diesel (1.VT) verschieben sich mit steigendem Anteil von L1 zu kürzeren Verdampfungszeiten. Die Verteilungsfunktion von L1 (2.VT) ändert sich nach dem vollständigen Verdampfen von L1 nicht mehr, was sich durch die konstanten Mittelwerte von Flüssig- und Gasphase äußert.

Weiterhin ist zu beobachten, dass mit steigendem L1-Anteil im Ausgangstropfen minimal niedrigere Tropfenendtemperaturen (Bild 5.11) und Endmittelwerte der Flüssigphase der Dieselverteilung (Bild 5.12: 1. VT) erreicht werden. Zum Ende des Verdampfungsprozesses sind die Tropfen mit ursprünglich hohem L1-Anteil bereits deutlich kleiner. Es sind jeweils entsprechend weniger schwerflüchtige Komponenten

der Dieselverteilung in den Einzeltröpfchen enthalten, so dass zur Verdampfung dieser restlichen schweren Komponenten jeweils auch geringere Wärmemengen erforderlich sind. Die Tröpfchen haben aufgrund der niedrigeren benötigten Wärmemengen daher jeweils kürzere restliche Verweildauern im Brennraum und erreichen somit die dargestellten niedrigeren Mittelwerte und Endtemperaturen in der flüssigen Phase.

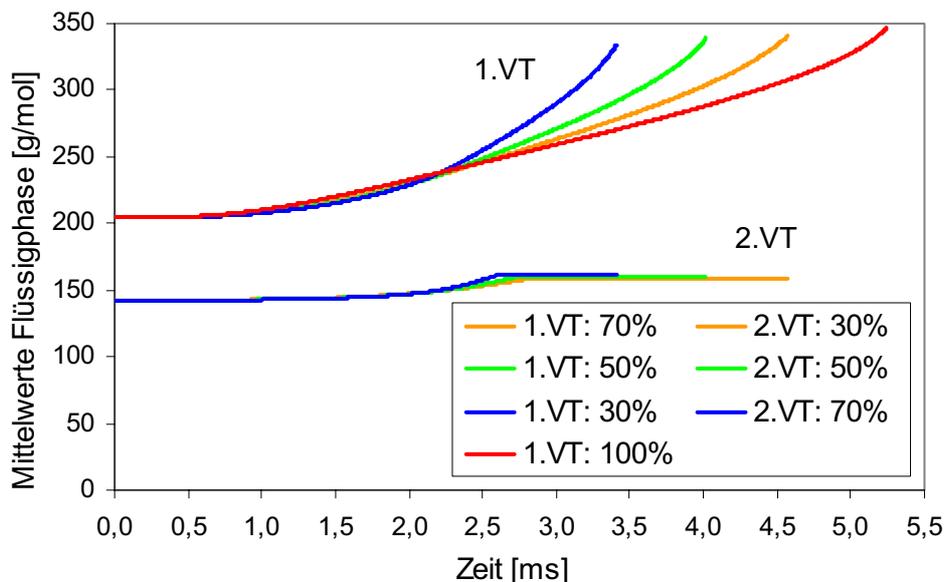


Bild 5.12: Mittelwerte der Flüssigphase von Dieselkraftstoff und L1

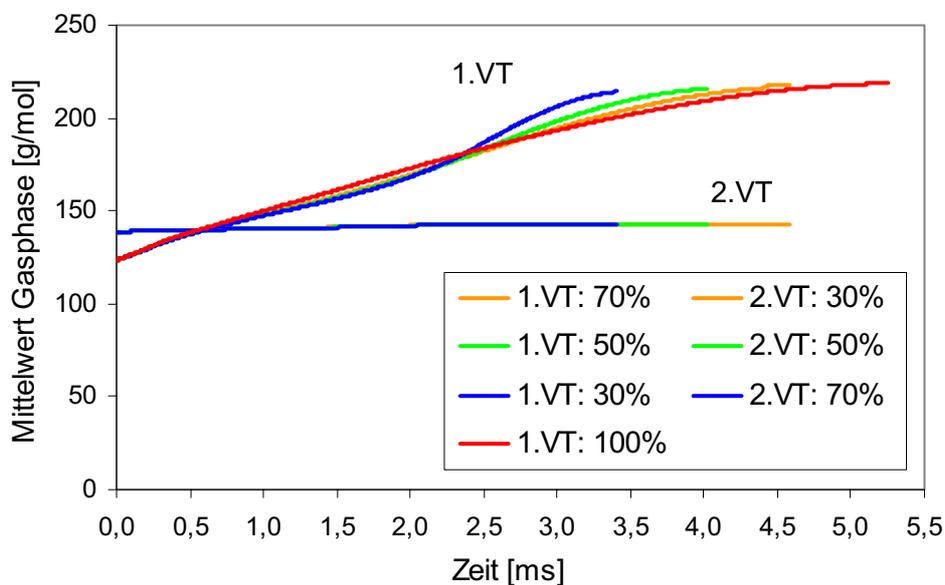


Bild 5.13: Mittelwerte der Gasphase von Dieselkraftstoff und L1

Der **vierte Validierungsfall** beinhaltet die Zumischung einer Einzelkomponente zur Dieselverteilung. Es werden in drei verschiedenen Rechnungen nacheinander n-Hexan, n-Dodekan und n-Hexadekan jeweils mit einem Massenanteil von 50% der

Dieselverteilung zugemischt. Die Verteilungsparameter der Dieselverteilung sowie die Molgewichte der Einzelkomponenten sind in Tabelle 5.4 aufgeführt.

| Verteilungsparameter | Dieselverteilung | Einzelkomponenten (n-Alkane) | | |
|----------------------|------------------|------------------------------|----------------|----------------|
| α | 14,0 | C_6H_{14} | $C_{12}H_{26}$ | $C_{16}H_{34}$ |
| β | 14,6 | Molgewicht [g/mol]: | | |
| γ | 0,0 | 86,2 | 170,3 | 226,4 |
| Θ [g/mol] | 204,4 | | | |
| σ | 54,6 | | | |

Tabelle 5.4: Verteilungsparameter und Einzelkomponenten

Mit diesem Validierungsfall wird gezeigt, dass mit dem MK-2VT-Modell auch Einzelkomponenten darstellbar sind. Die Formparameter einer Verteilungsfunktion werden dabei so variiert, dass sich ein Peak mit entsprechendem Molgewicht ausbildet (siehe Kapitel 4.1). In Bild 5.14 sind neben der Dieselverteilung die untersuchten Einzelkomponenten schematisch dargestellt. In mathematisch richtiger Betrachtungsweise sind die Peaks unendlich hoch, da die Fläche unter der Verteilungsfunktion auf eins normiert ist.

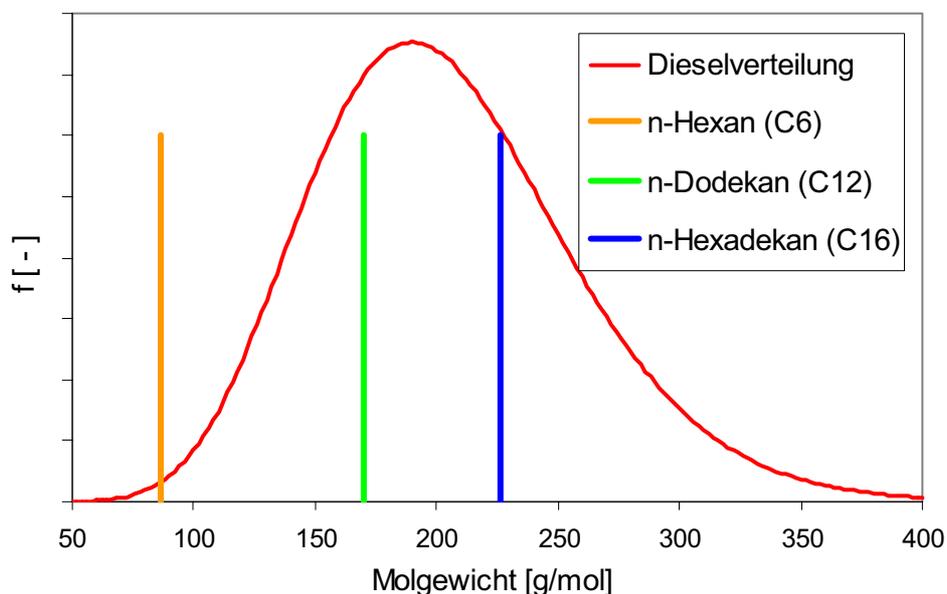


Bild 5.14: Dieselverteilung, Einzelkomponenten n-Hexan, n-Dodekan, n-Hexadekan

Die Zumischung von 50 % Hexan zur Dieselverteilung bewirkt eine anfangs schlagartige Verdampfung des Einzeltropfens. Ab dem Zeitpunkt zu dem der Anteil Hexan

vollständig verdampft ist, siehe Bild 5.15, stellt sich in der Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme der für die Dieselverteilung charakteristische Verlauf ein.

Bei einer Zumischung von Dodekan ist grundsätzlich der gleiche Effekt zu erkennen. Es stellt sich jedoch aufgrund des schwerflüchtigeren Dodekans eine geringere Verdampfungsrate ein. Für die Mischung Diesel mit Hexadekan ergibt sich zu Verdampfungsbeginn eine geringere Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme. Hexadekan ist schwerer flüchtig als der Anfangsmittelwert der Dieselverteilung und reduziert somit den Anteil an leichtflüchtigen Komponenten im Gesamtgemisch. Da die reine Dieselverteilung jedoch einen weitaus höheren Anteil schwerer Komponenten als das Diesel/Hexadekan-Gemisch enthält, ergibt sich auch für diese Kraftstoffmischung im Vergleich zu 100% Diesel eine kürzere Verdampfungszeit.

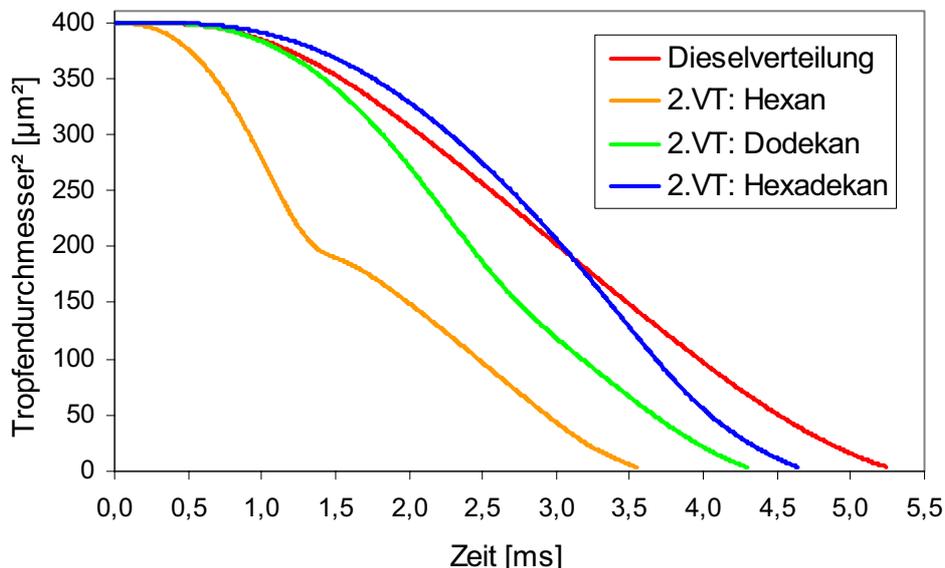


Bild 5.15: Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme über der Zeit

Im Vergleich der Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme Verläufe aus Bild 5.15 mit den Anteilverläufen der Einzelkomponenten, siehe Bild 5.16, zeigt sich eine Übereinstimmung der Zeitpunkte, an denen die Einzelkomponenten vollständig verdampft sind. An den Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme Verläufen zeigt sich dieser Zeitpunkt durch die Angleichung der Kurven an den Verlauf reinen Dieselkraftstoffs. Beim Vergleich der Tropfentemperaturverläufe aus Bild 5.17 zeigt sich für die Diesel/Hexan-Mischung infolge der deutlich größeren Flüchtigkeit von Hexan im Gegensatz zu den anderen Einzelkomponenten, ein zu Beginn der Verdampfung deutlich geringerer Temperaturanstieg. Dieser Vorgang lässt sich durch das schnelle Ausdamp-

fen von Hexan bereits bei niedriger Tropfentemperatur erklären. Es wird somit der überwiegende Teil der zugeführten Energie für die Hexan-Verdampfung verwendet.

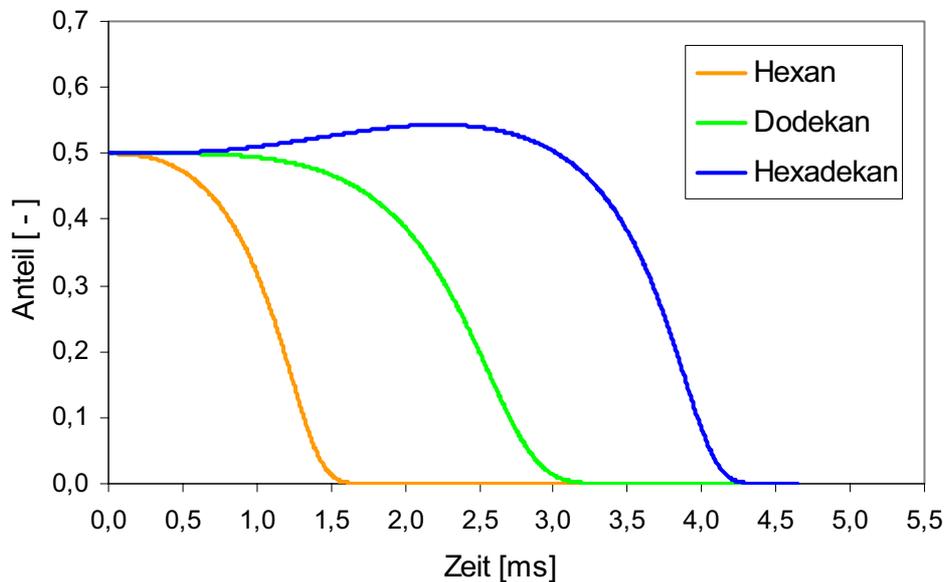


Bild 5.16: Anteile der Einzelkomponenten am Gesamtgemisch

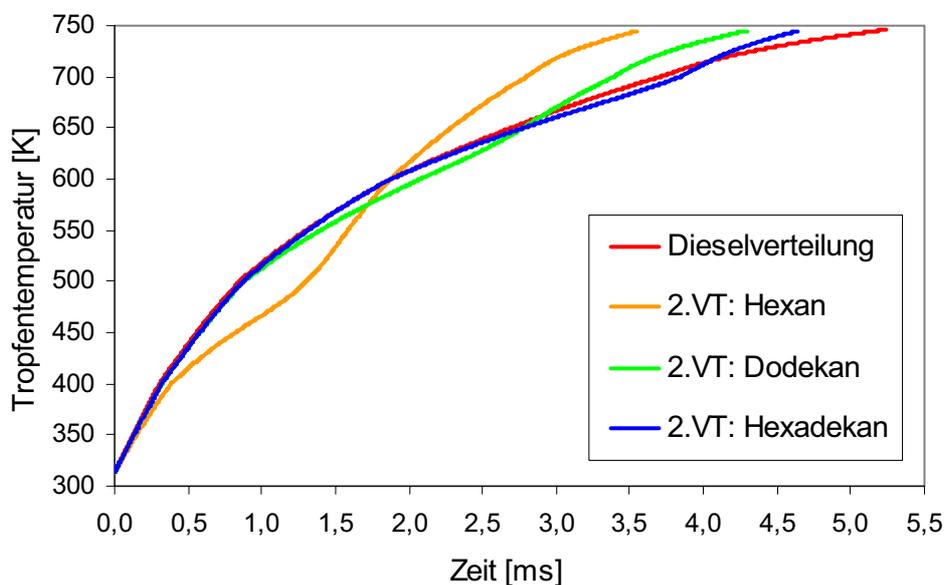


Bild 5.17: Tropfentemperaturverläufe der Diesel/Einzelkomponenten-Gemische

Im **fünften Validierungsfall** wird konventioneller Dieselmotorkraftstoff mit dem MK-2VT-Modell durch zwei Teilgemische abgebildet. Zusätzlich zur Gruppe der Alkane wird hierbei auch der Anteil an aromatischen Kohlenwasserstoffen in realem Dieselmotorkraftstoff berücksichtigt, siehe auch Kapitel 4.1. Für die beiden Verteilungsfunktionen

zur Darstellung des Alkan- und Aromatengemisches gelten die in Tabelle 5.5 aufgeführten Parameter.

| Verteilungsparameter | Dieselverteilung | Alkanverteilung | Aromatenverteilung |
|----------------------|------------------|-----------------|--------------------|
| α | 14,0 | 18,0 | 10,0 |
| β | 14,6 | 12,5 | 4,4 |
| γ | 0,0 | 0,0 | 78,2 |
| Θ [g/mol] | 204,4 | 225,0 | 122,2 |
| σ | 54,6 | 53,0 | 13,9 |

Tabelle 5.5: Parameter der Diesel-, Alkan- und Aromatenverteilung

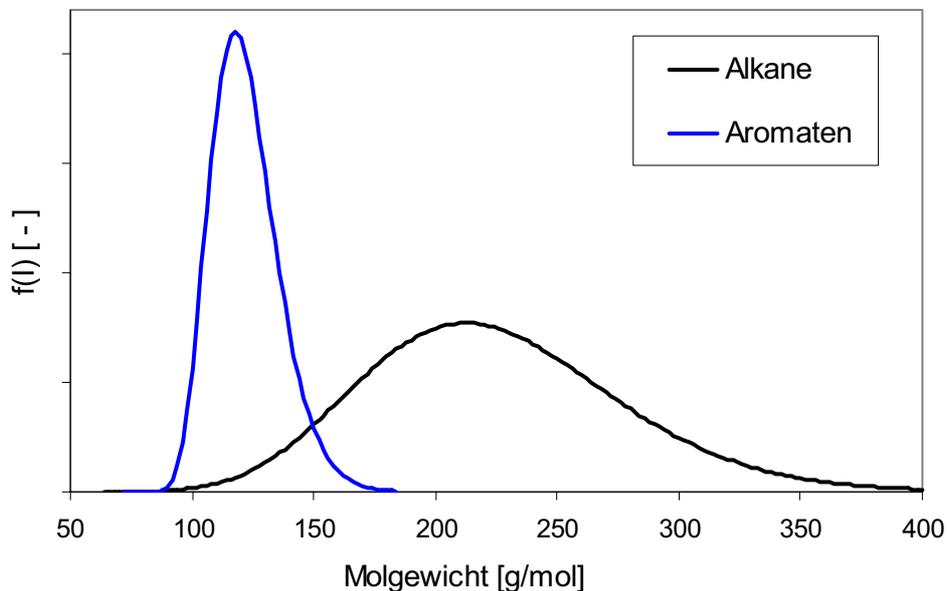


Bild 5.18: Verteilungen für Alkane und Aromaten in konventionellem Dieselkraftstoff

Anhand der in Bild 5.18 abgebildeten Verteilungen für Alkane und Aromaten in konventionellem Dieselkraftstoff und der Angaben für die Standardabweichung in Tabelle 5.5, werden die unterschiedlichen Eigenschaften der beiden Stoffgruppen bezüglich der Bandbreite der enthaltenen Komponenten und deren Flüchtigkeit deutlich. In realem Dieselkraftstoff sind in etwa 27% aromatische Kohlenwasserstoffe enthalten. Dieser Anteil wird im vorliegenden Validierungsfall durch die Aromatenverteilung repräsentiert [RFS05].

Zusätzlich zur in Bild 5.19 in schwarz dargestellten Dieselverteilung, wird Dieselkraftstoff mit dem MK-2VT-Modell als Gemisch von Alkanen und Aromaten abgebildet, siehe Bild 5.19 (blaue Kurve). Die Tropfenlebensdauer dieser beiden verschiedenen Diesel-Tropfen muss per Definition gleich sein. Die Verläufe der Tropfen-

durchmesser-Quadrat-Abnahme sind jedoch aufgrund des Aromateneinflusses unterschiedlich, da sich besonders zu Beginn der Verdampfung die leichtflüchtigeren aromatischen Anteile stärker reduzieren. Dieser Effekt kann bei der einfachen Dieselverteilung nicht auftreten.

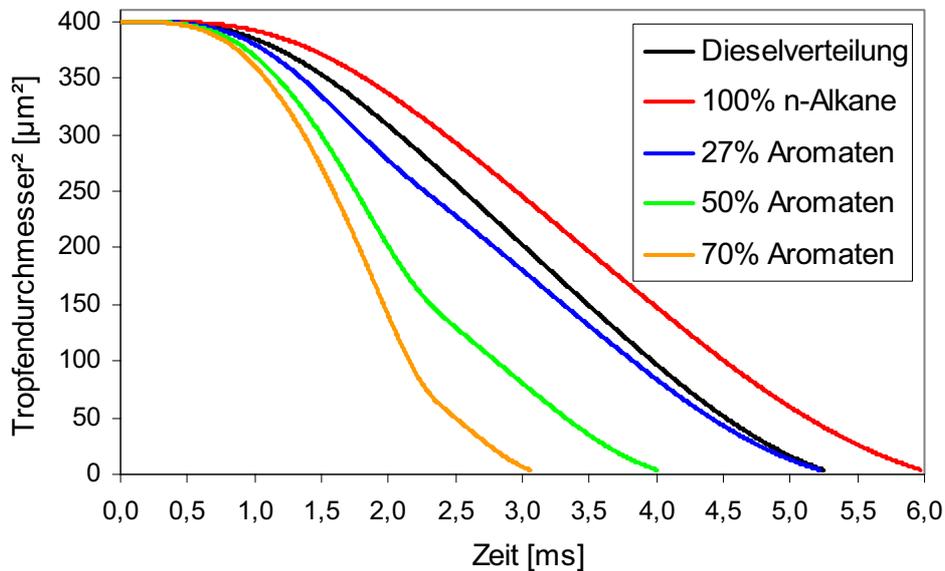


Bild 5.19: Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme über der Zeit

Die rot eingefärbte Kurve in Bild 5.19 stellt die Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme des reinen n-Alkan-Gemisches dar, zu welchem der Anteil von 27% Aromaten zur Abbildung von Dieselkraftstoff hinzugemischt wird. Mischt man diesem n-Alkan-Gemisch 50% bzw. 70% Aromaten hinzu, so reduziert sich die Verdampfungszeit des jeweiligen Gesamtgemisches mit steigendem Aromatenanteil, wie in Bild 5.19 zu erkennen ist. Anhand der Tropfentemperaturverläufe in Bild 5.20 sind zu Anfang des Verdampfungsprozesses zwei verschiedene Verlaufscharakteristiken auszumachen. Zum einen ergibt sich bei den aromatenhaltigen Gemischen aufgrund des schnellen Ausdampfens der Aromatenanteile ein anfangs langsamerer Temperaturanstieg. Zum anderen zeigen die reinen n-Alkan-Gemische (Dieselverteilung und 100% n-Alkane) einen stärkeren Temperaturanstieg. Gegen Ende der Verdampfung gleichen sich die Temperaturverläufe der Dieselverteilung (MK-1VT-Modell) und der Alkan/Aromaten-Mischung (73%:27%) (MK-2VT-Modell) an. Die stark aromatenhaltigen Gemische erfahren zum Ende der Verdampfungszeit einen extremen Temperaturanstieg. Dies geschieht dadurch, dass sich die nach dem Ausdampfen der Aromaten noch im Tropfen befindlichen schwerflüchtigen Anteile bei geringer restlicher Tropfenmasse erst weiter aufheizen, bevor sie verdampfen.

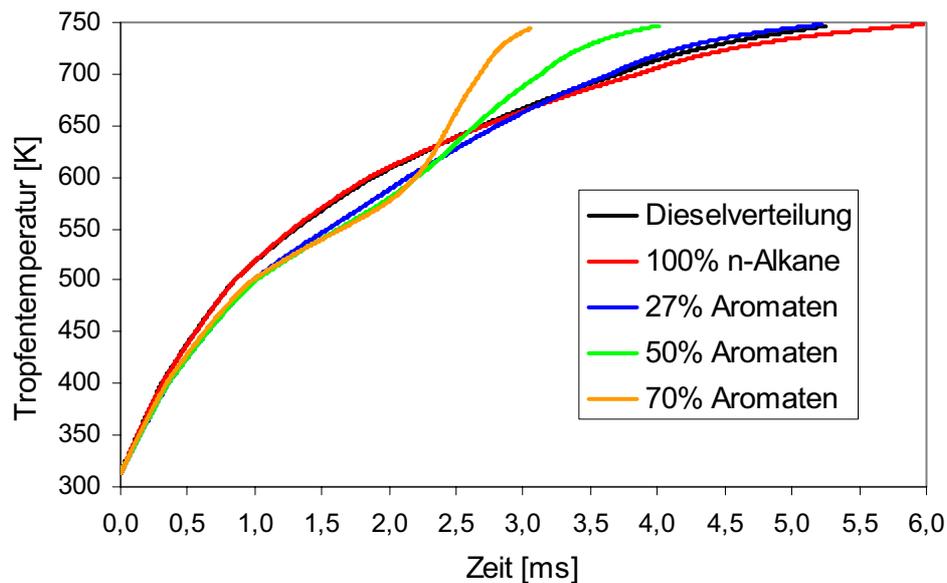


Bild 5.20: Tropfentemperaturverläufe der Alkan/Aromaten-Gemische

Im **sechsten** und damit letzten **Validierungsfall** wird ein Gemisch aus dem synthetischen Kraftstoff L1 und einer aromatischen Einzelkomponente, dem Monoaromat Toluol, betrachtet. Mit der ersten Verteilung wird, wie in Abbildung 5.21 zu erkennen ist, das leichtflüchtige n-Alkangemisch abgebildet. Die zweite Verteilung stellt in Form eines Peaks die aromatische Komponente Toluol dar.

| Verteilungsparameter | L1 | Toluol |
|----------------------|-------|------------|
| α | 131,5 | C_7H_8 |
| β | 0,8 | Molgewicht |
| γ | 38,0 | [g/mol]: |
| Θ [g/mol] | 142,4 | 92,1 |
| σ | 9,1 | |

Tabelle 5.6: Verteilungsparameter von L1 und Daten der Einzelkomponente Toluol

Somit wird auch der Nachweis erbracht, dass aromatische Einzelkomponenten darstellbar sind und deren Einflüsse auf ein Kraftstoffgemisch wiedergegeben werden können. Die aromatische Einzelkomponente Toluol ist im Vergleich zum synthetischen Brennstoff L1 leichter flüchtig, was sich bereits bei einer 30 prozentigen Zumischung zu L1 durch eine verringerte Verdampfungszeit des Gemisches zeigt. Dieser Effekt verstärkt sich mit steigendem Toluolanteil.

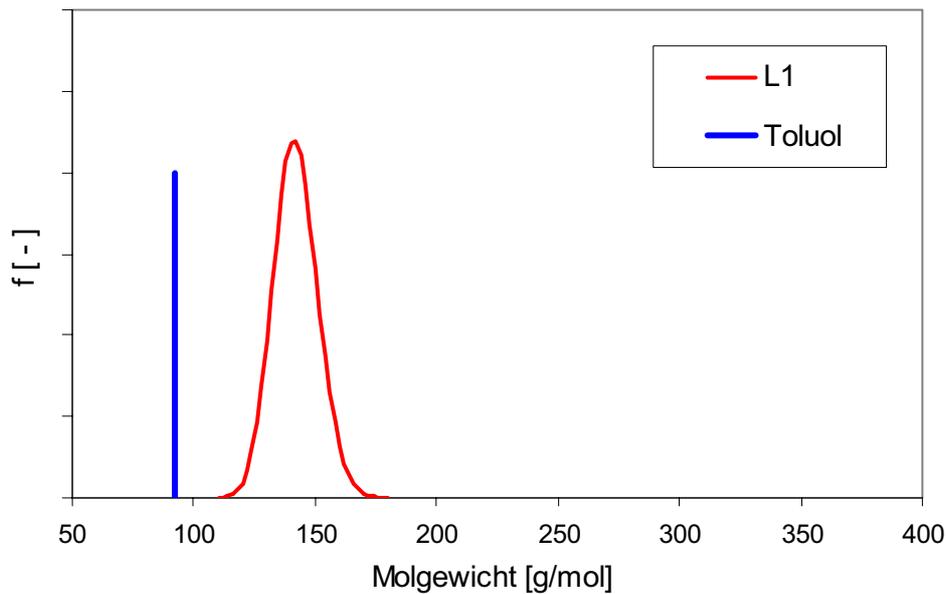


Bild 5.21: Verteilungsfunktion für L1 und Peak zur Darstellung von Toluol

An den Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme Verläufen (Bild 5.22) sowie am Temperaturverlauf im Tropfen (Bild 5.23), sind auch in diesen Fällen Entmischungsvorgänge erkennbar. Zuerst verdampfen die aromatischen Anteile und bewirken nach deren vollständiger Verdampfung eine Änderung der Durchmesser-Quadrat- und Temperaturverläufe in Richtung der Eigenschaften des restlichen Gemisches, in diesem Fall L1.

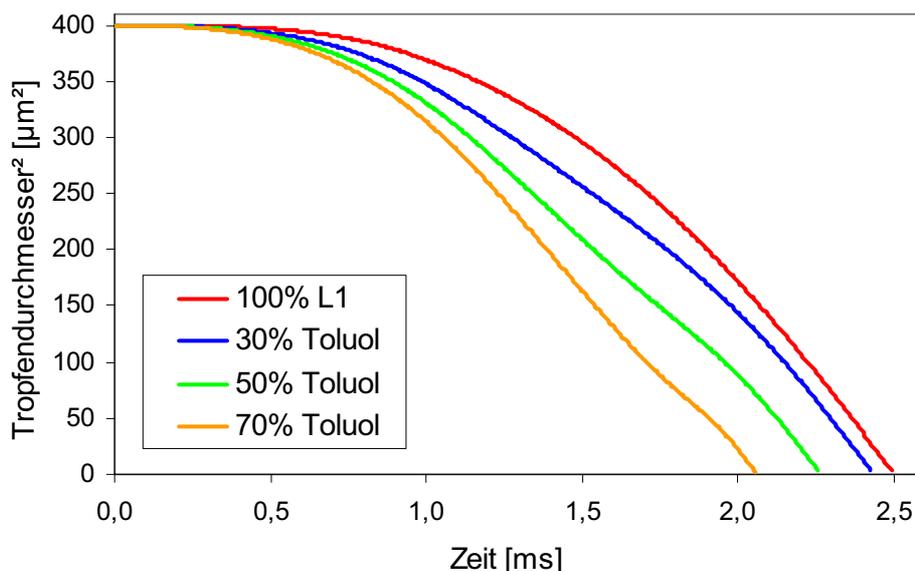


Bild 5.22: Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahme der L1+Toluol-Gemische

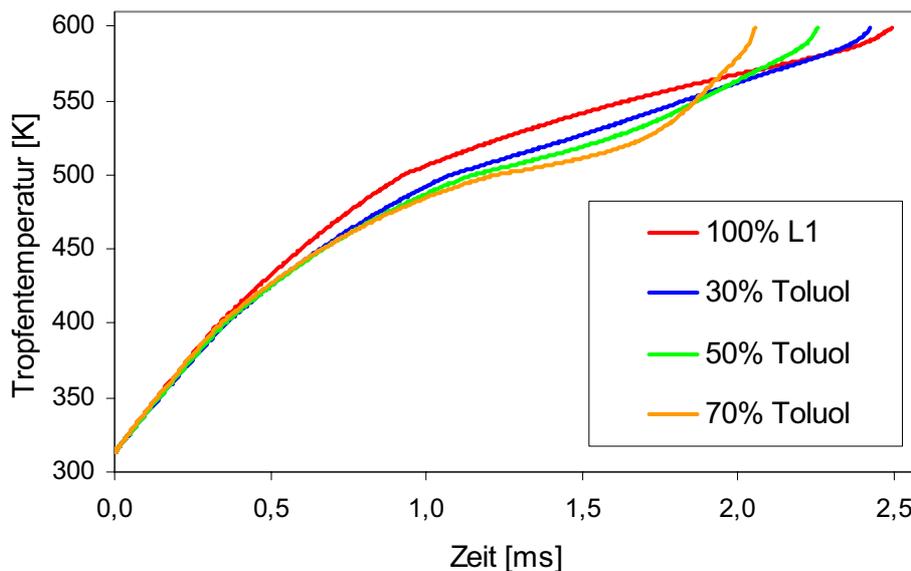


Bild 5.23: Tropfentemperaturverläufe der L1+Toluol-Gemische

Die stark toluolhaltigen Mischungen erfahren zum Ende der Verdampfungszeit einen extremen Temperaturanstieg dadurch, dass sich die nach dem Verdampfen des Toluols noch im Tropfen befindlichen L1-Anteile bei geringer restlicher Tropfenmasse weiter aufheizen, bevor sie verdampfen.

Die für die Verdampfung maßgeblichen Stoffeigenschaften Siedetemperatur, Dampfdruck und Diffusionskoeffizient sind für verschiedene Alkane und Aromaten im Anhang in den Bildern A.2 bis A.4 dargestellt und unterstreichen die in diesem Kapitel beschriebenen Verdampfungsverhalten verschiedener Komponentenmischungen. Alkane geringen Molgewichts sowie Aromaten haben demnach die höchsten Verdampfungsraten. Langkettige Alkane mit hohem Molgewicht verdampfen hingegen wesentlich langsamer. Diese Erkenntnisse aus den Stoffdaten stimmen mit den Ergebnissen der hier vorgestellten Einzeltropfenuntersuchungen überein.

5.2 Untersuchungen an Einspritzstrahlen

Die Validierung des Verdampfungsmodells beinhaltet über die Einzeltropfenberechnungen hinaus auch Untersuchungen an einfachen Einspritzvorgängen. Diese Untersuchungen werden mit den Kraftstoffgemischen aus dem fünften und sechsten Validierungsfall durchgeführt. Es wird konventioneller Dieseldieselkraftstoff sowie der synthetische Kraftstoff L1 mit einer Toluol-Beimischung verwendet.

Bei den Simulationsrechnungen der Einspritzvorgänge wird zur Abbildung der Kraftstoffe in beiden Fällen das neu entwickelte Multikomponenten-Verdampfungsmodell eingesetzt. Die Abbildung von Dieseldieselkraftstoff erfolgt durch die beiden Teilgemische der Alkane und Aromaten im Verhältnis 73:27%, siehe Tabelle 2.2 (Kapitel 2.2). Bei der Mischung L1+Toluol stellt die eine Verteilung den synthetischen Kraftstoff L1 dar, die andere Verteilung bildet, zusammengezogen auf einen Peak, die Einzelkomponente Toluol ab.

5.2.1 Randbedingungen der experimentellen und theoretischen Untersuchungen

Die experimentellen Untersuchungen zur Validierung des Verdampfungsmodells werden an einer schnellen Kompressionsmaschine durchgeführt. Dieser Versuchsträger, auch Einhubtriebwerk (ETW) genannt, bietet die Möglichkeit, optische Untersuchungen zum Strahleindringverhalten und zur Strahlausbreitung unter motorischen Bedingungen vorzunehmen. Das ETW verfügt über optische Zugänge im Zylinderkopf und in dem aus Quarzglas gefertigten Kolben. So ist eine direkte Beobachtung der Einspritzung durch den Quarzglaskolben hindurch möglich. Um sowohl die eindringenden flüssigen Einspritzstrahlen als auch die Ausbreitung des verdampften Kraftstoffanteils beobachten zu können, werden zwei verschiedene optische Versuchsaufbauten verwendet. Zur Detektion der flüssigen Phase wird das Mie-Streulicht-Verfahren eingesetzt. Schlieren-Untersuchungen dienen zur Beobachtung der Summe aus Flüssig- und Dampfanteilen. Der Einspritzvorgang wird mit einer Hochgeschwindigkeitskamera in diskreten Zeitabständen aufgenommen und nach den Kriterien der Strahleindringtiefe und Strahlausbreitung entsprechend ausgewertet. Für eine genauere Beschreibung des Einhubtriebwerkes und der verwendeten optischen Messtechniken sei auf [Ste04] sowie [DFP05] verwiesen.

Um dreidimensionale CFD-Simulationen der Einspritzvorgänge durchführen zu können, muss ein dem ETW-Brennraum entsprechendes Rechnetz erstellt werden. Das im vorliegenden Fall verwendete Gitter ist in seinen Konturen in Bild 5.24 dargestellt. Es sind die Kolbenmulde in Topfform sowie ein seitlich angebrachter Kanal (Channel) zum Ausgleich von versuchsaufbaubedingten Totvolumina zu erkennen. Die für die Auswertungen gewählte Beobachtungsschnittebene ist grau hinterlegt abgebildet. Das Netz ist als Sektornetz ($51,42857^\circ$) ausgeführt.

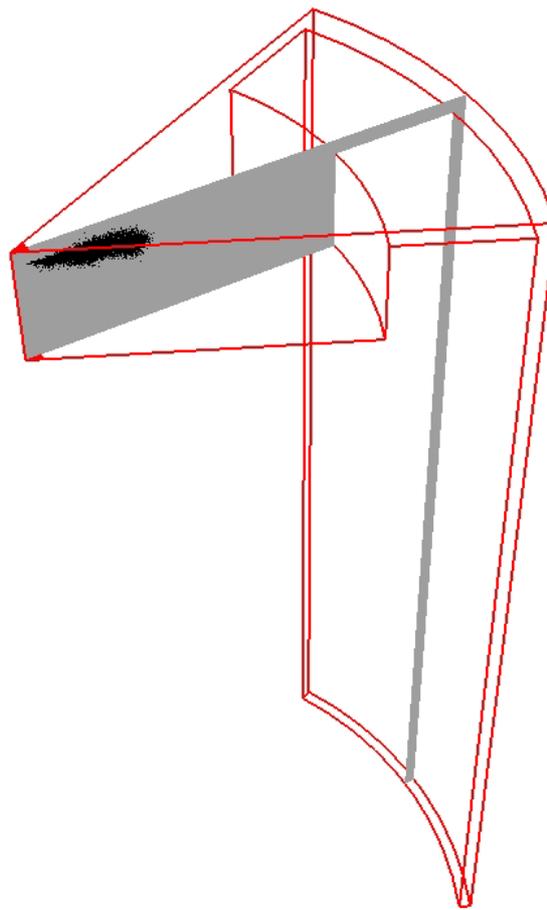


Bild 5.24: ETW-Sektornetz mit betrachteter Schnittebene (grau) und Einspritzstrahl

Für die Untersuchungen wird eine Minisacklochdüse mit sieben Einspritzlöchern (Lochdurchmesser: $142 \mu\text{m}$, Strahlage: 79°) verwendet. Aufgrund der rotations-symmetrischen Anordnung der Einspritzlöcher ist es für die CFD-Simulationen ausreichend, das oben beschriebene Sektornetz einzusetzen. Der Sektor ist so gewählt, dass sich in diesem Bereich genau ein Einspritzloch befindet. Für die Berechnungen mit dem CFD-Code KIVA-3V werden an den beiden Seiten des Sektorgitters „zyklische Randbedingungen“ aufgeprägt, so dass dieser 51° -Sektor als 360° -Sektor behandelt wird [Pag03].

Sowohl die experimentellen Untersuchungen als auch die theoretischen Berechnungen werden nach den in Tabelle 5.7 aufgeführten Randbedingungen durchgeführt. Die Kraftstoffhochdruckeinspritzung am Einhubtriebwerk erfolgt durch ein am Institut für Technische Verbrennung der Universität Hannover entwickeltes Experimentaleinspritzsystem [MKK02].

| Einspritzparameter: | |
|-----------------------------|---------------------|
| Einspritzdrücke | 100 Mpa, 180 Mpa |
| Einspritzmenge: | 15 mg |
| Einspritzverlauf: | Trapezverlauf |
| Brennkammer: | |
| Temperatur: | 845 K (571,85°C) |
| Druck: | 4,75 MPa (47,5 bar) |
| Dampfkonzentration bei t=0: | 0% |

Tabelle 5.7: Randbedingungen der Sprayuntersuchungen

Die Einspritzungen erfolgen jeweils am oberen Totpunkt mit den entsprechenden Einspritzverläufen für 100 bzw. 180 MPa, siehe Bild 5.25. Wie an den Ansteuerungsverläufen zu erkennen ist, beträgt die Düsenadelöffnungsdauer 50 μ s. Die Schließzeit beträgt 100 μ s. Für den Einspritzdruck von 180 MPa ergibt sich bei gleicher Einspritzmenge eine deutlich kürzere Einspritzdauer.

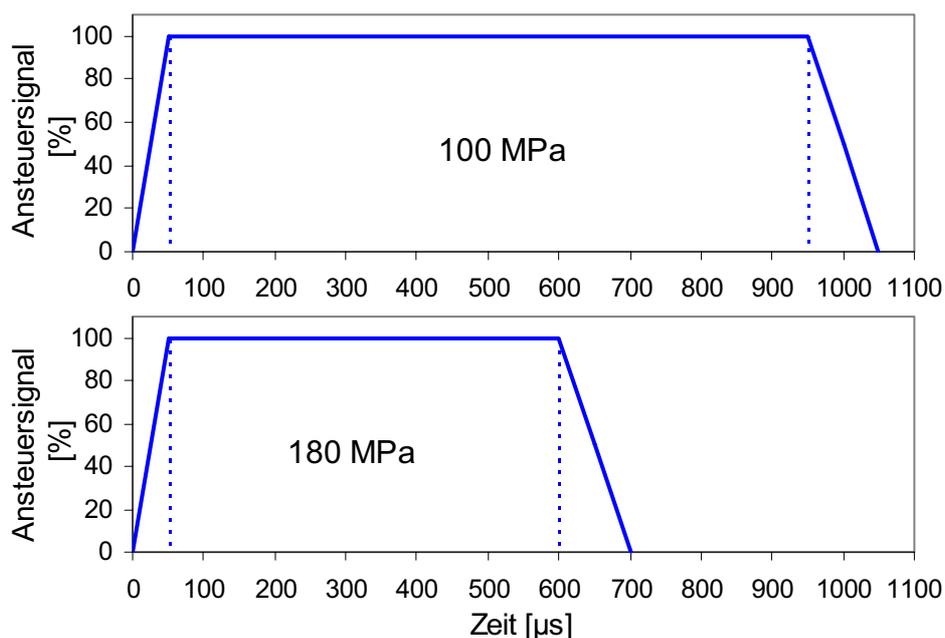


Bild 5.25: Ansteuerungsverläufe für 100 und 180 MPa

5.2.2 Ergebnisse

Bei den experimentellen Untersuchungen an der schnellen Kompressionsmaschine wird der Einspritzvorgang mit der Hochgeschwindigkeitskamera in diskreten Zeitabständen aufgenommen. Jeweils abhängig vom verwendeten Versuchsaufbau (siehe Kapitel 5.2.1), werden Aufnahmen des sich ausbreitenden Einspritzstrahls bzw. der sich ausbreitenden Anteile verdampften Kraftstoffes gemacht. Anhand dieser Bilder werden die Eindringtiefen der flüssigen und gasförmigen Phase vermessen. In Bild 5.26 sind exemplarisch zwei dieser Aufnahmen, zum einen der Einspritzstrahlen (linke Bildhälfte) und zum anderen des verdampften Kraftstoffes (rechte Bildhälfte) zum Zeitpunkt $800\mu\text{s}$ nach Einspritzbeginn dargestellt. Die Einspritzdüse mit sieben Düsenlöchern ist jeweils in der Bildmitte zu erkennen.

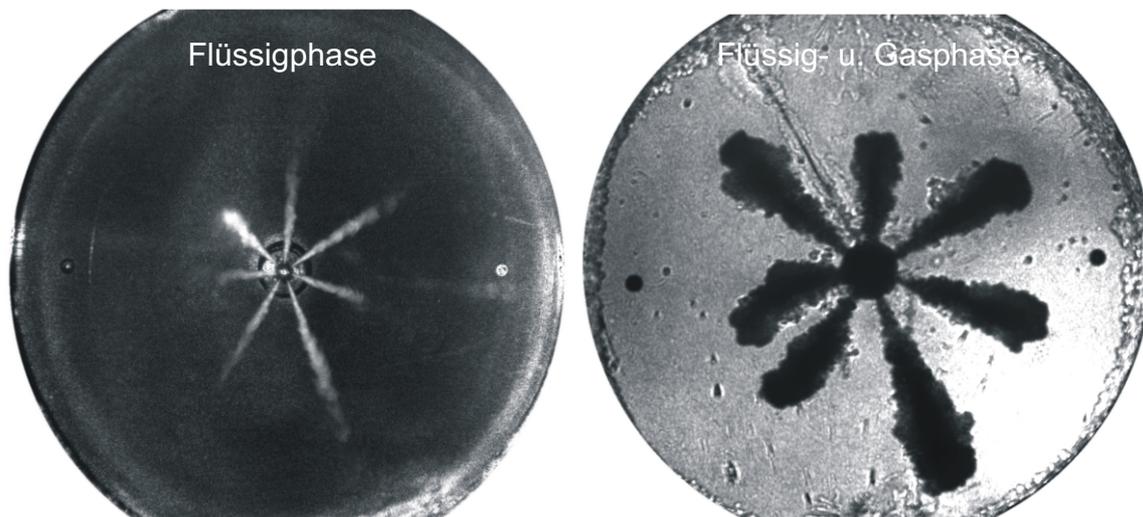


Bild 5.26: Aufnahmen der Einspritzstrahlen (links), Summe aus flüssigen und verdampften Kraftstoffanteilen (rechts) $800\mu\text{s}$ nach Einspritzbeginn bei 100 MPa Einspritzdruck und 15 mg Einspritzmenge für Dieselkraftstoff

Bei den Aufnahmen handelt es sich um eine Draufsicht längs der Zylinderachse auf die Einspritzstrahlen und somit um eine Projektion der räumlichen Eindringtiefen auf eine Ebene, wie in Bild 5.26 zu erkennen ist. Daher müssen die tatsächlichen Eindringtiefen mittels trigonometrischer Funktionen, in die der Strahlagenwinkel der verwendeten Einspritzdüse eingeht, aus den gemessenen Werten berechnet werden. Zusätzlich werden die Strahlkegelwinkel der aus den Düsenlöchern austretenden Einspritzstrahlen vermessen, da diese als Eingabegröße für die Simulationsrechnungen notwendig sind.

Im ersten Schritt der Auswertungen erfolgt ein Abgleich der gemessenen Eindringtiefen von flüssiger und gasförmiger Phase von Dieselkraftstoff sowie L1+Toluol in den jeweiligen Betriebspunkten mit den durch die CFD-Simulationen berechneten Werten. In den Bildern 5.27 und 5.28 sind die experimentell ermittelten Eindringtiefen von Dieselkraftstoff bei Einspritzdrücken von 100 bzw. 180 MPa den in der Simulation berechneten Werten gegenübergestellt.

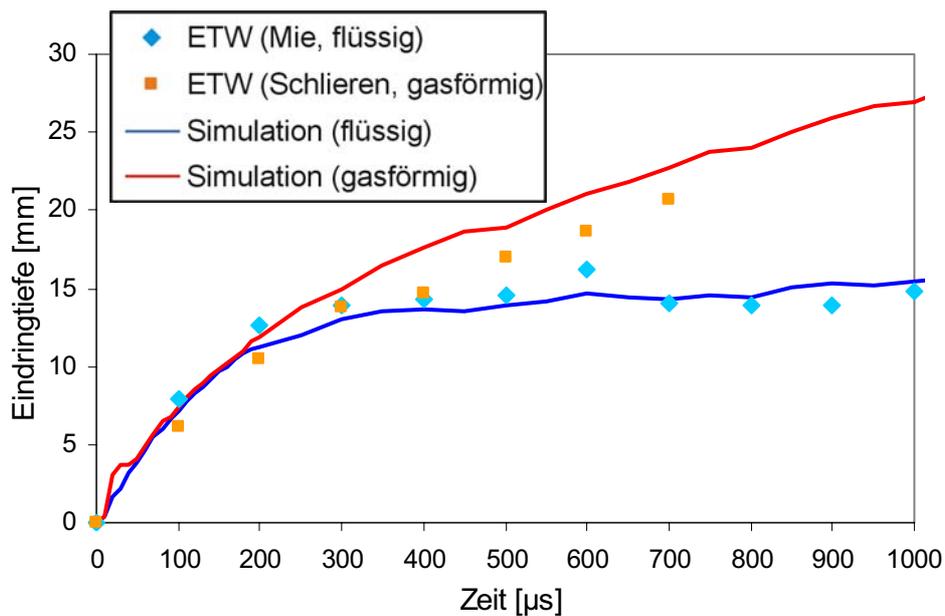


Bild 5.27: Eindringtiefen für Dieselkraftstoff bei 100 MPa Einspritzdruck

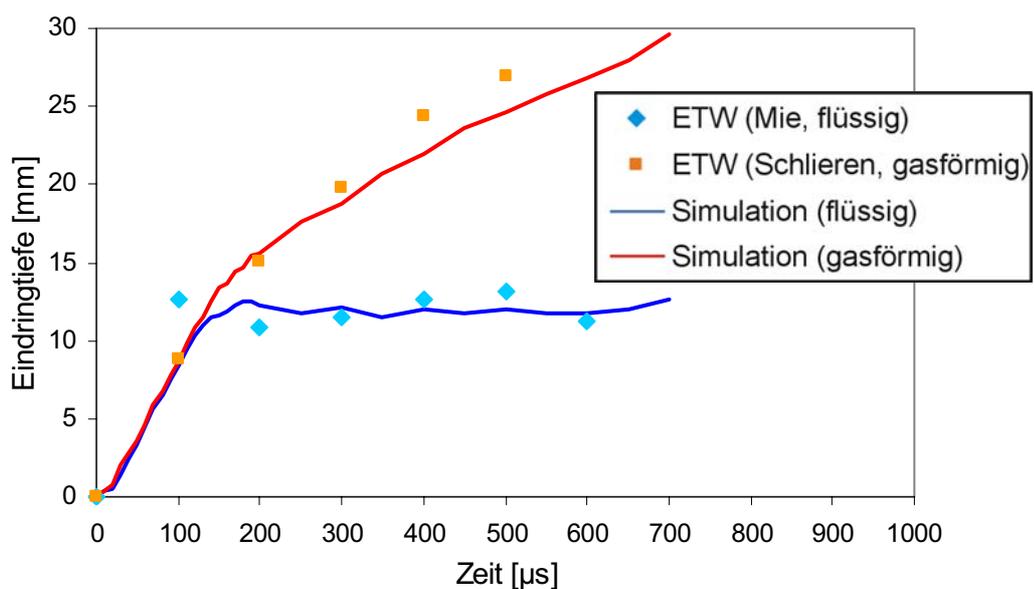


Bild 5.28: Eindringtiefen für Dieselkraftstoff bei 180 MPa Einspritzdruck

Für den synthetischen Kraftstoff L1+Toluol sind die experimentell ermittelten sowie mittels Simulation berechneten Eindringtiefen der Flüssig- und Gasphase in den Bildern 5.29 und 5.30 dargestellt.

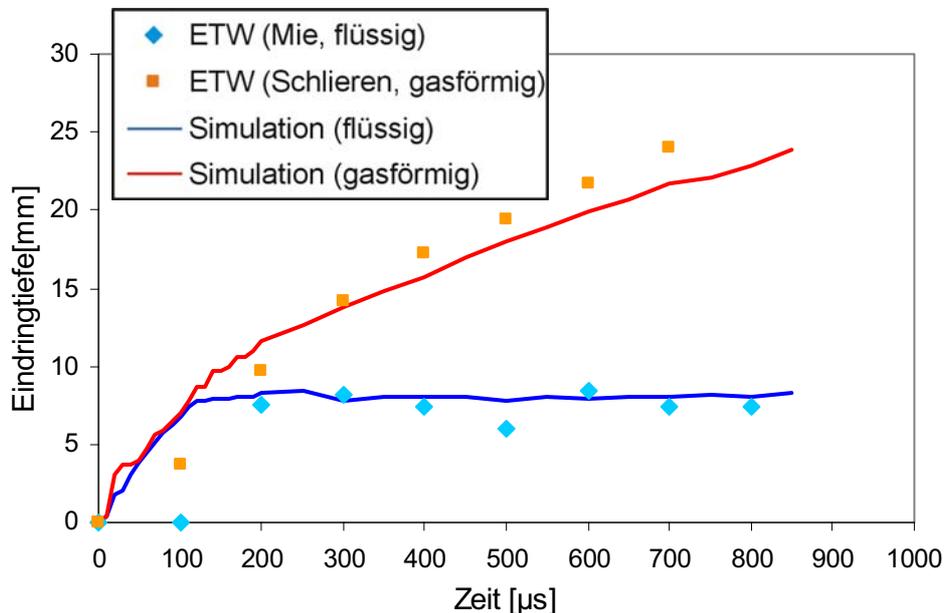


Bild 5.29: Eindringtiefen für L1+Toluol bei 100 MPa Einspritzdruck

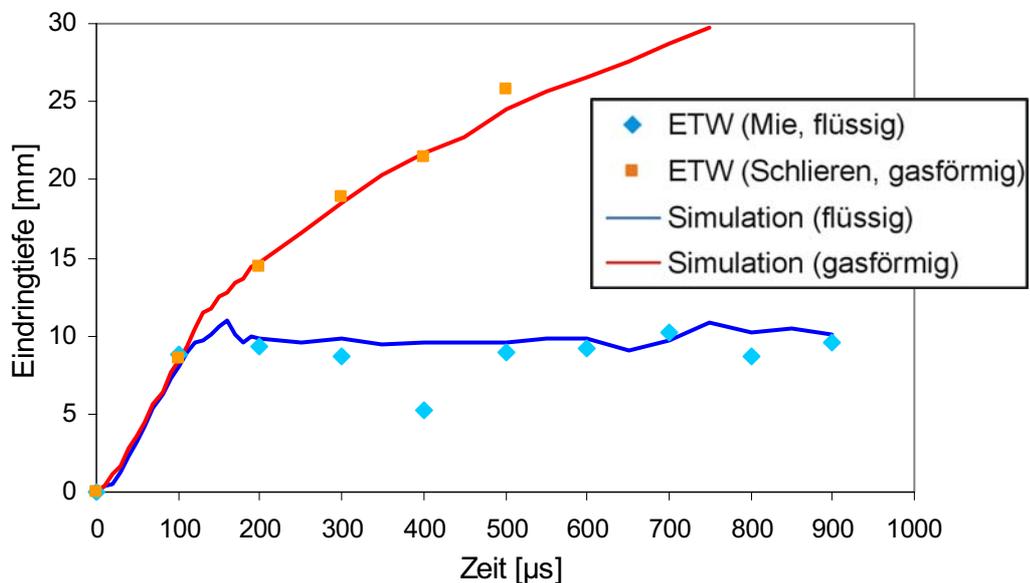


Bild 5.30: Eindringtiefen für L1+Toluol bei 180 MPa Einspritzdruck

Für die CFD-Simulationen sind hierbei die Strahlaufbruchparameter auf die Charakteristik der verwendeten Einspritzdüse eingestellt. Mit diesem Parametersatz werden für beide verwendete Kraftstoffe in den betrachteten Betriebspunkten die CFD-Berechnungen durchgeführt. Das bedeutet, dass im Rahmen der Einspritzdruck-

variation von 100 auf 180 MPa keine erneute Anpassung der Parameter erfolgt. Es zeigt sich für die beiden untersuchten Kraftstoffe und Betriebspunkte eine sehr gute Übereinstimmung der Eindringtiefen der flüssigen Phase. Die Eindringtiefen des verdampften Brennstoffs werden in der Simulation teilweise unterschätzt bzw. für Dieselkraftstoff bei 100 MPa Einspritzdruck (Bild 5.27) leicht überschätzt. Eine Ursache hierfür ist in den experimentellen Werten zu suchen. Diese in den Bildern 5.27 bis 5.30 abgebildeten Messwerte stellen jeweils eine Mittelung aus den Ergebnissen der sieben Einspritzstrahlen dar. Da die verwendete Einspritzdüse jedoch ein stark unsymmetrisches Strahlbild mit unterschiedlichem Kraftstoffeindringverhalten aus den einzelnen Düsenlöchern zeigt, sind auch die Abweichungen der berechneten Eindringtiefen des gasförmigen Brennstoffs zu den experimentellen Werten zu erklären. Dieser Effekt wird anhand von Bild 5.26 nochmals deutlich und ist auf die teilweise Verkokung einzelner Spritzlöcher zurückzuführen. Im Anhang der vorliegenden Arbeit ist daher eine Übersicht der Eindringtiefen für jedes einzelne Spritzloch pro verwendetem Kraftstoff und Betriebspunkt dargestellt.

Der in den Brennraum eindringende flüssige Kraftstoff wird durch den hohen Gegendruck des Brennraumgases abgebremst und beginnt zu verdampfen. Dieser Vorgang zeigt sich anhand der Eindringtiefen in den Bildern 5.27 bis 5.30. Die flüssige Phase dringt mit Einsetzen der Verdampfung nicht weiter in den Brennraum ein und hält einen konstanten Wert. Die Gasphase dringt jedoch weiter in den Brennraum ein. Diese Zeitpunkte des Auseinanderdriftens der flüssigen und der gasförmigen Phase stimmen mit den Zeitpunkten der auftretenden Maxima in den Verläufen der restlichen flüssigen Brennstoffmasse in den Bildern 5.31 und 5.32 überein.

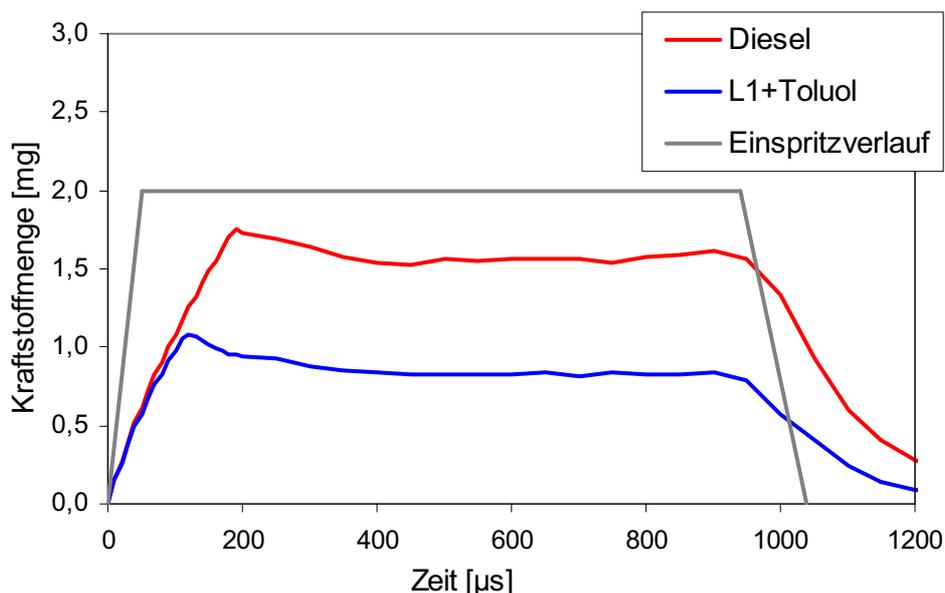


Bild 5.31: Restliche Flüssigmasse im Brennraum bei 100 MPa Einspritzdruck

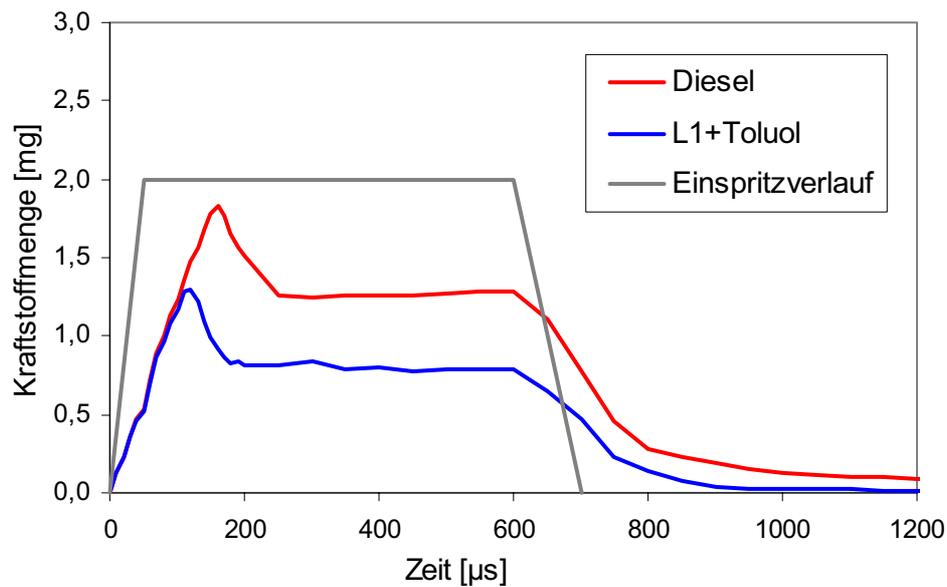


Bild 5.32: Restliche Flüssigmasse im Brennraum bei 180 MPa Einspritzdruck

In diesen Abbildungen (5.31 und 5.32) ist der Anteil des flüssigen Brennstoffs im Brennraum während des beobachteten Zeitraumes für die beiden Kraftstoffe jeweils für beide Betriebspunkte dargestellt. Zusätzlich sind die zugehörigen Einspritzverläufe jeweils in grau schematisch abgebildet. Für Dieselmotoren zeigt sich in beiden Betriebspunkten ein deutlich höherer Flüssiganteil im Brennraum als für das Kraftstoffgemisch L1+Toluol. Die Ursache hierfür liegt in den unterschiedlichen Verdampfungseigenschaften der verwendeten Kraftstoffe. Dieselmotoren sind wesentlich schwerflüchtiger als L1+Toluol und verdampft daher langsamer. Zu Beginn der Einspritzung ist, wie bereits erwähnt, eine Überhöhung der flüssigen Kraftstoffmenge zu beobachten. Ab diesem Zeitpunkt beginnt die Hauptverdampfungsphase mit einer besonders bei 180 MPa Einspritzdruck zu beobachtenden deutlichen Reduzierung der restlichen Flüssigmasse und es erfolgt das bereits beschriebene Abdriften des Kraftstoffdampfes. Da die Einspritzung jedoch weiterhin andauert, wie an den schematisch dargestellten Einspritzverläufen zu erkennen ist, bleibt die Flüssigmasse über dem weiteren Einspritzvorgang nahezu konstant. Dieser Effekt ist dadurch zu begründen, dass sich während der fortwährenden Einspritzung ein gleichbleibendes Verhältnis zwischen der zugeführten flüssigen Brennstoffmasse und der verdampften Kraftstoffmasse einstellt. Erst mit Beginn der Absteuerflanke im Einspritzverlauf (Schließvorgang der Düsennadel) findet eine deutliche Reduzierung der flüssigen Kraftstoffmasse statt.

Im zweiten Schritt der Auswertungen werden die Ergebnisse der CFD-Simulationsberechnungen hinsichtlich der Ausbreitung von flüssiger und gasförmiger Phase im Brennraum in Abhängigkeit der verwendeten Kraftstoffe und der jeweils enthaltenen Teilgemische betrachtet. Für diese Auswertungen wird die in Bild 5.24 beschriebene Beobachtungsschnittebene verwendet. In den folgenden Bildern wird von der Schnittebene nur der Bereich innerhalb der Kolbenmulde betrachtet. Die Ausbreitung der Einspritzstrahlen ist für 100 MPa Einspritzdruck in Bild 5.33 und für 180 MPa Einspritzdruck in Bild 5.36 dargestellt. Es wird jeweils Dieselkraftstoff (Bildfolge linke Seite) mit dem synthetischen Kraftstoff L1+Toluol (Bildfolge rechte Seite) verglichen. Hierbei ist zu beachten, dass die flüssige Phase mit sogenannten Parceln (Tropfen-Kollektive) beschrieben wird, die in ihrer Darstellung gleich groß sind. In beiden Fällen zeigt sich ein deutlich geringerer Flüssiganteil für den Kraftstoff L1+Toluol aufgrund seiner erheblich höheren Verdampfungsrate. Des Weiteren ist zu erkennen, dass die Eindringtiefe der Einspritzstrahlen ab ca. 400 μs , bis auf Dieselkraftstoff bei 100 MPa Einspritzdruck, annähernd konstant bleibt. Mit dem Ende der Einspritzung, für 100 MPa Einspritzdruck bei 1040 μs bzw. bei 700 μs für 180 MPa, verliert sich die klare Strahlstruktur und die Flüssigmenge reduziert sich stärker.

In den Bildern 5.34 und 5.35 für 100 MPa Einspritzdruck sowie in den Bildern 5.37 und 5.38 für 180 MPa Einspritzdruck sind jeweils die Dampf-Konzentrationen der in den untersuchten Kraftstoffen enthaltenen Teilgemische in der Gasphase dargestellt. Unabhängig von den Einspritzdrücken und den untersuchten Kraftstoffen haben die aromatischen Anteile über den gesamten Betrachtungszeitraum im Brennraum eine geringere Konzentration als die Alkane bzw. L1. Das liegt zum einen am geringeren Gesamtanteil der Aromaten in den untersuchten Kraftstoffen und zum anderen an der weitaus höheren Diffusion der früher verdampfenden aromatischen Anteile im Vergleich zu den schwerer flüchtigen Alkanen. Das bedeutet, dass sich die Aromaten nach dem Verdampfen deutlich schneller im Brennraum ausbreiten und es so nur zu geringen Dampfkonzentrationen kommt. Dabei zeigt sich für Toluol am Anfang der Einspritzung eine höhere Konzentration als für das im Dieselkraftstoff enthaltene Aromaten-Gemisch. Dieser Effekt ist besonders bei 100 MPa Einspritzdruck in den Bildern 5.34 und 5.35 jeweils in der rechten Bildfolge zu erkennen. Hervorgerufen wird dieses Verhalten durch die höhere Flüchtigkeit des Toluols im Vergleich zum Aromaten-Gemisch. Im weiteren Verlauf der Einspritzung bildet sich das Konzentrationsmaximum der Aromaten im Zentrum der Gasphase aus. Bei den Teilgemischen der Alkane und L1 orientiert sich das Maximum der Kraftstoffkonzentration in Richtung der Spitze der Gasphase. Darüber hinaus ist sowohl bei 100 MPa als auch bei 180 MPa Einspritzdruck eine höhere L1-Konzentration bereits ab Austritt aus dem

Düsenloch in der Gasphase gegenüber dem Alkan-Teilgemisch im Dieselkraftstoff zu beobachten. Der Grund hierfür liegt in einer höheren Flüchtigkeit und Verdampfungsrates von L1 im Vergleich zum Alkan-Gemisch und den somit größeren und früher vorliegenden Dampfanteilen in der Gasphase.

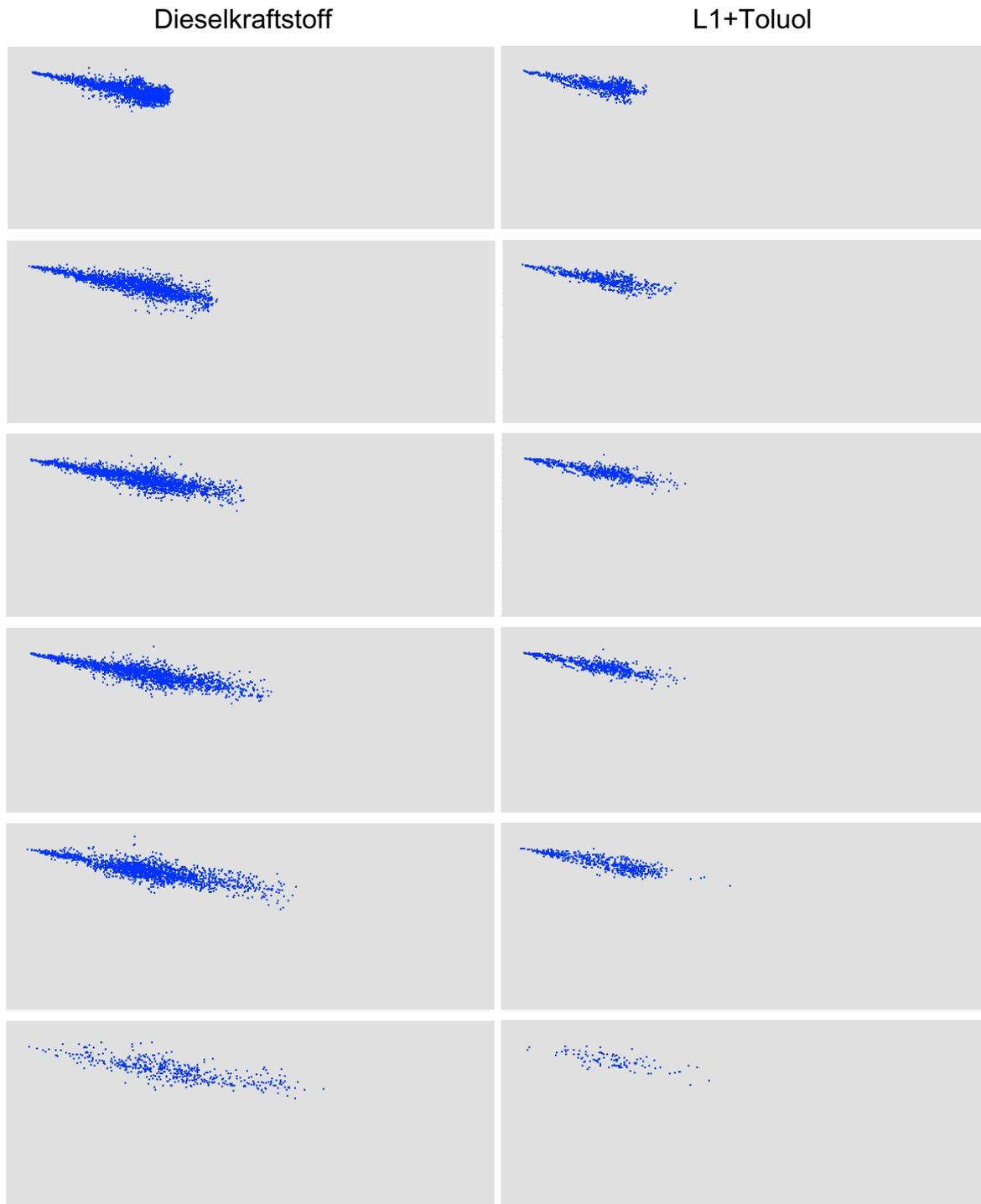


Bild 5.33: Einspritzstrahlen von Dieselkraftstoff (links) und L1+Toluol (rechts) für 100 MPa Einspritzdruck und 15 mg Einspritzmenge bei 200, 400, 600, 800, 1000 und 1200 μ s

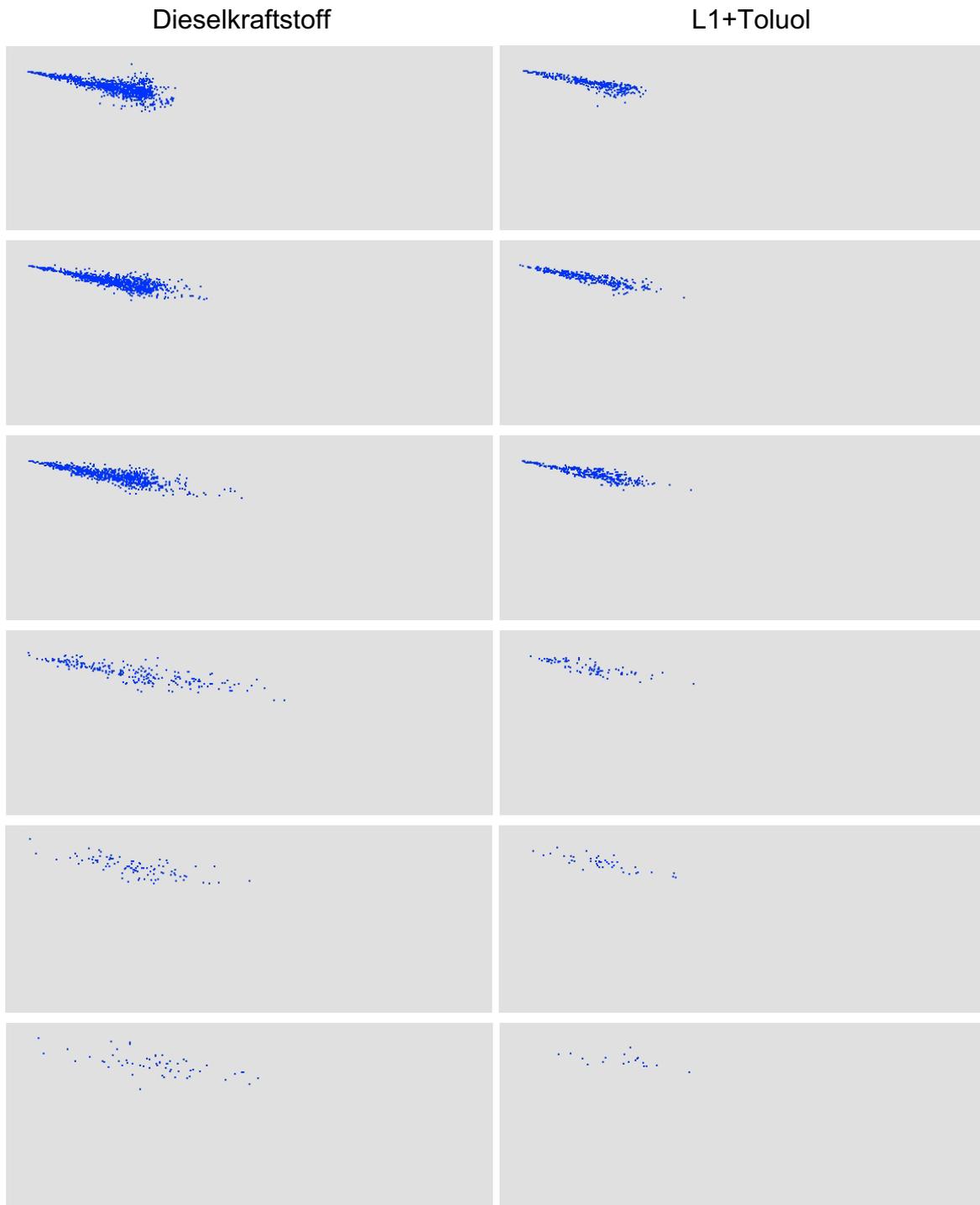


Bild 5.36: Einspritzstrahlen von Diesekraftstoff (links) und L1+Toluol (rechts) für 180 MPa Einspritzdruck und 15 mg Einspritzmenge bei 200, 400, 600, 800, 1000 und 1200 μs

5.3 Bewertung

In Kapitel 5 – Validierung des Multikomponenten-Verdampfungsmodells – werden Untersuchungen zur Verdampfung von Einzeltropfen vorgestellt. Die Berechnungen dienen der Überprüfung des neuen Verdampfungsmodells mit zwei Verteilungsfunktionen auf mathematisch-numerische Plausibilität sowie auf physikalische Richtigkeit. Hierbei wurden die im folgenden zusammengefassten Ergebnisse erzielt:

- Der Vergleich mit bestehenden Verdampfungsmodellen (STD-, MK-1VT-Modell) verdeutlicht die allgemeine Funktions- und Leistungsfähigkeit des neuen Verdampfungsmodells.
- Die Verdampfung eines Einzeltropfens bestehend aus einem leichtflüchtigen und einem schwerflüchtigem Alkan-Gemisch zeigt im Vergleich zur Verdampfung eines äquivalenten Gesamt-Alkangemisches, berechnet mit dem MK-1VT-Modell, übereinstimmendes Verhalten.
- Die unterschiedlichen Verdampfungseigenschaften von Kraftstoffmischungen eines leichtflüchtigen Alkan-Gemisches bzw. verschiedenem Alkan-Einzelkomponenten mit einem Grundgemisch (Dieselverteilung) lassen sich mit dem MK-2VT-Modell wiedergeben. Auch eine Variation der Massenanteile der Teilgemische am Gesamtgemisch liefert zutreffende Ergebnisse.
- Die Verdampfung von Gemischen bestehend aus Komponenten unterschiedlicher homologer Gruppen, wie die Mischung von Alkanen und Aromaten zur detaillierteren Abbildung von Dieselkraftstoff sowie die Kraftstoffmischung von synthetischem L1 mit Toluol, kann mit dem neuen Verdampfungsmodell wiedergegeben werden.
- Anhand der Tropfendurchmesser-Quadrat-Abnahmen, der Massenanteile und Tropfentemperaturen sowie der Mittelwerte von Flüssig- und Gasphase lassen sich die unterschiedlichen Verdampfungseigenschaften der betrachteten Gemische sowie auftretende Entmischungsvorgänge zwischen Teilgemischen während der Verdampfung darstellen.

Weiterhin wurden Untersuchungen an einfachen Einspritzvorgängen mit zwei verschiedenen Kraftstoffen durchgeführt, um die im Rahmen der Einzeltropfenberechnungen nachgewiesene Allgemeingültigkeit auch auf die Verdampfung von Einspritzstrahlen ausdehnen zu können. Diese einfachen Einspritzvorgänge wurden sowohl mittels dreidimensionaler CFD-Simulation berechnet als auch im Experiment an einer schnellen Kompressionsmaschine (Einhubtriebwerk) optisch untersucht.

Im Anschluss erfolgte ein Abgleich von Simulation und Experiment. Nachfolgend sind die Randbedingungen und Ergebnisse dieser Untersuchungen zusammengefasst:

- Es wurden die Dieselkraftstoff und die Kraftstoffmischung L1+Toluol experimentell wie theoretisch untersucht. Es wurden jeweils 15 mg bei 100 bzw. 180 MPa in eine Gasumgebung mit 845 K und 4,75 MPa mittels einfachem Trapezverlauf eingespritzt.
- Bei den CFD-Simulationen kam das neu entwickelte Multikomponenten-Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen zum Einsatz.
- Die Eindringtiefen von Flüssig- und Gasphase der betrachteten Kraftstoffe aus den optischen Untersuchungen am Einhubtriebwerk, können in den Simulationen mit dem MK-2VT-Modell nachgebildet werden.
- Die sich unterscheidenden Verdampfungseigenschaften der beiden betrachteten Kraftstoffe werden im Vergleich des in der Simulation angegebenen restlichen Flüssiganteils im Brennraum zutreffend wiedergegeben.
- Die Änderungen der Zusammensetzung der gasförmigen Phase in Abhängigkeit der in den Kraftstoffen enthaltenen Komponenten während des Verdampfungsprozesses stimmen mit den Ergebnissen aus den Einzeltropfenuntersuchungen überein.

Zusammenfassend ist zu bemerken, dass das im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Multikomponenten-Verdampfungsmodell die Verdampfungseigenschaften verschiedener Kraftstoffmischungen sowohl bei Einzeltropfenberechnungen als auch bei der Betrachtung von Einspritzvorgängen abbildet. Es werden die unterschiedlichen Eigenschaften der Teilgemische berücksichtigt sowie deren Auswirkungen auf den Verdampfungsprozess hinsichtlich verschiedener Verdampfungsraten und auftretender Entmischungsvorgänge in der flüssigen Phase wiedergegeben. Außerdem werden die Zusammensetzungen sowohl der flüssigen als auch der gasförmigen Phase sowie deren Veränderungen während des Verdampfungsprozesses mit dem Multikomponenten-Verdampfungsmodell beschrieben.

6 Berechnung der Gemischbildung in einem HCCI-Einzylinder Forschungsmotor

Abschließend wird das Multikomponenten-Verdampfungsmodell mit zwei Verteilungsfunktionen zur Berechnung der Gemischbildung in einem für das HCCI-Verfahren ausgelegten Einzylinder Forschungsmotor angewendet. Als Basis für diese CFD-Simulationsrechnungen dient ein Dieselmotor der Baureihe 500 von DaimlerChrysler, der für den homogenisierten Betrieb modifiziert wurde [Pöt05]. Zielsetzung dieser Untersuchungen ist die Ermittlung des Gemischbildungsverhaltens von synthetischen Brennstoffen sowie von konventionellem Dieselmotorkraftstoff.

6.1 Randbedingungen der theoretischen Untersuchungen

Es wird die in Kapitel 2.1.2 beschriebene Einspritzstrategie der 9-Puls-Mehrfacheinspritzung verwendet. Der entsprechende Einspritzverlauf ist in Bild 6.1 dargestellt. Die Einspritzung startet bei 110°KW vor ZOT und endet bei einer maximalen Einspritzmasse von 70 mg pro Arbeitsspiel bei 30°KW vor ZOT. Diese Gesamteinspritzmasse ist wie bereits erwähnt, in neun Teileinspritzungen mit unterschiedlichen Massenanteilen aufgeteilt.

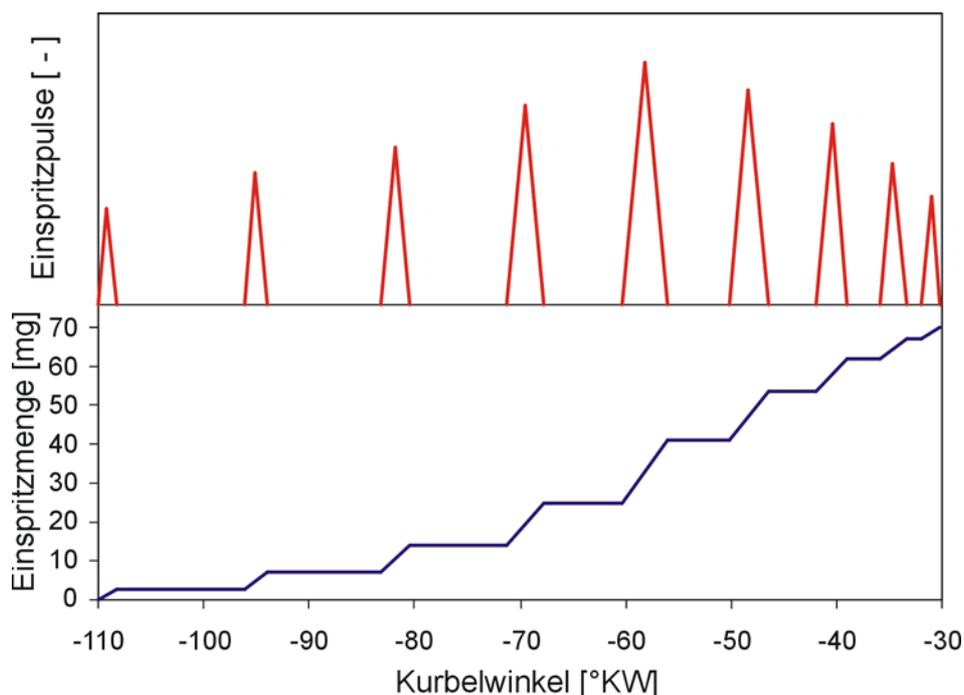


Bild 6.1: Einspritzmenge und Einspritzprofil bei 9-Puls-Mehrfacheinspritzung

In der unteren Hälfte von Bild 6.1 ist der Verlauf der eingespritzten Kraftstoffmenge über dem Kurbelwinkel aufgetragen und zeigt einen sprunghaften Anstieg parallel zu den Einspritzereignissen (siehe obere Bildhälfte). Tabelle 6.1 stellt die wichtigsten Randbedingungen des untersuchten Motorbetriebspunktes dar. Die aufgeführten Brennraumwandtemperaturen ergeben sich aus einer Abschätzung gemäß [FCG04].

| Einspritzparameter: | |
|----------------------------|--------------------|
| Einspritzdruck | 150 MPa |
| Einspritzmenge: | 70,0 mg |
| Einspritzstrategie | 9 Puls |
| Kraftstofftemperatur: | 343,15 K (70,0 °C) |
| Motorparameter: | |
| Drehzahl: | 1000 1/min |
| Ladedruck: | 1 bar |
| AGR: | 0% |
| Zylinderwandtemperatur: | 403 K (129,85°C) |
| Zylinderkopftemperatur: | 413 K (139,85°C) |
| Kolbentemperatur: | 433 K (159,85°C) |

Tabelle 6.1: Randbedingungen der Motorsimulationen

Erste Simulationsrechnungen zur Auslegung dieses Einspritzverlaufs und einer entsprechenden Einspritzdüse wurden mit dem im CFD-Code KIVA-3V implementierten Standard-Verdampfungsmodell (STD-Modell) durchgeführt [Pöt05]. Hierbei wurde Tetradekan ($C_{14}H_{30}$) als Ersatzkraftstoff für Dieselkraftstoff verwendet.

Die Einspritzdüse besitzt, wie bereits in Kapitel 2.1.2 beschrieben, jeweils sechs Einspritzlöcher (Durchmesser: 0,12 mm) in zwei verschiedenen Strahlagen von 40° bzw. 50° sowie ein zentrales in Richtung der Zylinderhochachse angeordnetes Einspritzloch mit einem verringertem Lochdurchmesser von 0,1 mm. Zudem sind die zwölf radial angeordneten Löcher jeweils um 30° zueinander versetzt angeordnet (Kapitel 2.1.2). Aufgrund der rotationssymmetrischen Anordnung der Spritzlöcher kann ein 60°-Sektornetz für die Simulationsrechnungen verwendet werden. In diesem Sektor liegt jeweils ein Einspritzloch einer Strahlage, so dass zwei Einspritzstrahlen unterschiedlicher Strahlage beobachtet werden können. Das zentrale Einspritzloch ist in diesem Sektornetz zu einem sechstel enthalten. Dieses an die Brennraumform des Forschungsmotors angepasste Rechennetz ist in seinen Konturen in Bild 6.2 dargestellt. Zusätzlich sind die beiden Schnittebenen zur Be-

trachtung der verschiedenen Strahllagen in verschiedenen Grautönen eingezeichnet. In diesen Ebenen wird jeweils ein Schnitt längs der Strahlachse des jeweiligen Einspritzstrahls betrachtet. Den Längsschnitt durch den zentralen Einspritzstrahl enthalten die beiden Ebenen je zur Hälfte. In den Ergebnisdarstellungen werden diese beiden Ebenen so zueinander aufgeklappt, dass sie sich gegenüber liegen und einen Schnitt quer durch den gesamten Brennraum abbilden.

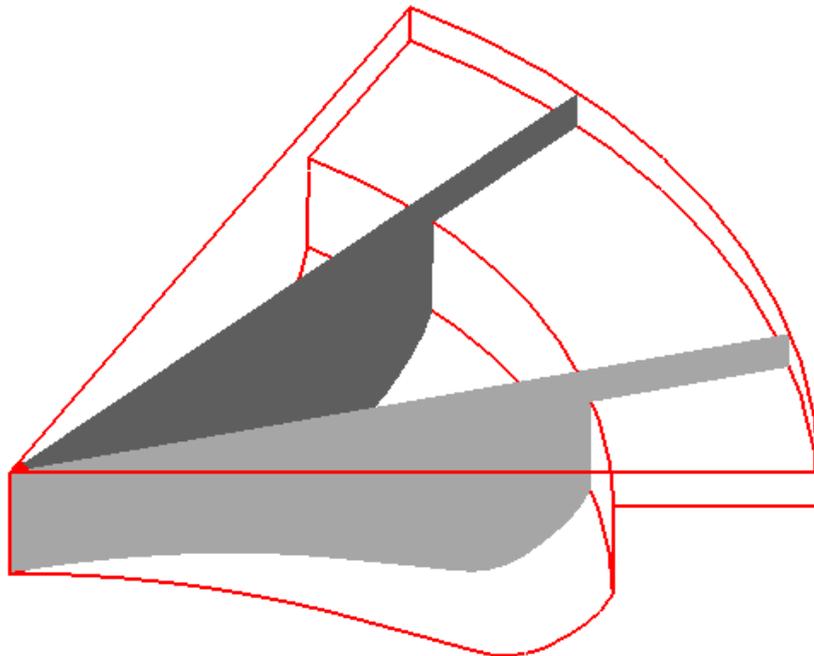


Bild 6.2: Motor-Sektornetz (60°) mit betrachteten Schnittebenen

Mit diesem Modellbrennraum (Gitternetz) und den aufgeführten Randbedingungen werden CFD-Simulationsrechnungen durchgeführt. Es werden dabei folgende synthetische wie konventionelle Kraftstoffe betrachtet:

- Synthetischer Kraftstoff L1 (siehe Kapitel 2.2)
- Synthetischer Kraftstoff L1+Toluol
- Synthetischer Kraftstoff SMDS (siehe Kapitel 2.2)
- Konventioneller Dieselkraftstoff

Anhand dieser Berechnungen wird die Gemischbildung der verwendeten Kraftstoffe im Brennraum untersucht. Dabei werden die Unterschiede im Verdampfungsverhalten und in den Gemischbildungseigenschaften ermittelt und dargestellt.

6.2 Ergebnisse

Die Auswertung der beschriebenen CFD-Berechnungen erfolgt nach der, infolge der Einspritzung, im Brennraum befindlichen flüssigen Kraftstoffmenge in Abhängigkeit der Kurbelwellenstellung. Diese globale Größe ist als Maß für die Verdampfungsrate anzusehen, da die verwendeten Brennstoffe unterschiedlich stark verdampfen und sich somit auch die jeweiligen Flüssiganteile im Brennraum unterscheiden. In Bild 6.3 ist für die untersuchten Kraftstoffe die Flüssigmasse im Brennraum über der Kurbelwellenstellung aufgetragen. Zusätzlich sind in grau die Einspritzpulse schematisch dargestellt.

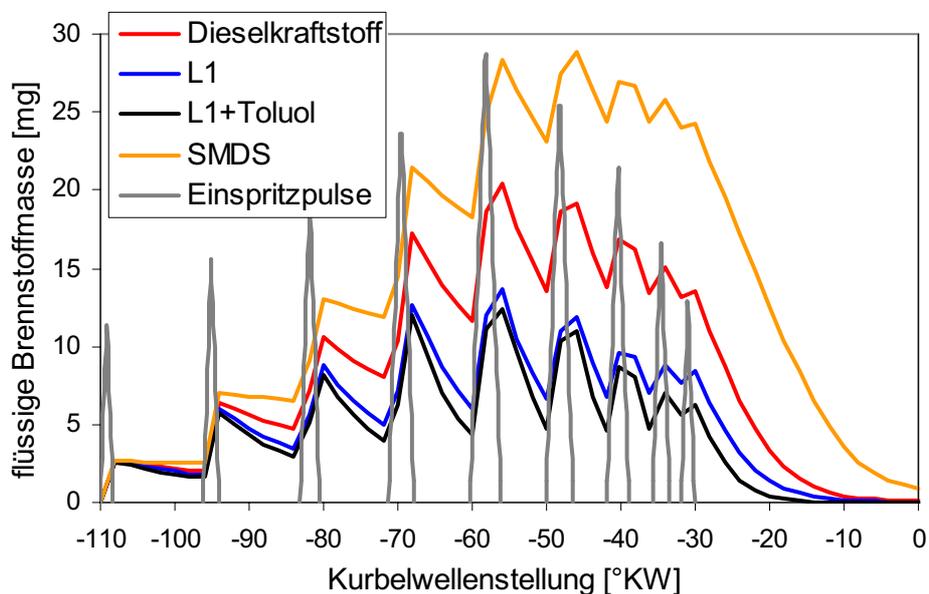


Bild 6.3: Flüssige Brennstoffmasse im Brennraum für verschiedene Kraftstoffe

Es ist zu erkennen, dass die Anteile an flüssigem Brennstoff während der Teileinspritzungen sprunghaft ansteigen und in den Zeiträumen zwischen den Einspritzereignissen, abhängig von den Eigenschaften der einzelnen Kraftstoffe, aufgrund der Verdampfung abnehmen. Der synthetische Kraftstoff L1 sowie L1+Toluol zeigen den geringsten Anteil an flüssigem Brennstoff, da es die leichtflüchtigsten Kraftstoffe sind. Durch die Zumischung der aromatischen Einzelkomponente Toluol zu L1 erhöht sich die Flüchtigkeit und es ergibt sich somit für L1+Toluol ein geringerer Flüssiganteil als für reines L1. Konventioneller Dieselmkraftstoff ist deutlich schwerer flüchtig und hat daher einen höheren Flüssiganteil im Brennraum. SMDS ist der mit Abstand schwerflüchtigste Brennstoff. Diese in den vorgestellten Berechnungen ermittelten Unter-

schiede zwischen Dieselkraftstoff, L1 sowie SMDS werden durch die in Kapitel 2.2 beschriebenen Kraftstoffeigenschaften hinsichtlich der Zusammensetzung, der Bandbreite der enthaltenen Komponenten und dem Siedeverhalten bestätigt.

Für konventionellen Dieselkraftstoff sowie für den synthetischen Kraftstoff L1+Toluol sind in Bild 6.4 und 6.5 die Flüssigmassen im Brennraum der in den Kraftstoffen enthaltenen Teilgemische über der Kurbelwellenstellung abgebildet. In den vorliegenden CFD-Berechnungen wird Dieselkraftstoff als Gemisch aus Alkanen und Aromaten beschrieben (siehe auch Kapitel 5).

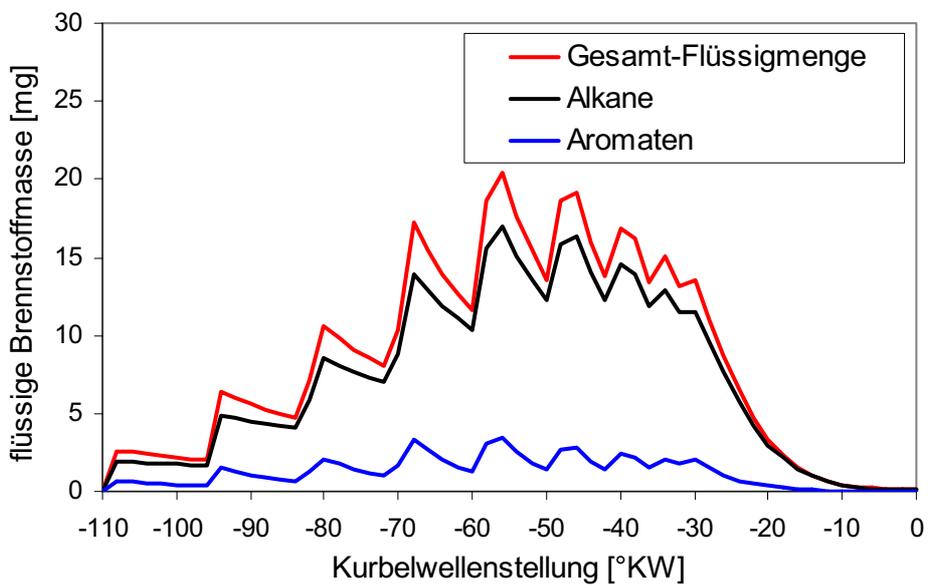


Bild 6.4: Flüssige Brennstoffmasse im Brennraum für Dieselkraftstoff

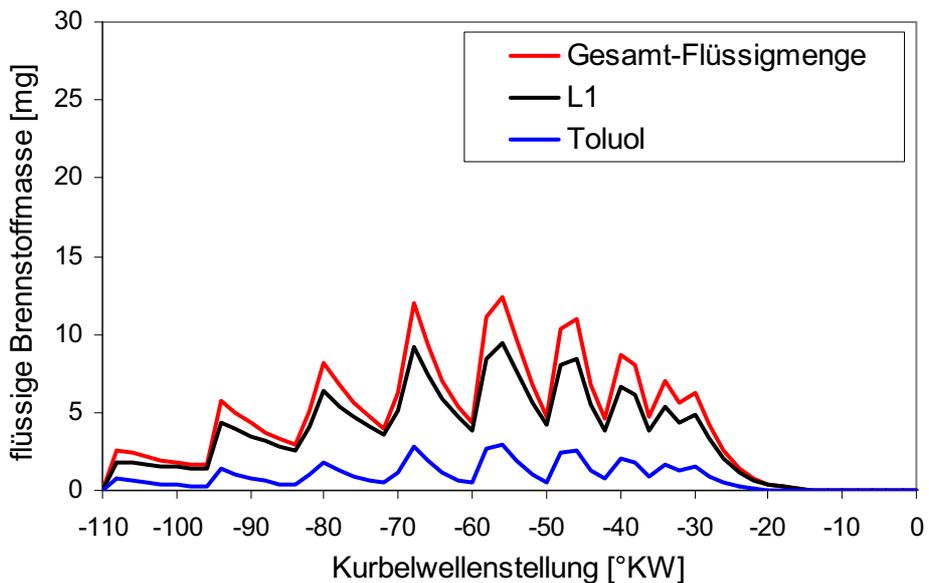


Bild 6.5: Flüssige Brennstoffmasse im Brennraum für L1+Toluol

Die roten Kurven in den Bildern 6.4 und 6.5 beschreiben die Gesamt-Flüssigmengen der Kraftstoffe analog zu Bild 6.3. In Bild 6.4 ist in schwarz der Flüssiganteil des Alkan-Gemisches und in blau der Flüssiganteil der im Dieselkraftstoff enthaltenen Aromaten aufgetragen. Das Teilgemisch der Aromaten ist in Dieselkraftstoff zu 27% enthalten. Dadurch, aber auch aufgrund einer deutlich höheren Verdampfungsrate der Aromaten gegenüber den Alkanen, erklärt sich der deutlich geringere Flüssiganteil im Brennraum. Darüber hinaus zeigt sich in Bild 6.4 nach Abschluss der Einspritzung ab -30°KW (siehe Bild 6.1) eine Entmischung zwischen Alkanen und Aromaten, da das Teilgemisch der Aromaten bereits 20°KW vor dem oberen Totpunkt vollständig verdampft ist. Dieser Effekt lässt sich durch die höhere Flüchtigkeit des Aromaten-Gemisches gegenüber den im Dieselkraftstoff enthaltenen Alkanen begründen. Dieses Verhalten einer vollständigen Entmischung beider Teilgemische zeigt sich ebenfalls in den Ergebnissen der Einzeltropfenuntersuchungen zur Validierung des Multikomponenten-Verdampfungsmodells in Kapitel 5.

Für den Kraftstoff L1+Toluol sind in Bild 6.5 die Flüssigmassen des enthaltenen Teilgemisches L1 sowie der aromatischen Einzelkomponente Toluol dargestellt. Toluol ist in diesem Kraftstoff zu 30% enthalten, wodurch auch hier der Unterschied in den Flüssigmassen der Teilgemische zu erklären ist. Aufgrund der höheren Flüchtigkeit von L1 gegenüber dem in Dieselkraftstoff enthaltenen Alkan-Gemisch, bildet sich der Entmischungseffekt zwischen den beiden Teilgemischen in diesem Fall weniger deutlich aus. Weiterhin ist zu bemerken, dass die Flüssigmengen der aromatischen Anteile in beiden Kraftstoffen über den betrachteten Zeitraum einen nahezu gleichen Verlauf aufweisen. Toluol hat aufgrund seiner höheren Flüchtigkeit einen leicht geringeren Flüssiganteil als das Aromaten-Gemisch im Dieselkraftstoff. Dieser Effekt konnte bereits im Rahmen der Untersuchungen einfacher Einspritzvorgänge zur Modellvalidierung in Kapitel 5.2 beobachtet werden.

Über die Betrachtung der Flüssigmasse im Brennraum hinaus, wird zusätzlich das Luftverhältnis λ , bezogen auf das relative Brennraumvolumen über der Kurbelwellenstellung für die verschiedenen Kraftstoffe untersucht. In den Abbildungen 6.6 bis 6.9 sind daher die relativen Brennraumvolumina für die angegebenen Luftverhältnissbereiche über der Kurbelwellenstellung für die einzelnen Kraftstoffe dargestellt. Mit diesen Darstellungen lässt sich somit eine globale Bewertung zur Güte der Homogenisierung der verdampften Kraftstoffanteile im Brennraum vornehmen. Die Kraftstoffe L1 sowie L1+Toluol weisen eine deutlich stärkere Verdampfungsrate im Vergleich zu Dieselkraftstoff und SMDS auf, wie bereits anhand von Bild 6.3 erläutert

wurde. Es geht somit in gleicher Zeit mehr Brennstoff in den gasförmigen Zustand über, was von Beginn des Verdampfungsvorganges an, zu einer niedrigeren Konzentration fester Gemischbereiche im Brennraum führt. Dieser Zusammenhang zeigt sich im Vergleich der Bilder 6.6 und 6.7 mit den Bildern 6.8 und 6.9. Der Bereich des Luftverhältnisses von $0 < \lambda < 1$ ist bei L1 sowie L1+Toluol sehr schwach ausgeprägt. Die Zumischung von Toluol zum synthetischen Kraftstoff L1 reduziert die Bereiche von $0 < \lambda < 1$ und $1 < \lambda < 2$ nochmals, siehe Bild 6.6 und 6.7.

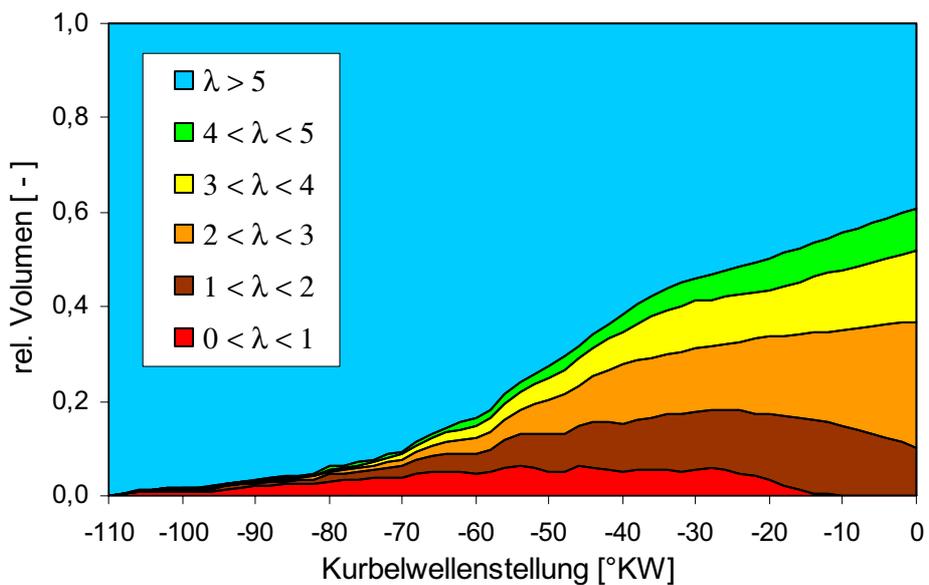


Bild 6.6: Luftverhältnis λ pro relativem Brennraumvolumen für L1

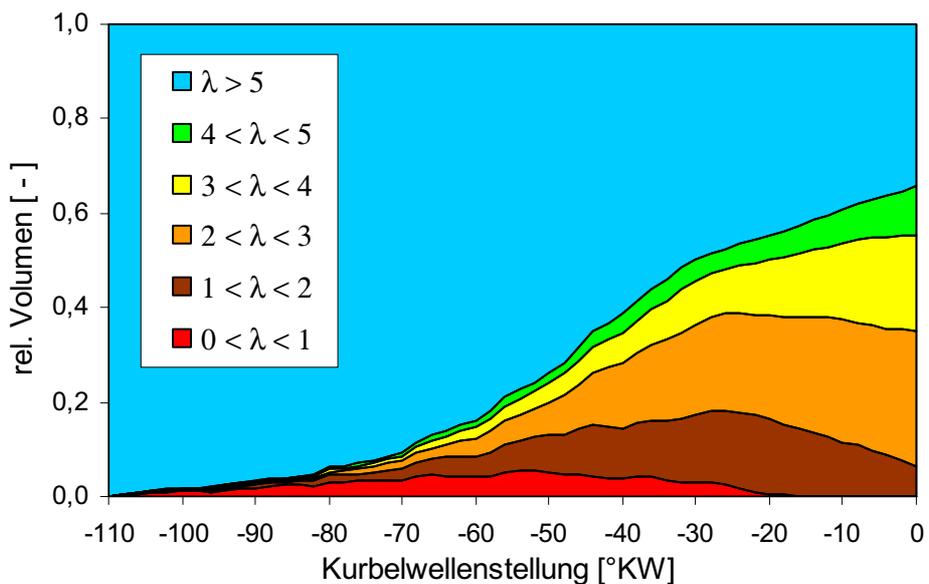
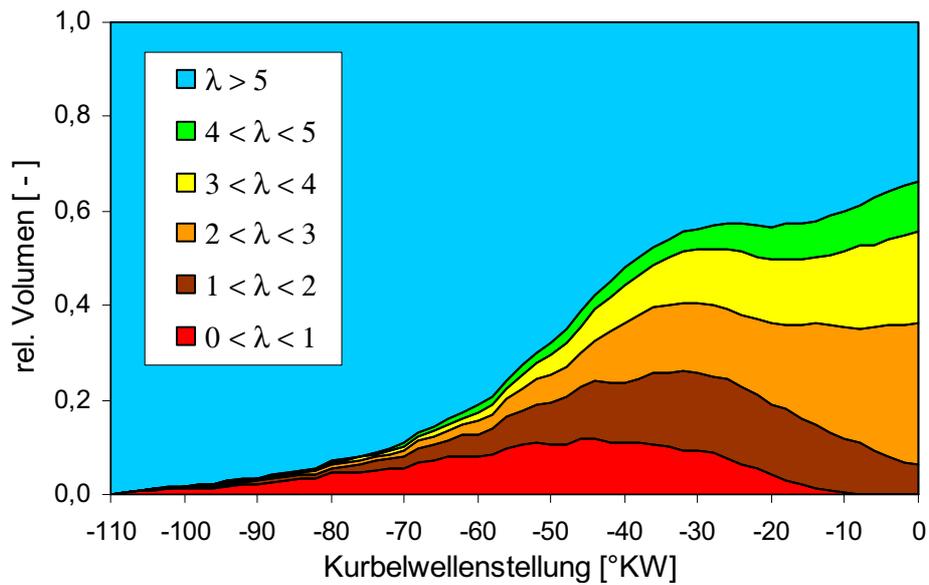
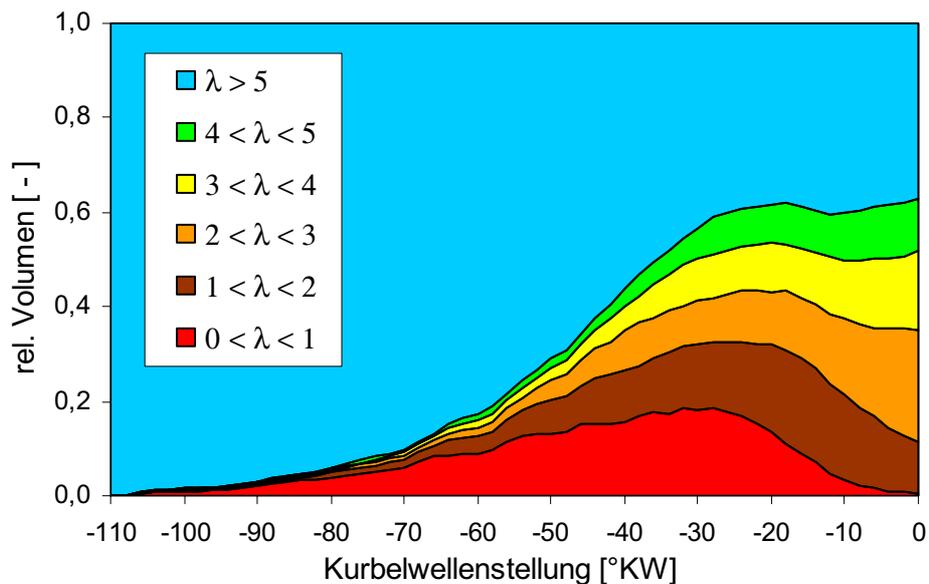


Bild 6.7: Luftverhältnis λ pro relativem Brennraumvolumen für L1+Toluol

Bild 6.8: Luftverhältnis λ pro relativem Brennraumvolumen für DieselkraftstoffBild 6.9: Luftverhältnis λ pro relativem Brennraumvolumen für SMDS

Die Darstellungen der Luftverhältnissbereiche für Dieselkraftstoff und SMDS zeigen im Bereich von $0 < \lambda < 1$ und $1 < \lambda < 2$ deutlich höhere Kraftstoffkonzentrationen, was auf die geringere Verdampfungsrate dieser schwerflüchtigen Kraftstoffe zurückzuführen ist. Der schwerflüchtigste Kraftstoff SMDS zeigt hierbei bis zum oberen Totpunkt sowohl bei $0 < \lambda < 1$ als auch bei $1 < \lambda < 2$ die höchsten Anteile dieser Luftverhältnissbereiche. Somit ist festzustellen, dass leichtsiedende Kraftstoffe durch die früher einsetzende Verdampfung deutliche Vorteile hinsichtlich einer verbesserten Gemischbildung aufweisen.

Zusätzlich zu den Auswertungen dieser globalen Größen, werden im weiteren Verlauf exemplarisch für den leichtsiedenden Kraftstoff L1 sowie für schwersiedenden Dieselkraftstoff das Luftverhältnis λ ortsabhängig unter Betrachtung von Brennraum-schnittbildern der 3D-CFD-Simulationen dargestellt. So können die Vorgänge der Kraftstoffverdampfung und Gemischbildung im Brennraum auch räumlich aufgelöst betrachtet werden, was für die Beurteilung der Homogenisierungseigenschaften der verschiedenen Kraftstoffe von wesentlicher Bedeutung ist. Es werden die in Bild 6.2 dargestellten Schnittebenen betrachtet und, wie in Bild 6.10 zu erkennen ist, nebeneinander abgebildet. In der linken Bildhälfte befindet sich die Schnittebene des Einspritzstrahls mit einer Strahlage von 50° . In der rechten Hälfte beträgt der Strahlagenwinkel 40° . Der zentrale Einspritzstrahl wird mit beiden Ebenen erfasst.

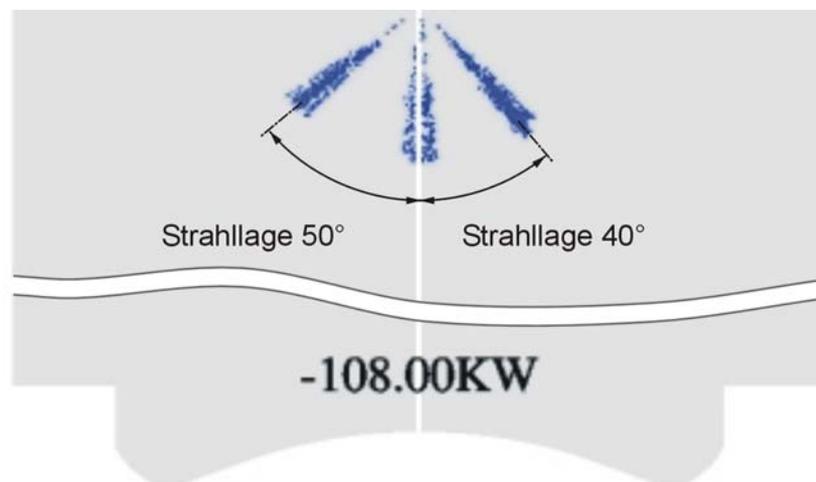


Bild 6.10: Strahlagen der Vielloch-Einspritzdüse und betrachtete Schnittebenen

Analog zu dieser Anordnung sind in den folgenden Bildern zu bestimmten Zeitpunkten während der Einspritzung die Luftverhältnisschnittbilder für L1 (Bild 6.11) und Dieselkraftstoff (Bild 6.12) dargestellt. Wie bereits anhand der Bilder 6.6 und 6.8 gezeigt wird, sind auch in den vorliegenden Schnittbildern bei Dieselkraftstoff deutlich größere Bereiche mit einem Luftverhältnis von $\lambda < 1$ als bei L1 zu beobachten. Zum Zeitpunkt der Selbstzündung, ab ca. -20°KW [Pöt05] weist Dieselkraftstoff erheblich fettere Gemischzonen auf als der synthetische Brennstoff L1. Darüber hinaus liegt der Anteil an flüssigem Dieselkraftstoff im Brennraum zu diesem Zeitpunkt im Vergleich zu L1 doppelt so hoch (Bild 6.3). Somit lässt sich auch aufgrund dieser vorliegenden Ergebnisse feststellen, dass die untersuchten leichtsiedenden Kraftstoffe deutlich bessere Gemischbildungs- und Homogenisierungseigenschaften aufweisen.

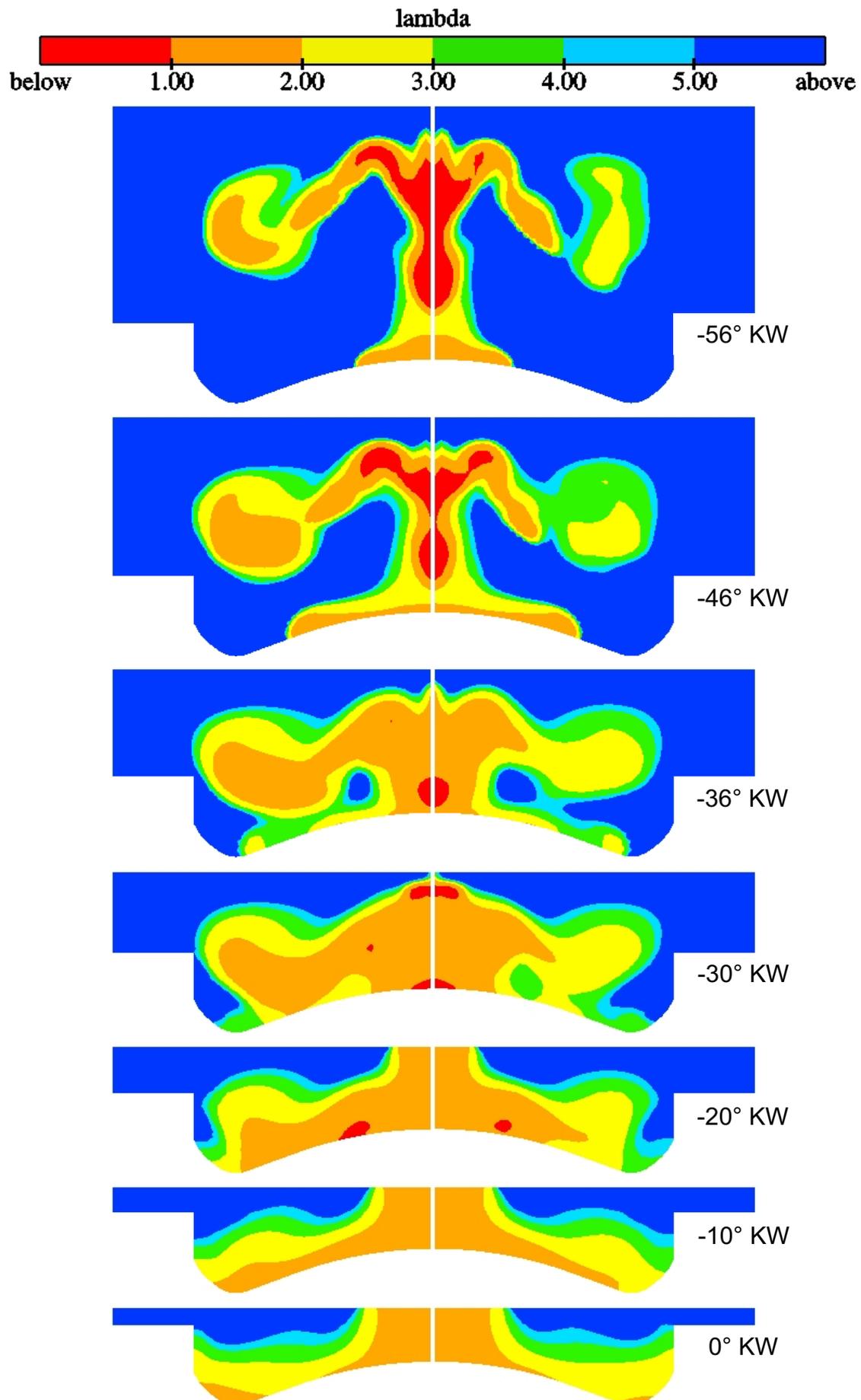


Bild 6.11: Schnittbilder des Luftverhältnisses λ für den synthetischen Kraftstoff L1

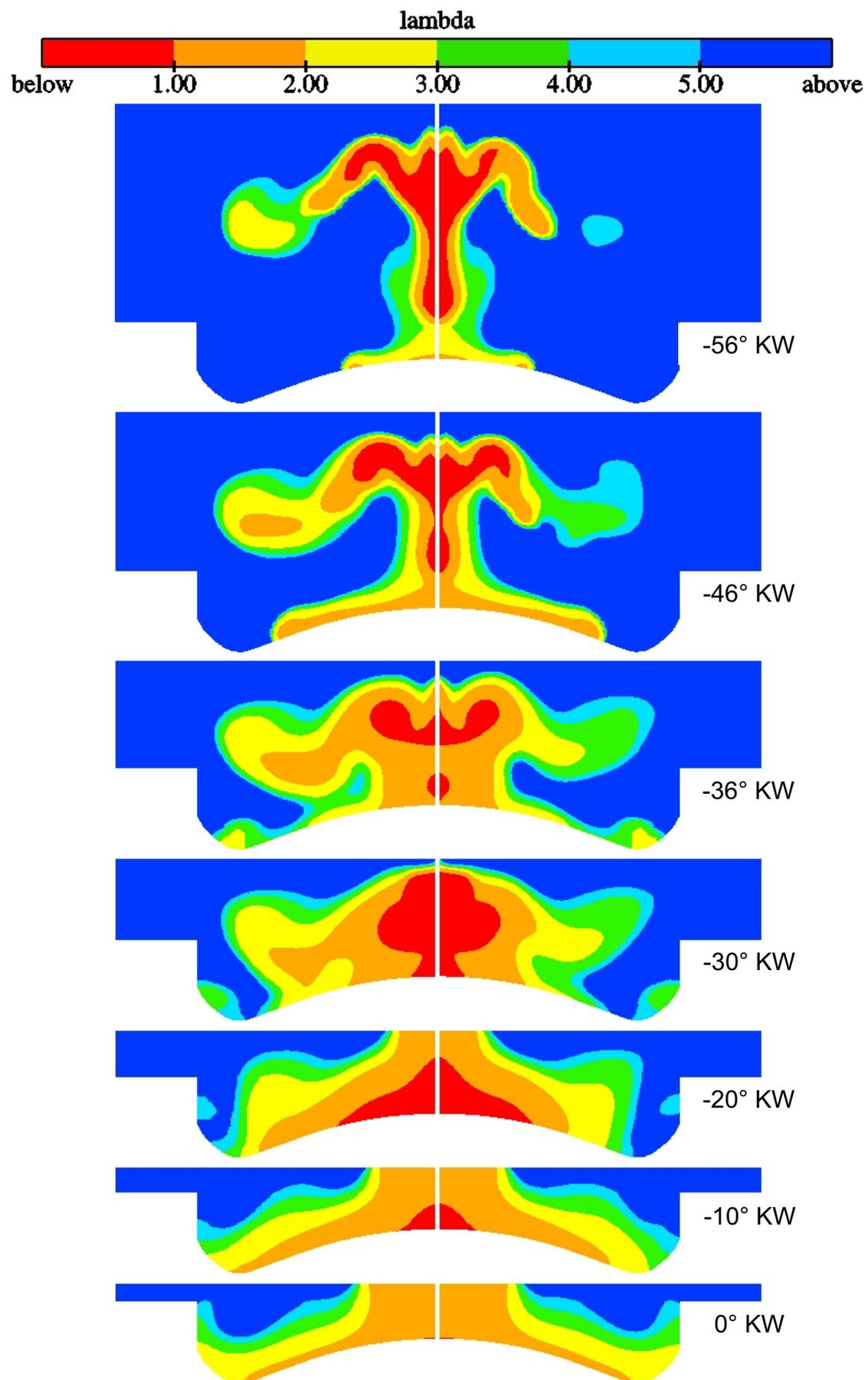


Bild 6.12: Schnittbilder des Luftverhältnisses λ für Dieselkraftstoff

6.3 Bewertung

In Kapitel 6 – Berechnung der Gemischbildung in einem HCCI-Einzylinder Forschungsmotor – werden abschließend Untersuchungen zur Verdampfung und Gemischbildung verschiedener Kraftstoffe in einem für das dieselmotorische HCCI-Verfahren ausgelegten Einzylinder Forschungsmotor vorgestellt. Die Randbedingungen und wesentlichen Ergebnisse dieser Berechnungen können folgendermaßen zusammengefasst werden:

- Als Einspritzstrategie wurde eine 9-Puls Mehrfacheinspritzung (Einspritzbeginn: -110°KW , Dauer: 80°KW) unter Einsatz der in Kapitel 2.1.2 beschriebenen 13-Loch Einspritzdüse gewählt.
- Es wurde das Gemischbildungsverhalten von Dieselkraftstoff, L1+Toluol, L1 und SMDS untersucht. Die CFD-Berechnungen für Dieselkraftstoff (Alkane, Aromaten) sowie L1+Toluol wurden unter Verwendung des neu entwickelten MK-2VT-Modells durchgeführt. Bei den Kraftstoffen L1 und SMDS kam das MK-1VT-Modell zum Einsatz.
- Wie bereits anhand der Validierungen nachgewiesen wurde, bildet das Multi-komponenten-Verdampfungsmodell auch bei diesen Berechnungen die unterschiedlichen Eigenschaften der verwendeten Kraftstoffe zutreffend ab.
- Anhand der Verläufe der restlichen Flüssigmasse im Brennraum und den Brennraumschnittbildern bezüglich Luftverhältnis zeigen sich die wesentlichen Unterschiede zwischen den untersuchten Kraftstoffen hinsichtlich Gemischbildung und Homogenisierung. Bei den leichtflüchtigen Kraftstoffen L1 sowie L1+Toluol ist eine stärkere Homogenisierung mit einem geringeren Restanteil an flüssigem Kraftstoff zu beobachten als bei schwerflüchtigem Dieselkraftstoff oder SMDS.
- Am Beispiel von Dieselkraftstoff und L1+Toluol wird der Einfluss der Aromaten im Kraftstoff deutlich. Die aromatischen Bestandteile haben eine deutlich höhere Verdampfungsrate als die in den Kraftstoffen enthaltenen Alkan-Anteile.
- Die Veränderungen in der Flüssig- und Gasphase sowie Entmischungsvorgänge im eingespritzten flüssigen Kraftstoff werden mit dem Verdampfungsmodell, wie bereits in der Modellvalidierung (Kapitel 5) nachgewiesen, auch in den hier vorgestellten CFD-Simulationen zur Gemischbildung verschiedener Kraftstoffe in einem Einzylinder Forschungsmotor wiedergegeben.

Zusammenfassend lässt sich aufgrund der vorliegenden Untersuchungen somit feststellen, dass mit dem in der vorliegenden Arbeit entwickelten Multikomponenten-Verdampfungsmodell eine detaillierte Betrachtung von Gemischbildungs- und Homogenisierungseigenschaften in Abhängigkeit verschiedener Kraftstoffzusammensetzungen ermöglicht wird. Zudem erhält man Informationen über die Ausbreitung und Verteilung der verschiedenen im Kraftstoff enthaltenen Komponenten im Brennraum und daher die notwendigen Parameter für eine Modellierung der nachfolgenden Zündungs- und Verbrennungsprozesse.

7 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Multikomponenten-Verdampfungsmodell entwickelt, welches auf dem statistischen Ansatz der Thermodynamik kontinuierlicher Gemische basiert. Im Gegensatz zu konventionellen Verdampfungsmodellen, welche zur Abbildung von Kraftstoffen jeweils nur eine Einzelkomponente als Ersatzkraftstoff verwenden, ist mittels des neuen Modellansatzes eine detailliertere Beschreibung von Kraftstoffen möglich. Die Bestandteile eines Kraftstoffs werden in diesem Modell nicht durch die Summe diskreter Einzelkomponenten abgebildet, sondern als kontinuierliches Gemisch mittels Verteilungsfunktion dargestellt. Das neu entwickelte Verdampfungsmodell beinhaltet die Kopplung zweier Verteilungsfunktionen. Mit jeder einzelnen Funktion kann ein separates kontinuierliches Gemisch beschrieben werden. Diese Modellstruktur ermöglicht es daher, mit jeder Verteilung jeweils ein Gemisch homologer Kraftstoffkomponenten abzubilden. Es können somit Multikomponenten-Gemische, bestehend aus zwei verschiedenen homologen Gruppen (z.B. Alkane, Aromaten), modelliert werden.

Mit dem verwendeten Ansatz können sowohl Kraftstoffe unterschiedlicher Zusammensetzung als auch schwer- oder leichtsiedende Kraftstoffe durch Variation der Form und Lage der Verteilungsfunktion abgebildet werden. Zusätzlich ist jeweils durch Veränderung der Form einer Verteilungsfunktion auch eine Einzelkomponente darstellbar. Im Unterschied zu Einzelkomponenten-Modellen wird die zeitliche Änderung der Zusammensetzung von Flüssig- und Gasphase während des Verdampfungsprozesses berücksichtigt. Die Zusammensetzungen und Anteile der jeweiligen Teilgemische in der flüssigen und gasförmigen Phase sind zu jeder Zeit und an jedem Ort bestimmbar. Um unterschiedliche Gemische abbilden zu können, werden die benötigten Stoffeigenschaften mittels Korrelationen für jede Verteilungsfunktion separat hinterlegt.

Die Allgemeingültigkeit des entwickelten Multikomponenten-Verdampfungsmodells wurde anhand verschiedener Validierungsrechnungen nachgewiesen. In einem ersten Schritt wurden Berechnungen zur Verdampfung von Einzeltropfen unterschiedlicher Zusammensetzung durchgeführt. Diese Untersuchungen dienten dazu, das neu entwickelte Modell mit zwei Verteilungsfunktionen auf physikalische und mathematisch-numerische Richtigkeit zu überprüfen. Das neue Modell wurde mit bisherigen Verdampfungsmodellen (STD- u. MK-1VT-Modell) verglichen. Außerdem wurden Einzeltropfen unterschiedlicher Zusammensetzungen berechnet. Es konnten

so die Einflüsse von leichtflüchtigen sowie schwerflüchtigen Komponentengemischen und Einzelkomponenten dargestellt werden. Auch die Auswirkungen von Bestandteilen unterschiedlicher Struktur (Alkane, Aromaten) auf den Verdampfungsprozess konnten wiedergegeben werden.

Im zweiten Schritt erfolgten Berechnungen einfacher Einspritzvorgänge. Die Ergebnisse dieser Simulationsrechnungen wurden mit parallel durchgeführten optischen Einspritzstrahluntersuchungen an einer schnellen Kompressionsmaschine (Einhubtriebwerk) abgeglichen. Hier zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Sowohl die Eindringtiefe der flüssigen Phase als auch der Gasphase kann mit dem Modell beschrieben werden. Darüber hinaus werden die Unterschiede in den Verdampfungseigenschaften im Vergleich verschiedener Kraftstoffe dargestellt und die Vorgänge der Zusammensetzungsänderung in der Gasphase beschrieben. Es bestätigten sich die bereits bei den Einzeltropfenuntersuchungen gewonnenen Erkenntnisse zum Verdampfungsverhalten der betrachteten Kraftstoffe.

Den Abschluss der vorliegenden Arbeit bilden Untersuchungen zur Verdampfung und Gemischbildung verschiedener Kraftstoffe in einem für das dieselmotorische HCCI-Verfahren ausgelegten Einzylinder Forschungsmotor. Auch hier bildet das Multi-komponenten-Verdampfungsmodell die unterschiedlichen Eigenschaften der verwendeten Kraftstoffe zutreffend ab. Mit dem in der vorliegenden Arbeit entwickelten Multi-komponenten-Verdampfungsmodell ist somit eine Berechnung der Gemischbildung und Homogenisierung in Abhängigkeit verschiedener Kraftstoffzusammensetzungen möglich. Außerdem liefert das Modell zeitlich aufgelöste Informationen über die Ausbreitung und Verteilung der verschiedenen, im jeweils untersuchten Kraftstoff enthaltenen Komponenten im Brennraum und daher die notwendigen Parameter für eine Modellierung der nachfolgenden Zündungs- und Verbrennungsprozesse.

8 Ausblick

Ziel weiterführender Forschungsarbeiten sollte die Modellierung erweiterter Zünd- und Verbrennungsmodelle sein. Diese müssten den Multikomponentencharakter der zu untersuchenden Kraftstoffe sowie die Strukturen und Eigenschaften der verschiedenen enthaltenen Komponenten mit berücksichtigen. Die Kopplung dieser Modelle mit dem in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Multikomponenten-Verdampfungsmodell würde die Berechnung von motorischen Zyklen ermöglichen. Somit könnten die Auswirkungen unterschiedlicher Kraftstoffzusammensetzungen auf das Zünd- und Verbrennungsverhalten sowie die Schadstoffbildung direkt ermittelt werden. Mit dieser Modellkette wäre es möglich, definierte Kraftstoffzusammensetzungen zu ermitteln, um ein optimiertes Zusammenspiel von Gemischbildungseigenschaften und Zündverhalten bei minimaler Schadstoffbildung zu erreichen. Das weitere Potenzial bestehender sowie zukünftiger Kraftstoffstrategien könnte so mittels theoretischer Berechnungen abgeschätzt und die Umfänge kostenintensiver motorischer Untersuchungen damit deutlich reduziert werden.

Das vorgestellte Multikomponenten-Verdampfungsmodell auf Basis zweier Verteilungsfunktionen ermöglicht die Abbildung von Kraftstoffen bestehend aus Komponenten zweier verschiedener homologer Gruppen. Um jedoch komplexere Kraftstoffe abbilden zu können, bedarf es einer Weiterentwicklung des Modells. So ist die Erweiterung um eine oder mehrere Verteilungsfunktionen zur Darstellung zusätzlicher homologer Komponentengemische denkbar. Eine wesentliche Voraussetzung hierfür ist jedoch die Ermittlung von Stoffdaten der in den zu untersuchenden Kraftstoffen enthaltenen zusätzlich abzubildenden Komponenten, welche für die Modellierung notwendig sind. So ist beispielsweise die Abbildung der iso-Alkane im Dieselmotorkraftstoff als einzelne homologe Komponentengruppe bisher nicht möglich, da einerseits die genaue Angabe der enthaltenen Isomere und dadurch andererseits auch die benötigten Stoffdaten der iso-Alkane fehlen. Des Weiteren sind bestehende lineare Stoffwertkorrelationen zu überprüfen und gegebenenfalls durch komplexere Korrelationen zu ersetzen, um so eine verbesserte Abbildung experimentell ermittelter Werte zu erreichen.

Literaturverzeichnis

- [Agg87] Aggarwal, S.K.: Modeling of a Dilute Vaporizing Multicomponent Fuel Spray, Int. J. Heat Mass Transfer, Vol. 30, Nr .9, S. 1949-1961, 1987
- [Ams97] Amsden, A.A.: KIVA-3V: A Block Structured KIVA Program for Engines with Vertical or Canted Valves, Los Alamos Report, LA-13313-MS, 1997
- [AOB89] Amsden, A.A.; O'Rourke, P.J.; Butler, T.D.: KIVA-II – A Computer Program for Chemically Reactive Flows with Sprays, Los Alamos National Labs., LA-11560-MS, 1989
- [ARe95] Ayoub, N.S.; Reitz, R.: Multidimensional Computation of Multicomponent Spray Vaporization and Combustion, SAE-Paper 950285, 1995
- [Bae96] Baehr, H.D.: Thermodynamik, 9. Auflage, Springer Verlag, 1996
- [Bar03] Bartsch, C.: Dieselkraftstoff aus Biomasse und Müll, Synfuel und Sunfuel, ATZ, Jahrgang 105, S. 42-45, 2003
- [Bar04] Bartsch, C.: Synthetischer Dieselkraftstoff als Weg in die Zukunft, MTZ, Jahrgang 65, S. 278-281, 2004
- [Bau05] Baumgarten, C.: Modeling of Spray and Mixture Formation in Internal Combustion Engines, Habilitation, Universität Hannover, 2005
- [BHW03] Burg, K.; Haf, H.; Wille, F.: Höhere Mathematik für Ingenieure, Band I Analysis, Teubner Verlag Stuttgart, 2003
- [BSL60] Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lightfoot, E.N.: Transport Phenomena, Wiley, New York, 1960
- [Bun04] Bundesregierung: Fortschrittsbericht 2004 zur nationalen Nachhaltigkeitsstrategie: Die Kraftstoffstrategie „Alternative Kraftstoffe und innovative Antriebe“, Berlin, 2004
- [CBP85] Cotterman, R.R.; Bender, R.; Prausnitz, J.M.: Phase Equilibria for Mixtures Containing very many components – Development and Application of Continuous Thermodynamics for Chemical Process Design, Ind. Eng. Chem. Process Des., Vol. 24, S. 194-203, 1985
- [CCM03] Carlowitz, O.; Claußen, M.; Maly, M.; Schindler, M.; Vogel, S.: Biogene Fischer-Tropsch-Kraftstoffe für zukünftige Antriebskonzepte, 20. int. VDI/VW-Gemeinschaftstagung, VDI-Berichte 1808, S. 439-449, 2003

- [CGP98] Curran, H.J.; Gaffuri, P.; Pitz, W.J.; Westbrook, C.K.: A Comprehensive Modeling, Study of n-Heptane Oxidation, Comb. Flame Vol. 114, 1998
- [Cho03] CHOREN Industries GmbH: Inbetriebnahme – Erfolgreicher Start der industriellen Produktion von synthetischem Kraftstoff aus erneuerbaren Rohstoffen, Pressemitteilung, 2.10.2003
- [CLL04] Clark, R.; Louis, J.; Lüke, W.; Warnecke, W., Shell Global Solutions; Gainsborough, M., Shell International, London; Jacometti, J., Shell International Gas, London: Der Einstieg in synthetische Kraftstoffe, 25. internationales Wiener Motorensymposium, S. 150-164, 2004
- [CPr86] Chou, G.F.; Prausnitz, J.M.: Adiabatic Flash Calculation for Continuous or Semicontinuous Mixtures Using an Equation of State. Elsevier Science Publisher B.V., Amsterdam, Vol. 30, S. 75-82, 1986
- [DFP05] Delbinski, T.; Fischer, M.; Pöttker, S.; Merker, G.P.: Optical Investigation of Multiple Injection of Synthetic Fuels for HCCI Operation, ILASS-Europe 2005, Orléans, 5. - 7.09.2005
- [DGM93] Deutsche Wissenschaftliche Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V.: DGMK Forschungsbericht 409 – Chemisch-physikalische Daten von Otto- und Dieselmotoren, Hamburg, 1993
- [DGM02] Deutsche Wissenschaftliche Gesellschaft für Erdöl, Erdgas und Kohle e.V.: DGMK Forschungsbericht 583 – Zusammensetzung von Dieselmotoren aus deutschen Raffinerien, Hamburg, 2002
- [DGM03] Duret, P.; Gatellier, B.; Miche, M.; Montreiro, L.; Zima, P.; Marotiaux, D.; Blundell, D.; Ganser, M.; Zhao, H.; Perozzi, M.; Araneo, L.: Innovative Diesel HCCI Combustion Process for Passenger Cars, The European SPACE LIGHT Project, EAEC Congress, Paper C108, 2003
- [Eck03] Eckert, P.: Pyrometrische Temperatur- und Rußmessung an einem direkt-einspritzenden Forschungseinzelzylinder im HCCI-Betrieb, Diplomarbeit, Universität Hannover, 2003
- [FCG04] Filipi, Z.S.; Chang, J.; Guralp, O.A.; Assanis, D.N.; Kuo, T.-W.; Najt, P.M.; Rask, R.B.: New Heat Transfer Correlation for An HCCI Engine Derived From Measurements of Instantaneous Surface Heat Flux, SAE-Paper 2004-01-2996, 2004
- [Fel01] Feldmann, D.: Repetitorium der numerischen Mathematik, Binomi Verlag, 1. Auflage, Springer, 2001

- [FHM03] Friess, W.; Herrmann, H.-O.; Maly, R.R.; Schnell, M.; Schaberg, P.: Emissionsverbesserung durch GTL-Dieselmotoren, 20. internationale VDI/VW-Gemeinschaftstagung, VDI-Berichte 1808, S. 265-279, 2003
- [Fnr03] Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe: Von der Forschung zum Markt, Gülzow, 2003
- [FSG66] Fuller, N.F.; Schettler, P.D.; Giddings, J.C.: A new Method for Prediction of Binary Gas-Phase Diffusion Coefficients, Ind. Eng. Chem., Vol. 58, Nr.5, S. 18-27, 1966
- [GMü02] Groenendijk, A.; Müller, E.: Mixture Formation and Combustion Control for Low Emission DI Diesel Combustion with HCCI-Characteristics, Thiesel 2002, S. 145-157, 2002
- [GWa02] Gatellier, B.; Walter, B.: Development of the High Power NADI™ Concept Using Dual Mode Diesel Combustion to Achieve Zero Nox and Particulate Emissions, Thiesel 2002 Thermo- and Fluid-Dynamic Processes in Diesel Engines, Valencia, S. 131-143, 2002
- [GWi74] Grassmann, P.; Widmer, F.: Einführung in die thermische Verfahrenstechnik, de Gruyter, Berlin, 1974
- [Hal99] Hallett, W.L.H.: A Simple Model for the Vaporization of Droplets with Large Numbers of Components, Combustion and Flame, 1999
- [HDM75] Hubbard, G.L.; Denny, V.E.; Mills, A.F.: Droplet Evaporation – Effects of Transient and Variable Properties. Int. J. Heat Mass Transfer, Vol.18, S. 1003-1008, 1975
- [HGr01] Hallett, W.; Grimwood, C.: A Simple Continuous Droplet Evaporation Model with Multiple Distribution Functions, Combustion Inst. Canadian Sect. Spring Meeting, S. 31.1-31.6, 2001
- [JBo85] Jin, J.D.; Borman, G.L.: A Model for Multicomponent Droplet Vaporization at High Ambient Pressures, SAE-Paper 850264, 1985
- [JGo93] Jia, H.; Gogos, G.: High Pressure Droplet Evaporation; Effects of Liquid-Phase Gas Solubility, Int. J. Heat and Mass Transfer, Vol. 36, S. 4419-4431, 1993
- [KAS04] Kawamoto, K.; Araki, T.; Shinzawa, M.; Kimura, S.; Koide, S.; Shibuya, M.: Combination of Combustion Concept and Fuel Property for Ultra-Clean DI Diesel, SAE-Paper 2004-01-1868, 2004

- [KBr33] Katz, D.; Brown, G., Vapor Pressure and Vaporization of Petroleum Fractions, Ind. Eng. Chem. 25, 1373 ff., 1933
- [KKH00] Kondo, M.; Kimura, S.; Hirano, I.; Uraki, Y.; Maeda, R.: Development of noise reduction technologies for a small direct-injection diesel engine, SAE-Paper 20004142, 2000
- [Kli95] Klingsporn, M.: Modellierung der Mehrkomponenten-Verdunstung bei der dieselmotorischen Einspritzung. VDI-Verlag, 1995
- [Kne93] Kneer, R.: Grundlegende Untersuchungen zur Sprühstrahlausbreitung in hochbelasteten Brennräumen: Tropfenverdunstung und Sprühstrahlcharakterisierung, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1993
- [Koh03] Kohnen, C.: Volkswagen AG (Konzernforschung) – Institut für Technische Verbrennung (Universität Hannover), interne Kommunikation, 2003
- [Lep90] Leppard, W. R. The Chemical Origin of Fuel Octane Sensitivity, SAE-Paper 902137, 1990
- [Lip99] LIPPERT, A. M.: Modelling of Multicomponent Fuels With Application to Sprays and Simulation of Diesel Engine Cold Start, Dissertation, 1999
- [LRe97] Lippert, A.M., Reitz, R.D.: Modeling of Multicomponent Fuels Using Continuous Distributions with Application to Droplet Evaporation and Sprays, SAE-Paper 972882, 1997
- [Mas79] Mascheck, H.-J.: Grundlagen der Wärme- und Stoffübertragung, VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie, 1. Auflage, Leipzig, 1979
- [MGR01] Müller, E.; Groenendijk, A.; Raatz, T.: Homogene Dieselerbrennung – Die Lösung des NOx-Partikel-Problems“, Berichte und Informationen 4. Dresdener Motorenkolloquium, 2001
- [MKK02] Meyer, S.; Krause, A.; Krome, D.; Merker, G.P.: Ein flexibles Piezo-Common-Rail System mit direktgesteuerter Düsenadel, MTZ, Jahrgang 63, S. 86-93, 2002
- [Mol97] Mollenhauer, K.: Handbuch Dieselmotoren, Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, ISBN 3-540-62514-3, 1997
- [Mot03] Motortechnische Zeitschrift (mot): Diesel aus der Natur, Nr. 16, S. 98-99, 2003

- [MSS04] Merker, G.P.; Schwarz, C.; Stiesch, G.; Otto, F.: Verbrennungsmotoren Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung, Teubner Verlag, 2. Auflage, Stuttgart, 2004
- [Olt93] Olthoff, P.: Modellierung des Tropfenverdunstungsprozesses bei überkritischem Umgebungsdruck. Dissertation/DLR-Forschungsbericht, 1993
- [Pag03] Pagel, S.: Verdampfungs- und Selbstzündungsmodelle für Mehrkomponentengemische, Dissertation, VDI-Verlag, 2003
- [Pap84] Papoulis, A.: Probability, Random Variables, and Stochastic Processes, 2. Auflage, McGraw-Hill, Book Company, New York, 1984
- [PFM05] Pöttker, S.; Fischer, M.; Merker, G.P.; Wagner, U.; Spicher, U.: Verwendung der Mehrfacheinspritzung von ottoähnlich verbrennenden Kraftstoffen auf Basis des homogenen Kompressionsbrennverfahrens (HCCI), Direkteinspritzung im Ottomotor, 6. Tagung, Haus der Technik, Essen, 22. - 23.06.2005
- [PGB96] Pucher, G.R.; Gardiner, D.P.; Bardon, M.F.; Battista, V.: Alternative Combustion Systems for Piston Engines Involving Homogeneous Charge Compression Ignition Concepts – A Review of Studies Using Methanol, Gasoline and Diesel Fuel, SAE-Paper 962063, 1996
- [Pis02] Pischinger, S.: Vorlesungsumdruck Verbrennungsmotoren, Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen, RWTH Aachen, 23. Auflage, 2002
- [Pöt05] Pöttker, S.: Optische Untersuchungen zum Einfluss synthetischer Kraftstoffe auf die homogene Kompressionszündung (HCCI), Dissertation, Universität Hannover, 2005
- [RFS05] Rakowski, S.; Fischer, M.; Stiesch, G.; Merker, G.P.: Advanced evaporation models for gasoline and diesel spray investigations, ILASS-Europe 2005, Orléans, 5. - 7.09.2005
- [RMa52] Ranz, W.E.; Marshall, W.R.: Evaporation from Drops, Chem. Engr. Prog., Vol. 48, S. 141-146 u. 173-180, 1952
- [RPA53] Rossini, F.D.; Pitzer, K.S.; Arnett, R.L.; Braun, R.M.; Pimentel, G.C.: Selected Values of Physical and Thermodynamic Properties of Hydrocarbons and Related Compounds, Carnegie Press, Carnegie Institute of Technology, Pittsburgh, Pennsylvania, 1953
- [RPP87] Reid, R.C.; Prausnitz, J.M.; Poling, B.E.: The Properties of Gases and Liquids, McGraw-Hill Book Company, 4. Auflage, 1987

- [RSh66] Reid, R.C., Sherwood, T.K.: The Properties of Gases and Liquids McGraw-Hill Book Company, 2. Auflage, New York, 1966
- [RSi95] Rosseel, E.; Sierens, R.: Modeling the Vaporization of a Gasoil Droplet in a Diesel Engine, CIMAC, 1995
- [Rud04] Rudloff, M.: SunDiesel made by CHOREN – Die 50 MW-Demonstrationsanlage der CHOREN FUEL Freiberg GmbH & Co. KG, BBE Fachkongress für Biokraftstoffe 29./30.11.2004, Berlin, 2004
- [RYu83] Renksizbulut, M.; Yuen, M.C.: Numerical Study of Droplet Evaporation in a High Temperature Stream, J. of Heat and Mass Transfer, Vol. 105, S. 384-388, 1983
- [Sch03] Schloz, E.: Untersuchungen zu homogenen Dieselerbrennung bei innerer Gemischbildung, Dissertation, Universität Karlsruhe, 2003
- [Sch04] Schmidt, A.: Grundlagenuntersuchungen für eine Technikumsanlage zur Holzverzuckerung, Dissertation, Universität Rostock, 2004
- [See04] Seebode, J.: Dieselmotorische Einspritzratenformung unter dem Einfluss der Druckmodulation und Nadelsitzdrosselung, Dissertation, Universität Hannover, 2004
- [SGr58] Sparrow, E.M.; Gregg, J.L.: The variable Fluid Problem in free convection, Transactions of ASME 80, S. 879-886, 1958
- [SHK94] Streitwieser, C. H.; Heathcock; Kosower, E. M.: Organische Chemie, 2. Auflage, ISBN: 3-527-29005-2, 1994
- [SKS01] Steiger, W.; König, A.; Schumacher, V.; Heinrich, H.: Die Volkswagen Strategie zum hocheffizienten Antrieb, 22. Wiener Motorensymposium 2001, S. 47-65, Wien, 2001
- [SSK04] Steiger, W.; Schumacher, V.; Kohnen, C.: Potenziale synthetischer Kraftstoffe im CCS Brennverfahren, 22. Internationales Wiener Motorensymposium 2004, S. 165-182, Wien, 2004
- [Ste04] Stegemann, J.: Optische und motorische Untersuchungen der dieselmotorischen Einspritzverlaufsformung unter Verwendung eines piezoaktuierten Experimentaleinspritzsystems, Dissertation, Universität Hannover, 2004
- [Sti03] Stiesch, G.: Modeling Engine Spray and Combustion Processes, Springer Verlag Berlin, Heidelberg, New York, 2003

- [SWL03] Steiger, W.; Warnecke, W.; Louis, J.: Potenziale des Zusammenwirkens von modernen Kraftstoffen und künftigen Antriebskonzepten, ATZ, Jahrgang 105, S. 268-276, 2003
- [THa95] TAMIM, J.; HALLET, W. L. H.: A Continuous Thermodynamics Model for Multicomponent Droplet Vaporization, Chemical Engineering Science Vol.50, Nr.18, S. 2933-2942, 1995
- [TSA00] Tsurushima, T.; Shimazaki, N.; Asaumi, Y.: Gas Sampling Analysis of Combustion Processes in a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine, Int. J. Engine Research, Vol. 1, Nr. 4, S. 337-352, 2000
- [Var75] Vargaftik, N.B.: Tables on the Thermophysical Properties of Liquid and Gases, Hemisphere Publishing Corp., 1975
- [Wes00] Westbrook, C.K. Chemical Kinetics of Hydrocarbon Ignition in Practical Combustion Systems, Proc. of the Combustion Institute, Vol. 28, 2000
- [WPL91] Westbrook, C. K.; Pitz, W. J.; Leppard, W. R.: The Autoignition Chemistry of Paraffinic Fuels and Pro-Knock and Anti-Knock Additives: A Detailed Chemical Kinetic Study, SAE-Paper 912314, 1991
- [ZRX01] Zhu, G.S.; Reitz, R.D.; Xin, J.; Takabayashi, T.: Characteristics of Vaporizing Continuous Fuel Sprays in a Port Fuel Injection Gasoline Engine, SAE-Paper 2001-01-1231, 2001
- [ZYM01] Zheng, J.; Yang, W.; Miller, L.; Cernansky, N.P.: Prediction of Pre-Ignition Reactivity and Ignition Delay for HCCI Using a Reduced Chemical Kinetic Model, SAE-Paper 2001-01-1025, 2001
- [ZYM02] Zheng, J.; Yang, W.; Miller, L.; Cernansky, N.P.: A Skeletal Chemical Model for the HCCI Combustion Process, SAE-Paper 2002-01-0423, 2002

Anhang

Die Verteilungsfunktionen und damit die Parameter α , β und γ , mit denen die unterschiedlichen Kraftstoffgemische abgebildet werden, sind dem Siedeverlauf des jeweiligen Gemisches angepasst. Anhand der zugehörigen Siedelinie wird die Form der Verteilungsfunktion so gewählt, dass die verdampften Anteile bei Erreichen einer bestimmten Temperatur mit dem Anteil der Fläche unter der Verteilungsfunktion bis zu einer bestimmten Komponente übereinstimmen.

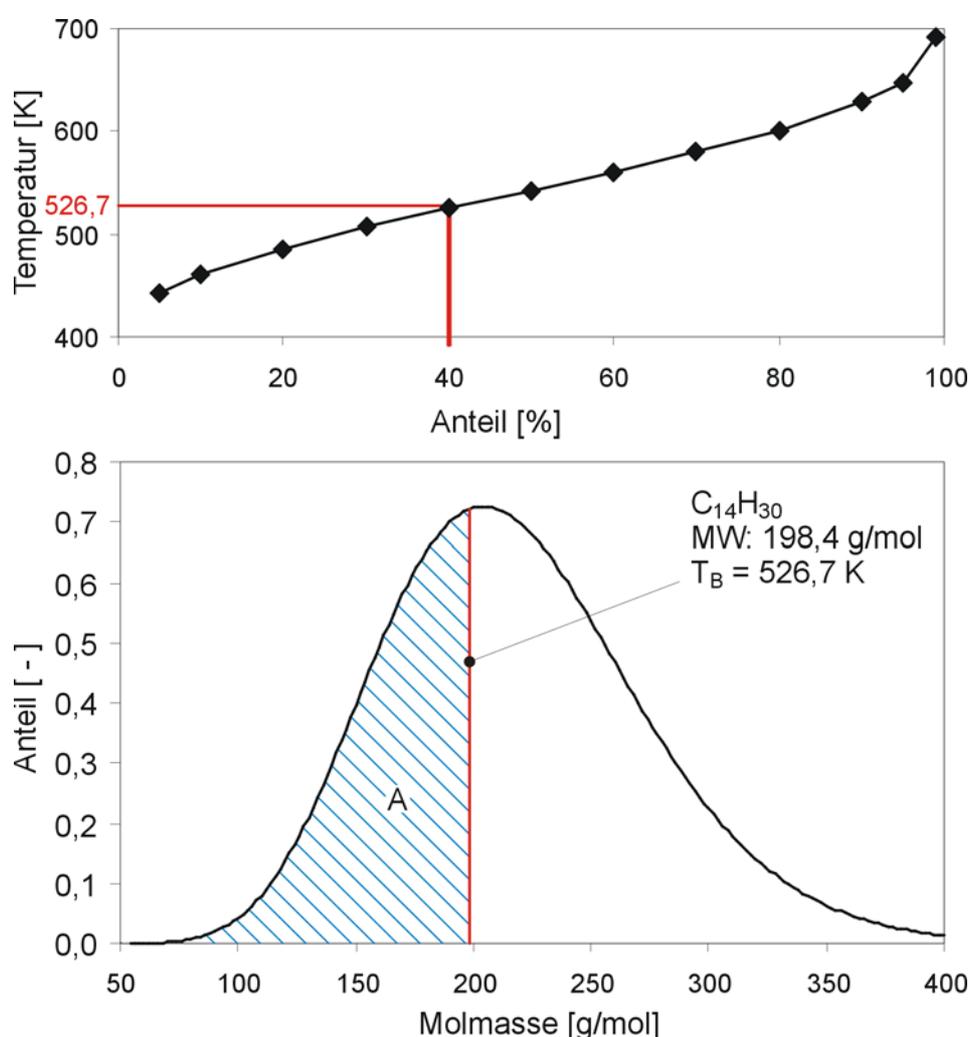


Bild A.1: Abgleich Siedelinie mit Verteilungsfunktion

Dieser Zusammenhang ist in Bild A.1 dargestellt. Der obere Teil zeigt die Siedelinie von Dieselkraftstoff, welche besagt, dass bei einer Temperatur von 526,7 K bereits 40% des Kraftstoffes verdampft sind. Die im abgebildeten Kraftstoffgemisch enthaltene Komponente Dodekan ($C_{14}H_{30}$) hat eine Siedetemperatur von 526,7 K.

Daraus ergibt sich, dass die Verteilungsfunktion so anzupassen ist, dass die Fläche „A“ unter der Verteilungsfunktion bis zu dieser Komponente gleich dem verdampften Anteil bei 526,7 K ist. Diese Anpassung erfolgt über den gesamten Siedebereich des Gemisches und es ergeben sich somit die in Tabelle A.1 aufgeführten Verteilungsparameter der verschiedenen Gemische.

| Verteilungsparameter | Lippert [Lip99] | Dieselverteilung | Alkanverteilung | Aromatenverteilung |
|----------------------|-----------------|------------------|-----------------|--------------------|
| α | 18,5 | 14,0 | 18,0 | 10,0 |
| β | 10,0 | 14,6 | 12,5 | 4,4 |
| γ | 0,0 | 0,0 | 0,0 | 78,2 |
| Θ [g/mol] | 185,0 | 204,4 | 225,0 | 122,2 |
| σ | 43,0 | 54,6 | 53,0 | 13,9 |

| Verteilungsparameter | SMDS | L1 |
|----------------------|-------|-------|
| α | 41,0 | 131,5 |
| β | 5,6 | 0,8 |
| γ | 0,0 | 38,0 |
| Θ [g/mol] | 229,6 | 142,4 |
| σ | 35,9 | 9,1 |

| Verteilungsparameter | Hexan C_6H_{14} | Dodekan $C_{12}H_{26}$ | Hexadekan $C_{16}H_{34}$ | Toluol C_7H_8 |
|----------------------|----------------------|---------------------------|-----------------------------|--------------------|
| α | 100,0 | 100,0 | 100,0 | 100,0 |
| β | 0,1 | 0,1 | 0,1 | 0,1 |
| γ | 76,2 | 160,3 | 216,4 | 82,1 |
| Θ [g/mol] | 86,2 | 170,3 | 226,4 | 92,1 |
| σ | 1,0 | 1,0 | 1,0 | 1,0 |

Tabelle A.1: Verteilungsparameter der untersuchten Gemische und Einzelkomponenten

In den Tabellen A.2 und A.3 sind die Parameter der Stoffwertkorrelationen aus Kapitel 4.5 der jeweils untersuchten Gemische und Einzelkomponenten aufgeführt.

| Parameter | Lippert [Lip99], Dieselverteilung, Alkanverteilung, SMDS | Aromaten- verteilung | L1 |
|------------------------------|---|-------------------------|----------|
| Siedetemperatur | | | |
| a_B | 208,53 | 190,4 | 207,0 |
| b_B | 1,5673 | 2,04 | 1,6 |
| Kritische Temperatur | | | |
| a_C | 440,8 | 384,76 | 387,0 |
| b_C | 1,2 | 2,17 | 1,6 |
| Kritisches Volumen | | | |
| a_V | 15,903 | -70,0 | 15,903 |
| b_V | 4,1032 | 4,2 | 4,1032 |
| Molare Verdampfungsenthalpie | | | |
| a_h | 2,07E+07 | 8,286E+06 | 1,74E+07 |
| b_h | 1,35E+05 | 2,606E+05 | 1,53E+05 |

| Parameter | Hexan C_6H_{14} | Dodekan $C_{12}H_{26}$ | Hexadekan $C_{16}H_{34}$ | Toluol C_7H_8 |
|------------------------------|----------------------|---------------------------|-----------------------------|--------------------|
| Siedetemperatur | | | | |
| a_B | 341,89 | 489,43 | 560,20 | 383,75 |
| b_B | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Kritische Temperatur | | | | |
| a_C | 507,85 | 659,15 | 725,15 | 591,80 |
| b_C | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Kritisches Volumen | | | | |
| a_V | 370,0 | 713,0 | 944,0 | 317,703 |
| b_V | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Molare Verdampfungsenthalpie | | | | |
| a_h | 2,95E+07 | 4,350E+07 | 5,21E+07 | 3,32E+07 |
| b_h | 1 | 1 | 1 | 1 |

Tabelle A.2: Parameter der Korrelationen aus Kapitel 4.5 (Teil 1),
[HGr01], [RPP87], [THa95], [Var75]

| Parameter | Lippert [Lip99], Dieselverteilung, Alkanverteilung, SMDS, L1, n-Alkane | Aromaten- verteilung, Toluol |
|--|---|------------------------------------|
| Wärmeleitfähigkeit des gasförmigen Brennstoffs | | |
| a_{KT} | 1,09E-04 | 1,086E-04 |
| b_{KT} | -1,91E-08 | -1,109E-07 |
| a_{KC} | -2,37E-02 | -2,375E-02 |
| b_{KC} | 3,47E-05 | 2,220E-05 |
| Spez. Wärmekapazität des Brennstoffdampfes | | |
| a_{C0} | 2,465 | -4,282 |
| a_{C1} | -1,144E-02 | -2,669E-03 |
| a_{C2} | 1,759E-05 | -5,492E-06 |
| a_{C3} | -5,972E-09 | 3,242E-09 |
| b_{C0} | -3,561E-02 | -6,189E-03 |
| b_{C1} | 9,367E-04 | 8,126E-04 |
| b_{C2} | -6,030E-07 | -4,703E-07 |
| b_{C3} | 1,324E-10 | 1,058E-10 |

Tabelle A.3: Parameter der Korrelationen aus Kapitel 4.5 (Teil 2),
[CPr86], [HGr01], [THa95]

Die maßgeblichen Eigenschaften zur Beschreibung des Verdampfungsverhaltens verschiedener n-/iso-Alkane und Aromaten sind in den Bildern A.2 bis A.4 dargestellt.

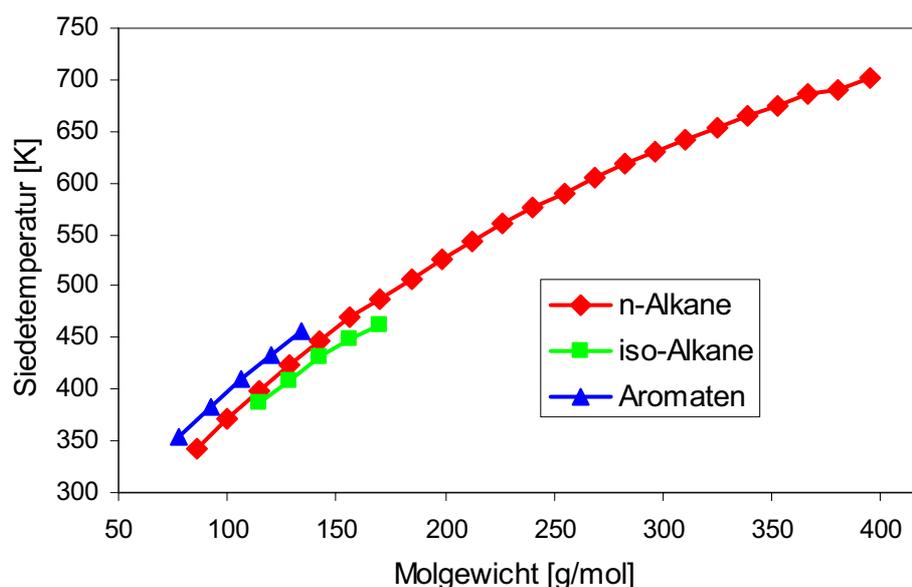


Bild A.2: Siedepunkte von n-Alkanen, iso-Alkanen und Aromaten [Var75], [RPA53]

Die Siedetemperaturen der betrachteten Aromaten liegen leicht über den Werten der n-Alkane (Bild A.2). iso-Alkane haben im Mittel über die jeweiligen Isomere eine leicht geringere Siedetemperatur als n-Alkane (Bild A.2).

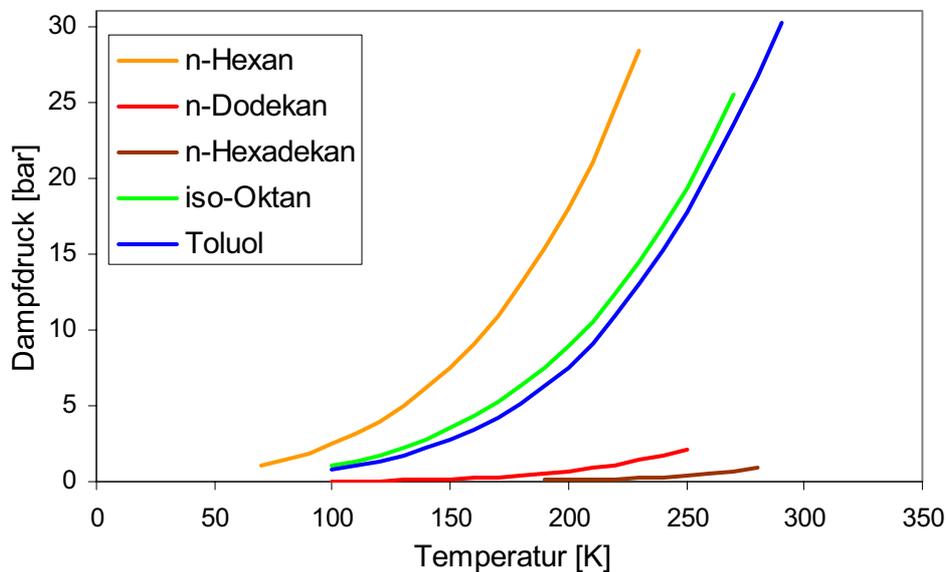


Bild A.3: Dampfdrücke von n-Alkanen, iso-Alkanen und Aromaten [Var75]

Langkettige n-Alkane (hohes Molgewicht: n-Dodekan, n-Hexadekan) haben einen deutlich geringeren Dampfdruck als kurzkettige n-Alkane (n-Hexan) bzw. als iso-Alkane und Aromaten im betrachteten Molgewichtsbereich (Bild A.4). Diese Elemente werden jeweils durch iso-Oktan und Toluol repräsentiert.

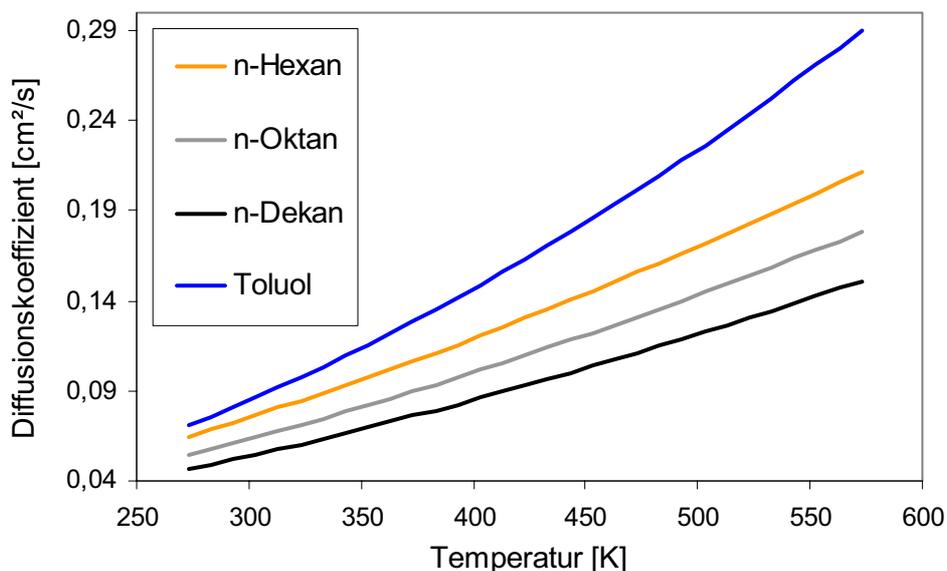


Bild A.4: Diffusionskoeffizienten von n-Alkanen und Toluol [RSh66]

Die Diffusionskoeffizienten (Werte bei 1 bar Umgebungsdruck) in Bild A.4 zeigen ein ähnliches Verhalten, wie bei den Dampfdrücken. Toluol (Aromat) hat die höchsten Diffusionskoeffizienten, kurzkettige n-Alkane (n-Hexan) haben höhere Werte als langkettige n-Alkane.

Die Geschwindigkeitsbestimmende Größe bei der Beschreibung von Verdampfungsprozessen ist die Diffusion des verdampfenden Stoffes von der Tropfenoberfläche in die Gasphase. Die Größen Siedetemperatur und Dampfdruck charakterisieren das Siedeverhalten von Stoffen bei entsprechendem Umgebungsdruck. Zu jedem Druck gehört eine bestimmte Siedetemperatur, und umgekehrt gehört zu jeder Temperatur ein bestimmter Druck bei dem ein Stoff (Flüssigkeit) verdampft. Dieser Druck wird als Dampfdruck der betrachteten Flüssigkeit bezeichnet [Bae96].

In den Bildern A.5 bis A.12 sind die Ergebnisse der optischen Untersuchungen an der schnellen Kompressionsmaschine (Einhubtriebwerk) hinsichtlich Eindringtiefe der flüssigen und gasförmigen Phase für alle sieben Spritzlöcher der im Kapitel 5.2 verwendeten Minisackloch-Einspritzdüse dargestellt.

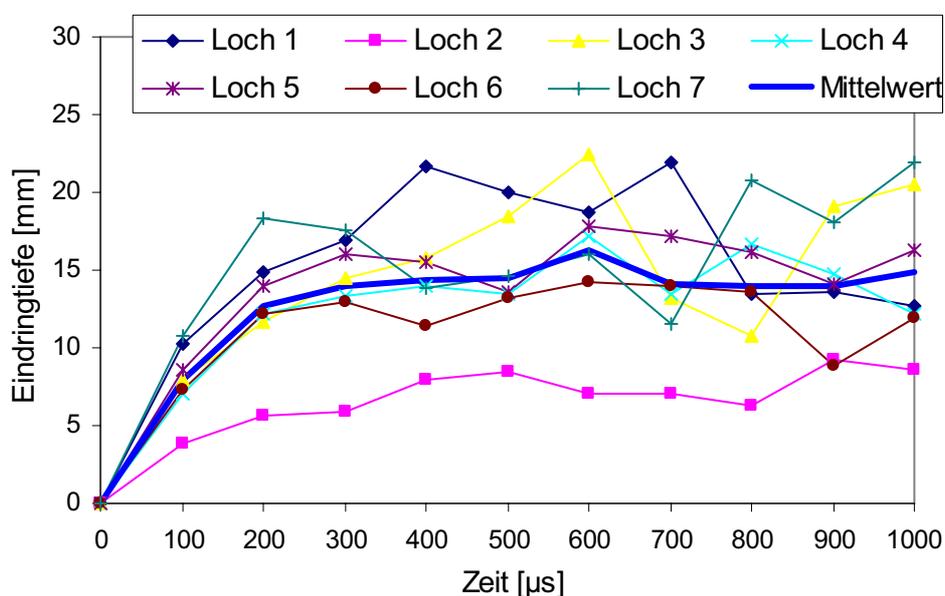


Bild A.5: Eindringtiefen der Flüssigphase für Diesel bei 100 MPa Einspritzdruck

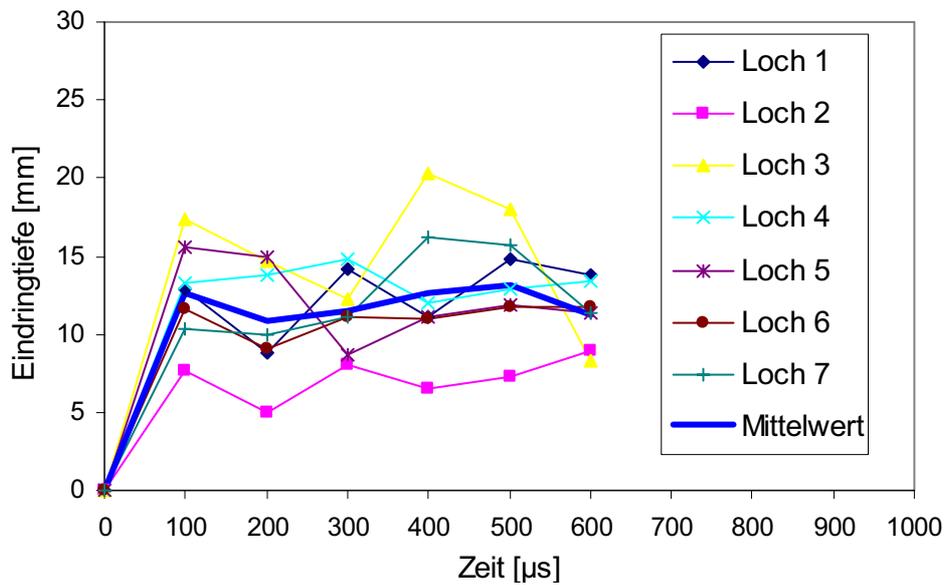


Bild A.6: Eindringtiefen der Flüssigphase bei 180 MPa Einspritzdruck

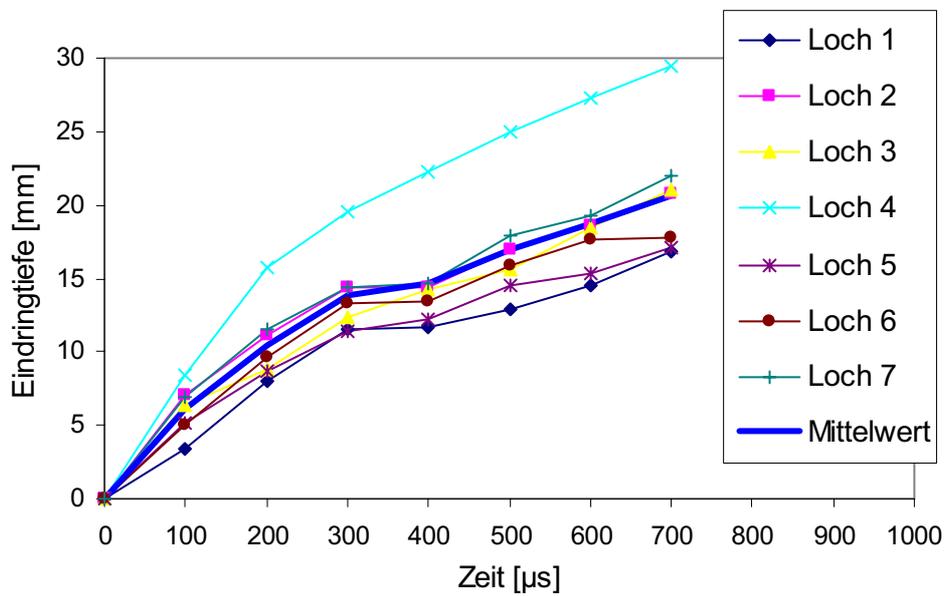


Bild A.7: Eindringtiefen der Gasphase für Diesel bei 100 MPa Einspritzdruck

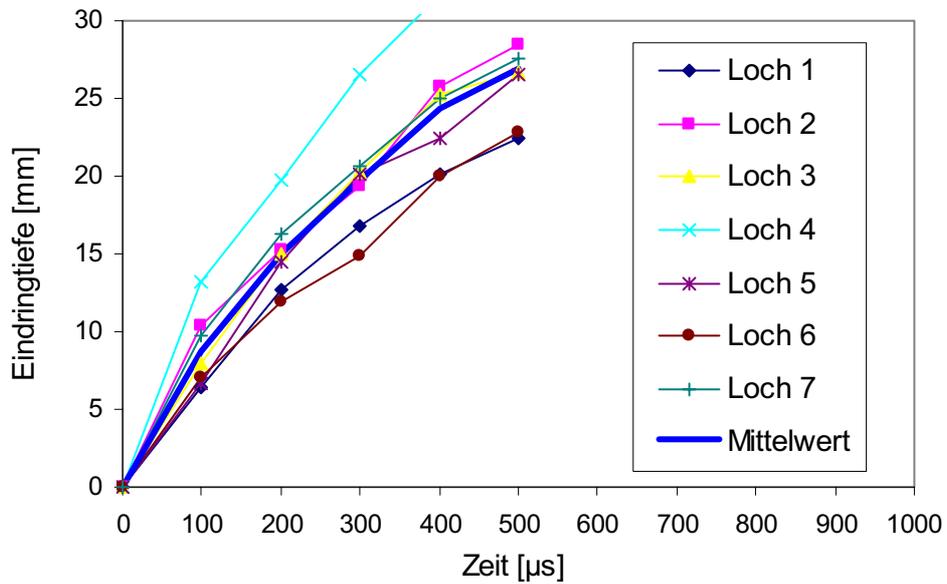


Bild A.8: Eindringtiefen der Gasphase für Diesel bei 180 MPa Einspritzdruck

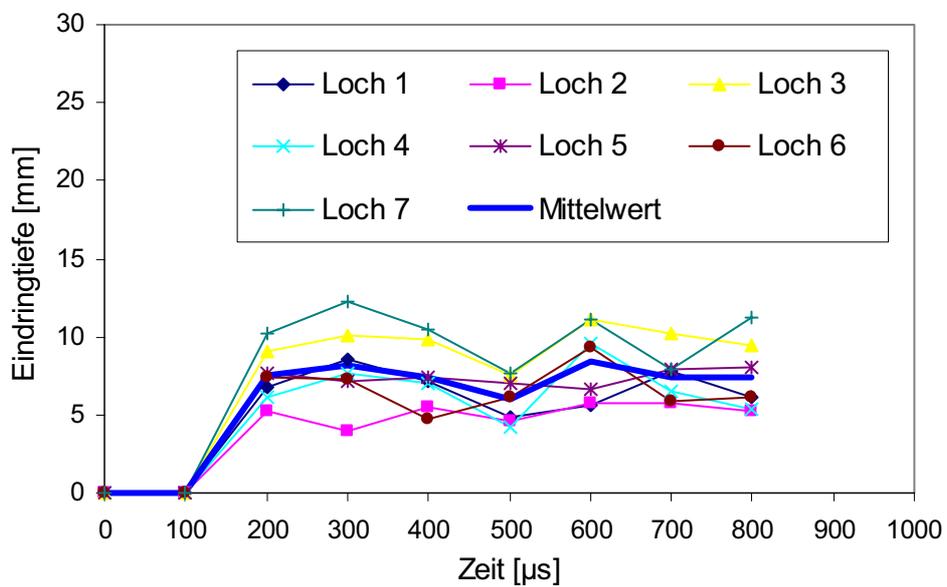


Bild A.9: Eindringtiefen der Flüssigphase für L1+Toluol bei 100 MPa Einspritzdruck

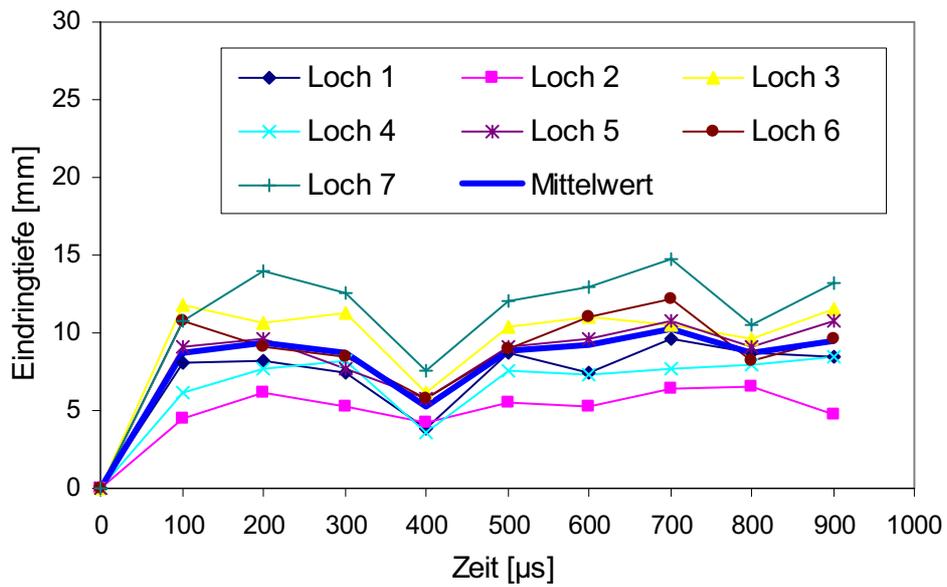


Bild A.10: Eindringtiefen der Flüssigphase für L1+Toluol bei 180 MPa Einspritzdruck

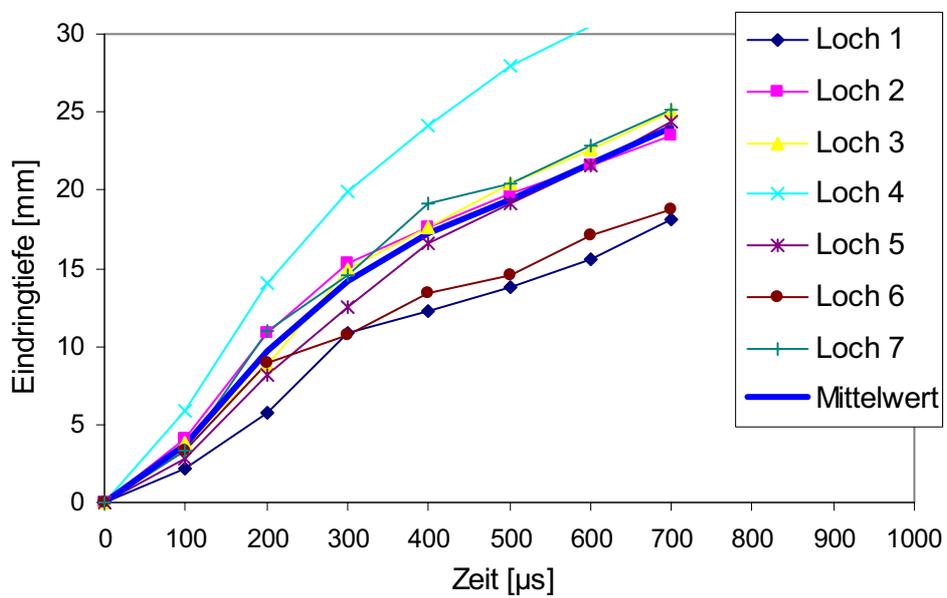


Bild A.11: Eindringtiefen der Gasphase für L1+Toluol bei 100 MPa Einspritzdruck

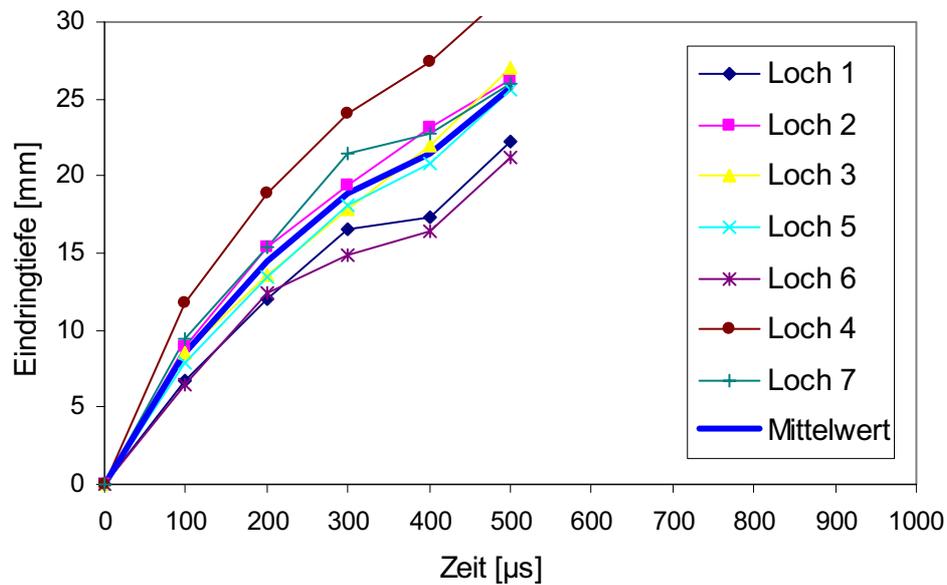


Bild A.12: Eindringtiefen der Gasphase für L1+Toluol bei 180 MPa Einspritzdruck

Anhand der dargestellten Eindringtiefen für die einzelnen Spritzlöcher der Einspritzdüse ist eine große Streuung der Messwerte erkennbar. Dieses stark asymmetrische Spraybild kann auf die Verkokung einzelner Spritzlöcher zurückgeführt werden. Die in die Diagramme eingezeichneten Mittelwerte dienen, wie in Kapitel 5.2 beschrieben, dem Abgleich der parallel durchgeführten CFD-Simulationen der einfachen Einspritzvorgänge.

Lebenslauf

Name: Maximilian Fischer
Geburtsdatum: 12.03.1976
Geburtsort: Rheinberg
Familienstand: ledig
Staatsangehörigkeit: deutsch

Schulbildung

09/82 - 07/86 Grundschule Schützenstraße, Solingen
09/86 - 03/87 August-Dicke-Gymnasium, Solingen
04/87 - 07/88 Orientierungsstufe Nackenberger Straße, Hannover
09/88 - 07/95 Gymnasium Schillerschule, Hannover, Abschluss: Abitur

Zivildienst

10/95 - 09/96 Alloheim Senioren-Residenzen AG, 95680 Bad Alexandersbad

Studium

10/96 - 03/02 Maschinenbau an der Universität Hannover
Vertiefungsfächer: „Technische Verbrennung“
„Höhere Maschinendynamik“
Abschluss: Diplom Ingenieur

Wissenschaftliche Tätigkeit

05/02 - 12/05 Wissenschaftlicher Mitarbeiter
am Institut für Technische Verbrennung, Universität Hannover

Promotion

19.01.2006 Promotionsvortrag und mündliche Prüfung

