1 Einleitung

Bedingt durch stetig steigende Anforderungen bezüglich Emissionsverhalten und Verbrauch, ist der Ottomotor in der letzten Zeit vermehrt in den Fokus von Systementwicklern und Motorenbauern gerückt. Trotz eines kontinuierlichen Anstiegs von Dieselfahrzeugen in den Zulassungsstatistiken auf zur Zeit über 40%, ist der Ottomotor immer noch das am weitesten verbreitetste Antriebskonzept im PKW-Segment; dies vor allem durch systembedingte Vorteile, wie geringes Gewicht, niedrigere Herstellungskosten und eine einfachere Abgasnachbehandlung.

Als vorrangiges Ziel in der Entwicklung von Ottomotoren, gilt zur Zeit die Verbrauchsreduktion und damit verbunden die Reduktion des CO_2-Ausstoßes. Ziel ist es die ACEA[1]-Selbstverpflichtung für die Jahre 2008 mit 140g/km bzw. 2012 mit 120g/km CO_2-Ausstoß zu erfüllen. Abb. 1.1 verdeutlicht den Trend der letzten Jahre für Otto- und Dieselmotoren so-

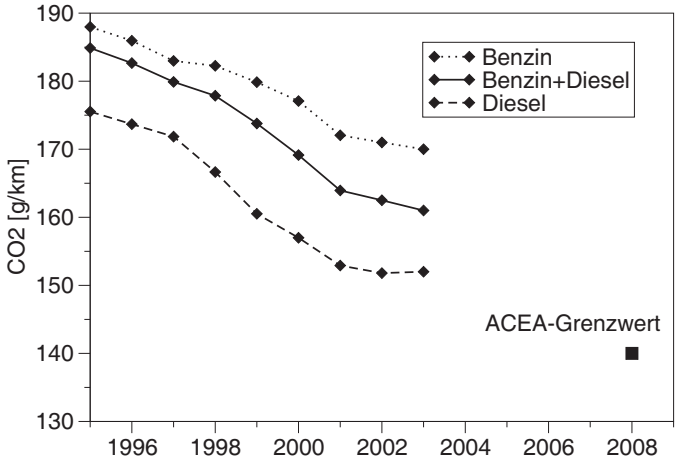

Abb. 1.1: *Zeitlicher Verlauf der CO_2-Emissionen der Fahrzeugflotte aller ACEA-Mitglieder [5]*

wie den Flottendurchschnitt. Trotz steigender Anteile von Dieselmotoren, ist der Gesamttrend insgesamt rückläufig und die Einführung der zukünftigen Emissionsvorschriften wird zu einer

[1] **A**ssociation des **C**onstructeurs **E**uropéens d'**A**utomobiles - Europäische Vereinigung der Automobilhersteller

weiteren Abflachung führen. Somit erscheint diese Vorgabe für das Jahr 2008, beim heutigen Stand der Technik, als kaum erfüllbar.

Ein prinzipieller Nachteil von saugrohreinspritzenden und aufgeladenen Ottomotoren ist der, verglichen mit dem Dieselmotor, hohe spezifische Verbrauch. Dieser entsteht hauptsächlich durch die starke Drosselung im Teillastbetrieb und der Notwendigkeit eines homogenen Gemisches. Direkteinspritzende Verfahren bieten die Möglichkeit durch eine Anhebung des Kompressionsverhältnisses und vor allem durch die Erzeugung einer Ladungsschichtung diese grundlegende Schwäche zu minimieren. Herkömmliche wandgeführte Einspritzverfahren, zeigten jedoch enorme Schwächen bei der Umsetzung der Schichtkonzepte, sodass nahezu alle modernen direkteinspritzenden Ottomotoren homogen betrieben werden.

Bei der Benzin-Direkteinspritzung (homogen wie geschichtet) ist zur genauen Vorhersage und Steuerung des Einspritzstrahls die Kenntnis des Sprayaufbruchs und des Verdampfungsverhaltens von grundlegender Bedeutung. Dabei wird der Brennstoff Benzin sowohl im Experiment als auch in der Simulation üblicherweise durch den Ersatzbrennstoff Isooktan substituiert. Dieser Reinstoff divergiert in seinen Stoffeigenschaften jedoch zum Teil erheblich vom kommerziellen Brennstoff, sodass eine Übertragung oftmals nicht sinnvoll erscheint.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde aus den oben angeführten Gründen ein Multikomponentenverdunstungsmodell entwickelt, welches die Zusammensetzung des Ersatzbrennstoffes mit Hilfe eines statistisch basierten Ansatzes mit unendlich vielen Einzelkomponenten abbildet. Dadurch können Entmischungsvorgänge innerhalb der flüssigen und der gasförmigen Phase dargestellt und ihre Auswirkungen auf nachfolgende Prozesse wie Zündung und Verbrennung diskutiert werden. Um dem Einfluss von aromatischen Spezies, die mit ca 40% in kommerziellen Brennstoffen enthalten sind, Rechnung zu tragen, wurde dieser Ansatz mit einer diskreten aromatischen Spezies überlagert und der Einfluss dieser Spezies auf die Verdunstung aufgezeigt. Auf dieser Basis wurde weiterhin ein Flash-Boiling-Modell entwickelt, um die intensive Expansion des Brennstoffes im überhitzten Zustand bei Austritt aus der Düse abbilden zu können. Beide Modelle wurden in den CFD-Code KIVA-3V implementiert und anhand von optischen Untersuhungen in der Einspitzkammer sowie in einer schnellen Kompressionsmaschine validiert.

2 Bisherige Modellierungsansätze und Aufgabenstellung

In der Entwicklung von Verbrennungsmotoren gewinnt die Simulation der innermotorischen Prozesse stetig an Bedeutung. Dies ist einerseits durch die enormen Leistungszuwächse in der Computertechnik der letzten Jahre begründet, andererseits durch den Zeit- und Kostendruck auf Seiten der Systementwickler, welche mit Hilfe der Simulationsrechnungen aufwändige Prüfstandsläufe einsparen können. Dabei hat insbesondere der Ottomotor, auf Grund der breiten Einführung der Benzindirekteinspritzung und der vorhandenen Ruß- und Stickoxidproblematik beim Dieselmotor, vermehrt an Komplexität und Aufmerksamkeit gewonnen. Unabhängig von der Art der Gemischbildung, homogen mit $\lambda = 1$ oder heterogen, geschichtet mit $\lambda \gg 1$, ist die detaillierte Kenntnis der Verdunstung sowie der Transportvorgänge in der Gasphase Voraussetzung für alle nachgeschalteten Prozesse, wie Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung.

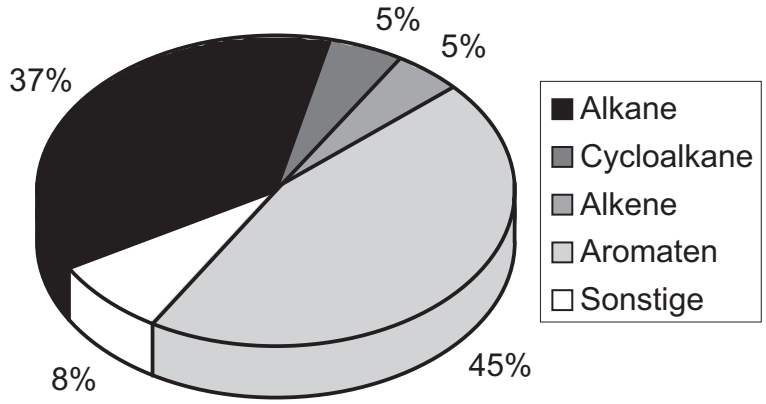

Abb. 2.1: *Zusammensetzung von Superbenzin gemäß [22] bzw. [24]*

2.1 Verdunstung

Als *Verdunstung* wird der Phasenübergang von der flüssigen zur gasförmigen Phase bezeichnet. Im Gegensatz zur *Verdampfung*, die als Vergasung in den eigenen Dampf charakterisiert ist,

wodurch Dampfdruck p_d und Systemdruck p_∞ gleich groß sind, findet die *Verdunstung* in ein Gasgemisch statt. Der Systemdruck ist um die Partialdrücke der anderen Komponenten erhöht; die Differenz $p_\infty - p_d$ bewirkt, dass der Siedevorgang nur an der Oberfläche stattfinden kann [56]. Da der Phasenübergang von flüssig zu gasförmig in vielen technischen Anwendungsbereichen von großer Bedeutung ist, fanden bereits sehr früh Untersuchungen zur Beschreibung des Tropfenvergasungsprozesses statt.

Das einfachste Modell, welches von Godsave [31] nach experimentellen Untersuchungen an einem verdunstenden Tropfen aufgestellt wurde, wird als das d^2-Gesetz bezeichnet. Es beruht auf der Beobachtung, dass die Abnahme des Durchmesserquadrates linear mit der Zeit erfolgt.

$$\frac{d(d^2)}{dt} = K$$

mit

$$K = \frac{8\lambda}{c_p \rho h_{fg}} (T_\infty - T_{Tr}) \tag{2.1}$$

Der Faktor K ist eine Funktion einiger Stoffeigenschaften. Die Tropfentemperatur, und damit auch die Stoffdaten, wird jedoch als zeitlich konstant angesehen, d.h. die dem Tropfen zugeführte Energie wird sämtlich zur Verdunstung verwandt. Damit ist dieses Modell nur zur Beschreibung der stationären Verdunstung geeignet, sobald die Tropfentemperatur konstant ist. In diesem Bereich ist jedoch eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment zu beobachten, weshalb das Modell bis heute noch Anwendung findet.

Law et al. [48] erweiterten das von Godsave experimentell entwickelte d^2-Gesetz für die Verdunstung und Verbrennung von Mehrkomponentengemischen. Betrachtet wurde jedoch auch hier nur die stationäre Phase der Verdunstung mit $\dot{Q}_{heiz} = 0$. Als Ergebnis erhält man einen Faktor K, der von den einzelnen Spezies des Gemisches abhängt

$$K = \frac{8\lambda}{c_p \left(\sum_i \frac{\xi_{l0,i}}{\chi_i} / \sum_i \frac{\xi_{l0,i}}{\chi_i \rho_{l,i}} \right)} \ln \left(1 + \frac{c_p (T_\infty - T_{Tr}) + \left(\frac{\xi_{0\infty}}{\sum_i \xi_{l0,i} \nu} \right) \left(\sum_{l0,i} Q_i \right)}{\sum_i \xi_{l0,i} h_{fg,i}} \right) \quad . \tag{2.2}$$

Die Temperatur T_{Tr} wird dabei iterativ bestimmt. Parallel zu den numerischen fanden auch experimentelle Untersuchungen statt. Verifiziert wurde das Modell anhand der Verdunstung eines Gemisches bestehend aus 50%-Undekan und 50%-Oktanol.

Auf Grund der Annahme einer konstanten Tropfentemperatur kann der (instationäre) Aufheizvorgang nicht abgebildet werden. Da die motorischen Prozesse jedoch eine ständige Änderung der Randbedingungen induzieren, sind die oben beschriebenen Modelle nur bedingt geeignet. Soll der Aufheizvorgang berücksichtigt bzw. die instationäre Verdunstung modelliert werden, so muss eine Massen- und Energiebilanz über dem Tropfen aufgestellt werden. An-

sätze für diese Modelle finden sich bei Klingsporn [45] und Kneer [46]. Allgemein gilt die Massenerhaltungsgleichung im dreidimensionalen Raum

$$\frac{D\rho}{Dt} + \frac{\partial(\rho v_i)}{\partial x_i} = 0 \quad . \tag{2.3}$$

In Polarkoordinaten, ergibt sich Gl. 2.3 zu

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\rho u) + \frac{1}{rsin\phi}\frac{\partial}{\partial\phi}(\rho vsin\phi) + \frac{1}{rsin\phi}\frac{\partial}{\partial\vartheta}(\rho w) = 0 \quad , \tag{2.4}$$

und mit den Annahmen eines punktsymmetrischen Kugeltropfens konstanter Dichte vereinfacht sie sich schließlich zu

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\rho u\right) = 0 \quad . \tag{2.5}$$

Ein Integration der Gl. 2.5 mit Hilfe des Gauß'schen-Integralsatzes ergibt folgenden Ausdruck für den gesamten verdunstenden Massenstrom

$$r^2\rho u = \frac{\dot{m}_G}{4\pi} \quad . \tag{2.6}$$

Da der Massenstrom jedoch unbekannt ist, wird zur Lösung zunächst eine Gleichung für die Spezieserhaltung benötigt

$$\frac{d}{dr}\left[\rho r^2 u\xi_f - \rho r^2 D\frac{d\xi_f}{dr}\right] = 0 \quad , \tag{2.7}$$

dabei ist ξ_f die Konzentration bzw. der Anteil des Brennstoffes im Gasgemisch. Einsetzen von Gl. 2.6 in Gl. 2.7 ergibt schließlich

$$\underbrace{4\pi r^2 u\rho}_{\dot{m}_G}\xi_f - 4\pi r^2\rho D\frac{d\xi_f}{dr} = -\dot{m}_f \quad \text{bzw.} \quad \left(\frac{\dot{m}_G}{4\pi r^2}\right)\xi_f - \rho D\frac{d\xi_f}{dr} = \left(\frac{-\dot{m}_f}{4\pi r^2}\right) \quad . \tag{2.8}$$

In unmittelbarer Umgebung des Tropfens kann der Luftmassenstrom $\dot{m}_A$ vernachlässigt werdem, sodass $\dot{m}_G \approx \dot{m}_f$ gilt. Damit wird Gl. 2.8 in das folgende Integral überführt

$$\int_{\xi_{f,R}}^{\xi_{f,\infty}} \frac{1}{1-\xi_f}d\xi_f = \int_R^\infty \frac{-\dot{m}_f}{4\pi r^2 D\rho}dr \quad . \tag{2.9}$$

Mit den Randbedingungen erster Ordnung $r = R$ und $\xi_f = \xi_{f,R}$ an der Oberfläche des Tropfens, sowie $r = \infty$ und $\xi_f = \xi_{f,\infty}$ in großer Entfernung zum Tropfen, ergibt sich der Zusammenhang für den verdunstenden Massenstrom $\dot{m}_f$ zu

$$\ln\left(\frac{1-\xi_{f,\infty}}{1-\xi_{f,R}}\right) = \frac{\dot{m}_f}{4\pi RD\rho} \quad \text{bzw.} \quad \dot{m}_f = 4\pi RD\rho\,\ln\left(\frac{1-\xi_{f,\infty}}{1-\xi_{f,R}}\right) \quad . \tag{2.10}$$

Mit Hilfe des verdunstenden Massenstromes lässt sich nun die Energiegleichung des Tropfens lösen. Eine Energiebilanz über den Tropfen ergibt

$$\dot{Q}_{konv} = \quad \dot{Q}_f + \dot{Q}_{heiz} \qquad \text{mit}$$

$$\begin{aligned} \dot{Q}_{heiz} = & \quad m_{Tr} c_{pl} \frac{dT_{Tr}}{dt} \qquad \text{und} \\ \dot{Q}_f = & \quad h_{fg} \dot{m}_f \quad . \end{aligned} \tag{2.11}$$

Der konvektive Wärmestrom $\dot{Q}_{konv}$ wird mittels des Newton'schen-Abkühlungsgesetzes berechnet. Man erhält

$$\dot{Q}_{konv} = 4\pi r_{Tr}^2 \alpha (T_\infty - T_{Tr}). \tag{2.12}$$

Einsetzen von Gl.2.11 und 2.12 und Auflösen nach dem gesuchten Temperaturgradienten $\frac{dT_{Tr}}{dt}$ ergibt die zeitliche Änderung der Tropfentemperatur

$$\frac{dT_{Tr}}{dt} = \frac{1}{m_{Tr} c_{pl}} \left(\dot{Q}_{konv} - h_{fg} \dot{m}_f \right) \quad . \tag{2.13}$$

Diese analytische Lösung gilt streng genommen nur für ruhende Tropfen in einer unendlich ausgedehnten Gasumgebung. Soll der Einfluss der erzwungenen Konvektion berücksichtigt werden, geschieht dies zumeist unter Zuhilfenahme so genannter Kennzahlgesetze. Dabei wird der durch die Konvektion erhöhte Wärme- und Stofftransport durch eine Erhöhung der Nusselt-Zahl Nu bzw. Sherwood-Zahl Sh ausgedrückt. Die Nusselt-Zahl ist identisch mit dem dimensionslosen Temperaturgradienten an der Oberfläche; die Sherwood-Zahl entspricht dem Partialdruckgradienten an festen Oberflächen [53]. Die Korrelationen für die Nusselt- und die Sherwood-Zahl bei hohen Reynoldszahlen wurden in [62] hegeleitet [1].

$$\begin{aligned} Nu = 2 + 0,6 Re^{0,5} Pr^{\frac{1}{3}} \quad Sh = 2 + 0,6 Re^{0,5} Sc^{\frac{1}{3}} \\ \text{mit} \quad Re = \frac{\rho\, u\, d}{\eta} \quad \text{und} \quad Sc = \frac{\eta}{\rho D} \quad . \end{aligned} \tag{2.14}$$

Diese analytische Herleitung der Verdunstung von Tropfen, bildet die Basis für eine Vielzahl von unterschiedlichen Modellen. Hiroyasu et al. [36] entwickelten, basiert auf umfangreichen experimentellen Untersuchungen, ein Einzelkomponenten-Verdunstungsmodell für Diesel- Motoren. Sie erweiterten den o.g. analytischen Ansatz, indem die Koeffizienten für Wärmeübergang und Massentransport angepasst wurden, sodass

$$\dot{Q}_{konv} = d^2 \alpha^* (T_\infty - T_{Tr}) \quad \text{mit} \quad \alpha^* = \frac{-\dot{m}_G \left(c_{p,f} - \varepsilon c_{p,a} \right)}{\pi d^2 \left[\exp\left(\frac{\dot{m}_G \left(c_{p,f} - \varepsilon c_{p,a} \right)}{\pi d \lambda} \frac{1}{Nu} \right) - 1 \right]} \tag{2.15}$$

für die Berechnung der instationären Aufheizung und

$$-\dot{m}_f = \pi d^2 k^* \frac{y_{R,f}}{1 - (1+\xi) y_{R,f}} \quad \text{mi} \quad k^* = \frac{\rho D}{d} \frac{1 - (1+\xi) y_{R,f}}{(1+\xi) y_{R,f}} Sh \ln \frac{1}{1 - (1+\xi) y_{R,f}} \tag{2.16}$$

[1] Im Falle der natürlichen Konvektion wird statt der Reynolds-Zahl die Grasshof-Zahl Gr benützt. Da die erzwungene Konvektion unter motorischen Randbedingungen jedoch um Größenordnungen höher ist, wird auf die Darstellung der Grasshof-Zahl an dieser Stelle verzichtet.