

# Tropfennahe Umgebung

Vorhaben Nr. 1263

---

## Modellierung der Transportmechanismen in der nahen Umgebung von verdunstenden Kraftstofftropfen

---

### Abschlussbericht

#### Kurzfassung:

Diskussionen über den Klimawandel und den negativen Einfluss von Treibhausgasen wie CO<sub>2</sub> haben zu strengeren Grenzwerten für neue Motorengenerationen im Automobilsektor geführt. Numerische Motorsimulationen haben sich hierbei als nützliches Werkzeug erwiesen, um die gestiegenen gesetzlichen Anforderungen zu erfüllen. CFD Simulationen sind in der Lage schnell und kostengünstig Ergebnisse zu liefern, um experimentelle Untersuchungen zu unterstützen und den Entwicklungsprozess zu beschleunigen.

Ein fundiertes Verständnis des Einspritzungs- und Gemischbildungsprozesses in direkteinspritzenden Ottomotoren ist die Voraussetzung, um die nachfolgende Verbrennung und Emissionsbildung zu optimieren. Allerdings zeigte eine Sensitivitätsstudie des Verdunstungsmodells, welches üblicherweise in Lagrange'schen Spray Simulationen verwendet wird, Defizite bei feinen Gitterauflösungen, welche jedoch gewünscht sind, um lokale Gradienten im Temperatur-, Spezies- und Geschwindigkeitsfeld aufzulösen. Darüber hinaus wurde das Verdunstungsmodell an Hand des Spezialfalls eines verdunstenden Einzeltropfens hergeleitet und ist somit nicht in der Lage, Tropfen-Tropfen Interaktionen zu berücksichtigen wie sie in dichten Sprays üblicherweise auftreten. Folglich war das Ziel des vorliegenden Projektes die Entwicklung eines verbesserten Verdunstungsmodells, welches auch kleine Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse und Tropfen-Tropfen Interaktionen berücksichtigen kann.

Zu diesem Zweck wurden Simulationen des Einspritzungs- und Gemischbildungsprozesses eines Ottomotors für verschiedene Lastpunkte und Drehzahlen durchgeführt und hieraus der Parameterraum der lokalen Tropfenverdunstung extrahiert. Auf Basis dieser Bedingungen wurden hoch aufgelöste Tropfensimulationen durchgeführt, um die relevanten Phänomene zu identifizieren, welche die Tropfenverdunstung beeinflussen. Hieraus wurde schließlich ein verbessertes Verdunstungsmodell abgeleitet, welches gitterunabhängige Ergebnisse liefert und in der Lage ist Tropfen-Tropfen Interaktionen zu berücksichtigen.

Dieses Projekt liefert den beteiligten Industrieunternehmen ein umfassendes Verständnis des Tropfenverdunstungsprozesses. Das entwickelte Verdunstungsmodell ist leicht zu implementieren und kann dabei helfen die Genauigkeit von Motorsimulationen zu verbessern.

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist erreicht worden.

---

Berichtsumfang: 47 S., 36 Abb., 7 Tab., 24 Lit.

Laufzeit: 01.02. 2017 - 31.10.2019

Zuschussgeber: BMWi/IGF-Nr. 19320 N und FVV-Eigenmittel



Forschungsstelle(n): Institut für Technische Verbrennung (ITV),  
RWTH Aachen University  
Leiter: Prof. Dr.-Ing. Heinz Pitsch

Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt (ITLR),  
Universität Stuttgart  
Leiter: Prof. Dr.-Ing. Bernhard Weigand

Bearbeiter und Verfasser: Jörn Hinrichs (ITV)  
Karin Schlottke, Matthias Ibach (ITLR)

Vorsitzende(r) projekt-  
begleitender Ausschuss: Jérôme Munier, Dr. Ing. h.c. F. Porsche AG

Vorsitzender Beirat: Dr.-Ing. Tobias Lösche-ter Horst (Volkswagen AG)

## Inhaltsverzeichnis

1	Executive Summary.....	1
2	Einleitung.....	3
3	Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse im Projekt.....	5
3.1	Simulation des Gesamtsystems / Arbeitspaket 1:.....	5
3.1.1	Randbedingungen für DNS (AP 1.1).....	5
3.1.2	Untersuchung der Gitterabhängigkeit (AP 1.2).....	8
3.1.3	Einfluss des Referenzzustandes (AP 1.3).....	10
3.1.4	Simulation von Validierungsfällen (AP 1.4).....	11
3.2	Modellbildung, Implementierung und Validierung / Arbeitspakete 4 und 5.....	14
3.3	Direkte Numerische Simulationen und deren Validierung / Arbeitspakete 2 und 3. .	25
3.3.1	Tropfen mit schwacher Anströmung (AP 2.1).....	25
3.3.2	Einfluss von Nachbartropfen-Interaktion (AP 2.2).....	29
3.3.3	Effekte der Anströmung (AP 2.3).....	31
3.3.4	Tropfenoszillationen (AP 2.4).....	33
3.4	Aufbereitung der Daten und Mittelungen / Arbeitspaket 4.1.....	35
4	Zusammenfassung und Ausblick.....	38
5	Anhang.....	7
5.1	Literaturverzeichnis.....	7
5.2	Abbildungsverzeichnis.....	9
5.3	Tabellenverzeichnis.....	11



## 1 Executive Summary

In recent years, discussions on the climate change, which is caused by the release of greenhouse gases like CO<sub>2</sub>, have led to more stringent emission limits for new engine generations used in the transportation sector. In order to fulfill these legislative requirements, engine CFD simulations have become a valuable tool to support experimental analysis and to accelerate the development process.

A solid understanding of the spray and mixture formation process of direct injection gasoline engines is a prerequisite to optimize the subsequent processes of combustion and emission formation. However, a sensitivity study on the commonly used evaporation model in Lagrangian spray simulations revealed deficiencies for finer grid resolutions, which are usually desired to resolve local gradients in temperature, species, and velocity fields. In addition, the evaporation model was originally derived for a stationary single droplet and does not account for droplet-droplet interactions as they usually occur in dense spray regions. Consequently, the aim of this project was to extend the existing evaporation model to account for small grid to droplet ratios and droplet-droplet interactions.

For this purpose, simulations of the spray and mixture formation of a direct injection gasoline engine have been performed. Different load points and engine speeds were investigated to extract the range of local conditions droplets experience during their evaporation. Afterwards, highly resolved droplet simulations were performed to study the relevant phenomena influencing the evaporation process. From this, an advanced evaporation model was derived, which provides grid-independent results and is now able to account for droplet-droplet interactions.

This project provides a comprehensive understanding of the evaporation process to the participating companies. Moreover, the advanced model is easy to implement and enables to improve the reliability of engine simulations.



## 2 Einleitung

Die Simulation innermotorischer Vorgänge mit Hilfe von 3D-CFD Programmen hat sich als unverzichtbares Analysewerkzeug bei der Entwicklung von Verbrennungskraftmaschinen etabliert. Die numerische Simulation trägt maßgeblich dazu bei, die stetig steigenden Anforderungen von Seiten der Gesetzgebung hinsichtlich Emissionen und Kraftstoffverbrauch zu erfüllen. Auch der Tendenz zu immer kürzeren Entwicklungszeiten wird durch die Simulation Rechnung getragen, da durch ihren Einsatz Prüfstandsversuche zielgenauer eingesetzt und somit die Anzahl der notwendigen Versuche reduziert werden können. Diese Tatsache senkt neben der Entwicklungszeit auch die Kosten, da experimentelle Untersuchungen deutlich kostspieliger sind als numerische Berechnungen.

Um mit Hilfe von Simulationen prädiktive Aussagen über innermotorische Vorgänge machen zu können, sind detaillierte Modelle zur Beschreibung der physikalischen Prozesse erforderlich. Ein gängiges Verfahren zur Beschreibung der Kraftstoffeinspritzung als Mehrphasensystem in kommerziellen CFD Codes ist die Euler-Lagrange'sche Formulierung. Dieser Ansatz kann für Systeme verwendet werden, in denen der Anteil der flüssigen Phase in Bezug auf das lokale Gasvolumen klein ist. Hierbei wird auf eine räumliche Auflösung der dispersen Phase verzichtet und diese stattdessen mit Hilfe des Lagrange'schen Formalismus beschrieben. Die Interaktion mit der kontinuierlichen Gasphase erfolgt über Quellterme in den

Massen-, Impuls- und Energieerhaltungsgleichungen. Aufgrund der fehlenden Diskretisierung der Flüssigphase werden Phänomene wie Tropfenzerfall, Kollision, Koaleszenz, Tropfen-Wand-Interaktion und Verdunstung mit Hilfe semi-empirischer Ansätze modelliert. Diese Modelle basieren auf verschiedenen Annahmen, welche einen begrenzten Gültigkeitsbereich besitzen. Dieser stimmt nicht zwangsläufig mit dem Betriebszustand direkteinspritzender Ottomotoren überein. Eine genaue Abbildung dieser Prozesse ist jedoch elementar wichtig für die Untersuchung der Gemischbildung. Die nachfolgenden Prozesse der Verbrennung und Emissionsbildung sind hierbei maßgeblich von der Gemischbildung abhängig, so dass Fehler in der Gemischbildung sich dort fortpflanzen. Für die Beschreibung der Verdunstung und die diesem Phänomen zu Grunde liegenden Wärme- und Stofftransportmechanismen werden in kommerziellen CFD Programmen Modelle verwendet [Spa53, Abr89, Mil98, Mil99], die auf die Filmtheorie nach Lewis und Whitman zurückzuführen sind [Lew24]. Eine deutliche Schwachstelle dieser Modelle ist eine starke Abhängigkeit der Ergebnisse von der Hintergrundgitterfeinheit [Sir10, Luo08]. Hierbei führt eine zunehmend feinere räumliche Auflösung zu einer Verletzung der getroffenen Modellannahmen und somit zu nicht mehr zufriedenstellenden Ergebnissen. Dieses Verhalten widerspricht der allgemein angestrebten Eigenschaft numerischer Simulationen, mit feinerer Auflösung gegen die exakte Lösung zu konvergieren. Darüber hinaus wurden die existierenden Verdunstungsmodelle aus der Betrachtung eines einzelnen verdunstenden Tropfens abgeleitet, so dass die wechselseitige Beeinflussung benachbarter Tropfen bei der Verdunstung nicht berücksichtigt werden kann.

Es ist daher das Ziel dieses Forschungsprojektes einen alternativen Modellierungsansatz zur Beschreibung des Tropfenverdunstungsprozesses zu entwickeln, welcher unabhängig von der verwendeten Gitterauflösung ist und die Transportmechanismen in der tropfennahen Umgebung adäquat wiedergibt. Zudem soll das entwickelte Modell in der Lage sein, die Wechselwirkung zwischen verdunstenden Tropfen zu berücksichtigen.

Zu diesem Zweck wird im ersten Arbeitspaket (AP 1) zunächst die Gemischbildung in direkteinspritzenden Ottomotoren simuliert, um die Rahmenbedingungen für die aufgelösten



### 3 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse im Projekt

---

Tropfensimulationen in AP 2 zu ermitteln. Die DNS Simulationen gilt es in AP 3 mit Hilfe experimenteller Untersuchungen zu validieren. Auf Basis von modelltheoretischen Überlegungen und den gewonnenen Erkenntnissen aus AP 2 wird in AP 4 ein verbessertes Verdunstungsmodell entwickelt. Dieses Modell wird in AP 5 implementiert und anhand der Ergebnisse der aufgelösten Tropfensimulationen, experimenteller Daten aus der Literatur sowie des in AP 1.4 untersuchten Referenzfalles validiert.

### 3 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse im Projekt

#### Forschungsstelle 1 (ITV)

##### 3.1 Simulation des Gesamtsystems / Arbeitspaket 1:

Das Ziel von AP 1 war es, die charakteristischen Randbedingungen für die DNS Simulationen in AP 2 abzuleiten. Zudem wurden, aufbauend auf den Arbeiten von Luo et al. [Luo08] und Knudsen et al. [Knu14], die Sensitivitäten des oben beschriebenen Verdunstungsmodells für die Anwendung in der Umgebung eines DI-Ottomotors untersucht. Für die Modellvalidierung wurde das Spray G des Engine Combustion Networks [ECN1] simuliert.

##### 3.1.1 Randbedingungen für DNS (AP 1.1)

In Arbeitspaket 1.1 wurden die Bedingungen für die detaillierten DNS Tropfensimulationen in AP 2 bestimmt, welche während der Einspritzung im ottomotorischen Betrieb auftreten. Beim betrachteten Motor handelte es sich um den optisch zugänglichen Einzylinder Ottomotor des Instituts für Verbrennung und Gasdynamik (IVG) der Universität Duisburg-Essen in der Gruppe von Prof. Kaiser, welcher bereits im FVV Projekt „BIOPTIC 3 – LIF an Mehrkomponenten-Kraftstoffen im Motor“ untersucht wurde. In diesem Motor ist der vom Engine Combustion Network als Spray G klassifizierte Achtloch-Injektor verbaut, welcher ebenfalls in AP 1.4 als Validierungsfall betrachtet wurde. Weitere Eigenschaften dieses Einzylinder-Ottomotors sind in Tabelle 1 aufgeführt.

*Tabelle 1: Eigenschaften des optisch zugänglichen, direkteinspritzenden Einzylinder-Ottomotors des Instituts für Verbrennung und Gasdynamik der Universität Duisburg-Essen.*

Zylinderdurchmesser	84 mm
Kolbenhub	90 mm
Verdichtungsverhältnis	9.07
Ventilhub	4 mm / 9 mm
Drehzahl	1200 1/min

Die Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) Simulationen wurden mit Hilfe des kommerziellen CFD Programms ANSYS Fluent durchgeführt. Zunächst wurde eine Validierung des geschleppten Betriebs als Basis für die anschließenden Simulationen der innermotorischen Einspritzung und Gemischbildung vorgenommen. Hierzu wurde zunächst der Druckverlauf der Simulation mit dem experimentell bestimmten Profil verglichen, was in Abbildung 1 abgebildet ist. Es zeigte sich eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment, was auf eine Berücksichtigung des Feuerstegvolumens zwischen Zylinder und Kolben zurückzuführen ist. Bei Optikmotoren befindet sich der erste Kompressionsring sehr weit unten am Kolben, um einen direkten Kontakt zwischen dem Kompressionsring und dem Zylinder aus Quarzglas zu vermeiden. Der Bereich um den Feuersteg herum vergrößert die Oberfläche, über die Wandwärmeverluste auftreten, signifikant. Dies galt es in der Simulation zu berücksichtigen, um eine gute Übereinstimmung der Druckverläufe zu erreichen.

### 3 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse im Projekt

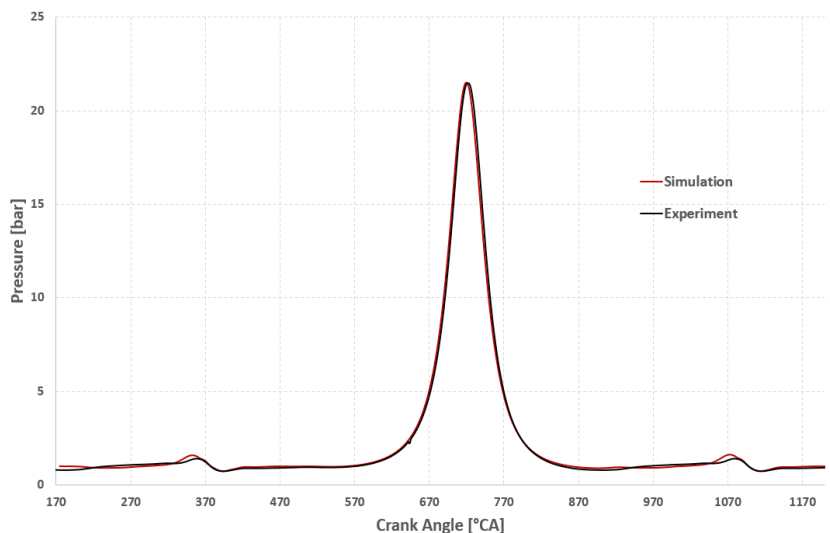


Abbildung 1: Inzylinder-Druckverlauf von Simulation und Experiment als Funktion des Kurbelwinkels für einen Ventilhub von 4 mm bei einer Motordrehzahl von 1200 1/min.

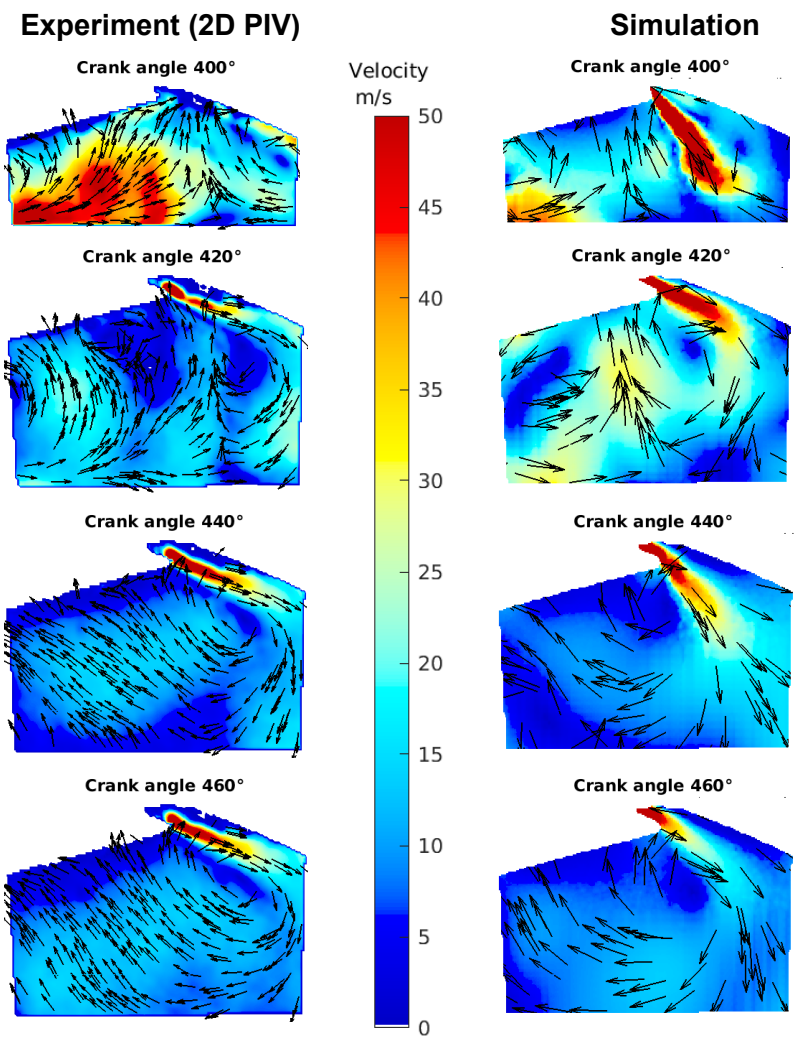


Abbildung 2: Vergleich des Strömungsfeldes während des Einlasstaktes von 400°KW bis 460°KW zwischen Simulation und Experiment für einen Ventilhub von 4 mm bei einer Motordrehzahl von 1200 1/min.

Als weiteren Schritt zur Validierung des geschleppten Betriebs wurden Geschwindigkeitsfelder der Simulation mit experimentell ermittelten 2D Particle Image Velocimetry (PIV) Daten verglichen. Dies erfolgte für die Zylindermitten-Ebene sowie die Schnittebene durch die Einlassventile. In Abbildung 2 sind beispielhaft Bilder für die Einlassventil-Mittelebene für den Einlasstakt dargestellt. Sowohl in den Ergebnissen des Experiments als auch der Simulation ist gut zu erkennen, dass ein Großteil der angesaugten Luft über das Ventil in den Zylinder strömt, wodurch sich im Laufe des Einlasstaktes die für Ottomotoren charakteristische Tumble-Strömung ausbildet.

Nach der Validierung des geschleppten Betriebs wurde die Kraftstoffeinspritzung simuliert. Als Kraftstoff wurde der Benzin-Modellbrennstoff Iso-Oktan verwendet. Hierbei wurde zunächst mit  $48^\circ\text{KW}$  vor OT ein später Einspritzzeitpunkt gewählt, welcher üblicherweise in einer geschichteten Betriebsstrategie gewählt wird. Die Umgebungsbedingungen zum Start der Einspritzung entsprachen hierbei den Bedingungen des Referenzfalls Spray G, welches in AP 1.4 untersucht wurde. Die Ergebnisse der Simulation sind in Abbildung 3 zusammen mit experimentellen Schattenbildern abgebildet.

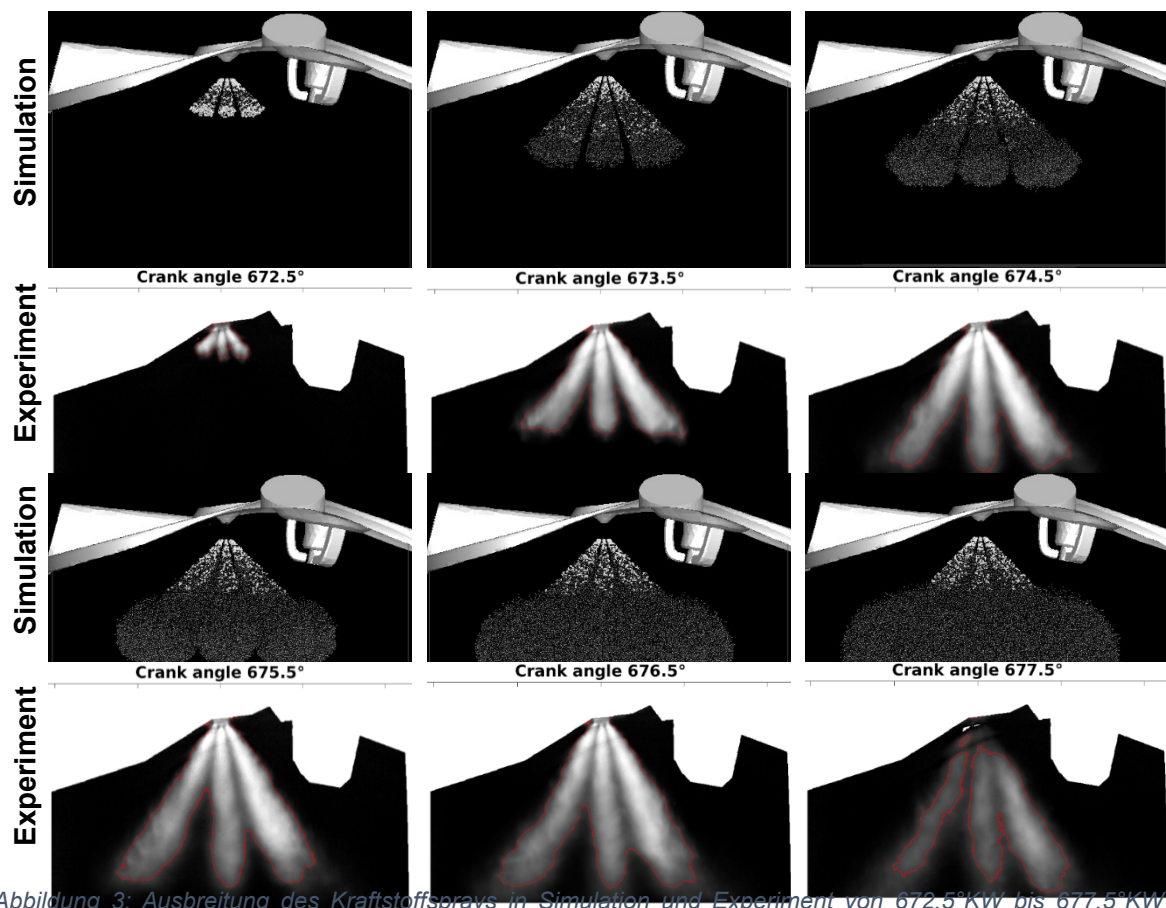


Abbildung 3: Ausbreitung des Kraftstoffsprays in Simulation und Experiment von  $672,5^\circ\text{KW}$  bis  $677,5^\circ\text{KW}$  im Motor.

In den Bildern ist eine gute Übereinstimmung der flüssigen Eindringtiefe von Simulation und Experiment zu erkennen. In der Simulation ist ab  $675,5^\circ\text{KW}$  eine Aufweitung des Strahlkegels zu beobachten, die im Experiment in der Form nicht zu sehen ist. Hierbei handelt es sich um ein Darstellungsproblem, da im Experiment nur die dichten Bereiche des Sprays abgebildet sind, bei denen der Anteil der Flüssigkeit pro Volumen entsprechend hoch ist. In den Randzonen des breiten Strahlkegels in der Simulation ist die Tropfendichte hingegen sehr gering, weswegen diese Bereiche in den experimentellen Bildern nicht zu erkennen sind.

Aus dieser Simulation wurden die lokalen Verdunstungsbedingungen der Tropfen extrahiert, welche in Tabelle 2 zusammengefasst sind. Da die Gemischbildung erst zum Ende der Kompressionsphase stattfindet, stellt dieser Betriebspunkt eine obere Abschätzung der Gastemperatur dar, die Tropfen bei ihrer Verdunstung in Ottomotoren erfahren. Die Verdunstung ist nicht das einzige Phänomen, welches bei der Kraftstoffeinspritzung auftritt. Immer höhere Einspritzdrücke führen zu hohen Tropfenrelativgeschwindigkeiten kurz hinter dem Düsenaustritt. Die daraus resultierenden hohen Weber-Zahlen initiieren Tropfenzerfallsprozesse, welche auf deutlich kleineren Zeitskalen ablaufen als Verdunstungsprozesse. Gerade für die großen Tropfen in Düsennähe läuft die Verdunstung und Aufheizung aufgrund ihrer kleinen Oberfläche zu Volumen Verhältnisses sehr langsam ab. Die Verdunstung wird erst für kleinere Tropfen mit großem Oberfläche zu Volumen Verhältnis relevant, die sich zudem aufgrund ihrer geringen Trägheit mit der Strömung mitbewegen und somit nicht weiter zerfallen. Folglich wurden die lokalen Verdunstungsbedingungen nur für Tropfen ausgewertet, deren Weber-Zahl kleiner als 12 ist, da unterhalb dieser Grenze kein weiterer Tropfenzerfall mehr zu erwarten ist.

*Tabelle 2: Bereich der lokalen Verdunstungsbedingungen für Tropfen in einem direkteinspritzendem Ottomotor bei einem Einspritzzeitpunkt bei 672°KW.*

Tropfendurchmesser	1 – 11 $\mu\text{m}$
Gastemperatur	363 K – 600 K
Tropfentemperatur	353 K – 400 K
Tropfen-Reynolds-Zahl	0 – 100
Kraftstoffmassenbruch	0 – 37%

Hieraus wird deutlich, dass die Verdunstung hauptsächlich für sehr kleine Tropfen mit einem Durchmesser von 1 – 11  $\mu\text{m}$  relevant ist. Aus dem Weber-Zahl Kriterium resultieren zudem sehr kleine Tropfen-Reynolds-Zahlen, welche auf der Relativgeschwindigkeit basieren.

Um auch den unteren Bereich der Gastemperaturen abzuschätzen, denen verdunstende Tropfen in Ottomotoren ausgesetzt sind, wurde eine weitere Simulation mit einem Einspritzzeitpunkt von 460°KW durchgeführt. Hierbei ergaben sich eine Erweiterung des Gastemperaturbereiches auf 320 K – 600 K sowie ein erhöhter Kraftstoffmassenbruch des Gases bis zu 55%.

#### **3.1.2 Untersuchung der Gitterabhängigkeit (AP 1.2)**

Um die Gitterabhängigkeit des ursprünglichen Verdunstungsmodells zu untersuchen, wurden Simulationen von ruhenden Einzeltropfen durchgeführt. Als Referenz wurden Daten von Nomura et al. [Nom96] verwendet, welche verdunstende Heptan Tropfen untersuchten. Die Ergebnisse der Simulationen für verschiedene Gitterauflösungen sind zusammen mit den experimentellen Ergebnissen in Abbildung 4 dargestellt. Hierbei ist zu erkennen, dass für abnehmende Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse die Simulationsergebnisse deutlich von den experimentellen Ergebnissen abweichen. Für größere Gitter zu Tropfen Verhältnisse konvergieren die Simulationsergebnisse hingegen zu einem nahezu gitterunabhängigen Verlauf, der eine geringfügig schnellere Verdunstung beschreibt als vom Experiment detektiert wird. Dies passt sehr gut mit Erkenntnissen von Luo et al. [Luo08] zusammen, der eine Gitterkantenlänge von mindestens dem 10-fachen Tropfendurchmesser postulierte, um plausible Ergebnisse der Tropfenverdunstung zu bekommen.

Der Grund für die stark verzögerte Verdunstung bei feinerer Gitterauflösung lässt sich durch Sättigungseffekte in der Zelle, die den Tropfen beinhaltet, erklären. Wie in der Einleitung bereits erwähnt, ist in der Lagrange'schen Formulierung die diskrete flüssige Phase mit Hilfe von Quelltermen an die kontinuierliche Gasphase gekoppelt. Dementsprechend werden bei einer feineren Gitterauflösung die Quellterme der Verdunstung auf eine kleinere Zelle aufgeprägt, wodurch diese sich schneller abkühlt und mit Kraftstoffdampf sättigt als eine größere Zelle. Diese Sättigung führt dann im weiteren Verlauf zu einer deutlich gehemmten Verdunstung.

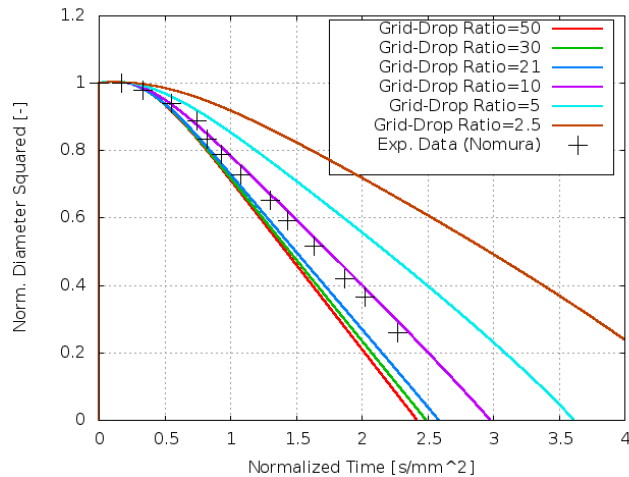


Abbildung 4: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse eines ruhenden Heptan Tropfens bei 1 bar und 741 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur.

Neben ruhenden Einzeltropfen wurden auch Simulationen von bewegten Einzeltropfen durchgeführt und mit experimentellen Ergebnissen von Wilms [Wil05] von fallenden Einzeltropfen verglichen. Die dazugehörigen Ergebnisse in Abbildung 5 zeigen, dass die Gitterabhängigkeit für bewegte Tropfen deutlich reduziert ist. Der Sättigungseffekt tritt bei dieser Konfiguration nur in kleinerem Ausmaße auf, da die kleinere Zelle zwar schneller Kraftstoffdampf ansammelt als größere Zellen, allerdings ist die Verweilzeit des Tropfens in kleineren Zellen auch kleiner und der Tropfen erreicht benachbarte, noch ungesättigte Zellen früher als bei größeren Zellen.

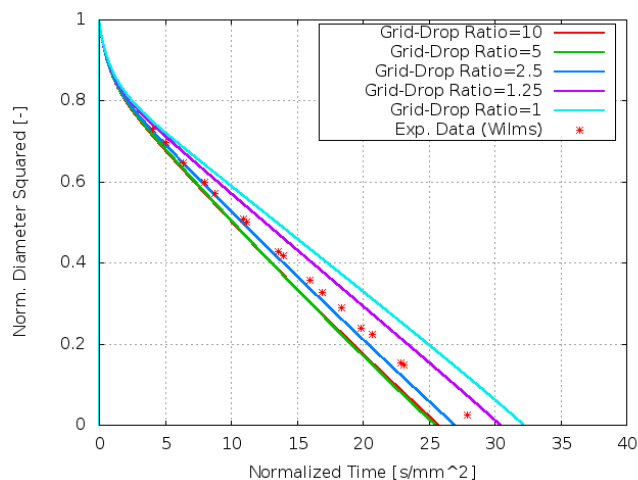


Abbildung 5: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse eines fallenden Pentan Tropfens bei 1 bar und 300 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur.

### 3.1.3 Einfluss des Referenzzustandes (AP 1.3)

Während der Tropfenaufheizung und -verdunstung entwickelt sich um den Tropfen herum eine Grenzschicht im Temperatur- und Kraftstoffdampf. Die Verdunstung wird maßgeblich von Diffusions- und Wärmeleitungsprozesse innerhalb dieser Grenzschicht beeinflusst, welche in Lagrange'schen Simulationen jedoch nicht aufgelöst wird. Stattdessen wird das Temperatur- und Kraftstoffdampf in der Grenzschicht mit Hilfe eines sogenannten Referenzzustandes beschrieben, welcher einen Einfluss auf die Stoff- und Wärmediffusion vom Gas zum Tropfen hin besitzt.

Im Rahmen dieses Projektes wurden daher verdunstende Einzeltropfen simuliert, welche zum einen die weit verbreitete 1/3 Regel für den Referenzzustand nach Hubbard [Hub75] verwenden. Zum anderen wurden Simulationen durchgeführt, in denen der Zustand in der Grenzschicht mit dem lokalen Zustand des Fernfeldes gleichgesetzt wurde (sog. Infinity State), wie es Miller und Bellan [Mil99] in ihrem Model verwendet haben. Die dazugehörigen Ergebnisse des ruhenden Heptan Tropfens von Nomura [Nom96] sind in Abbildung 6 dargestellt, während die Ergebnisse des fallenden Pentan Tropfens von Wilms [Wil05] in Abbildung 7 gezeigt sind.

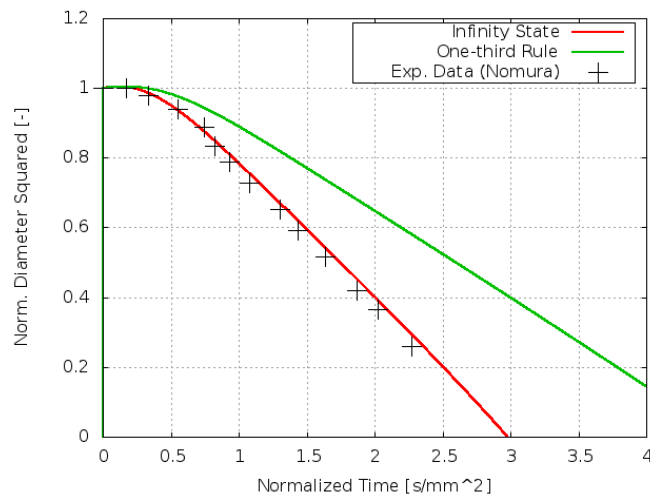


Abbildung 6: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Referenzzustände eines ruhenden Heptan Tropfens bei 1 bar und 741 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur.

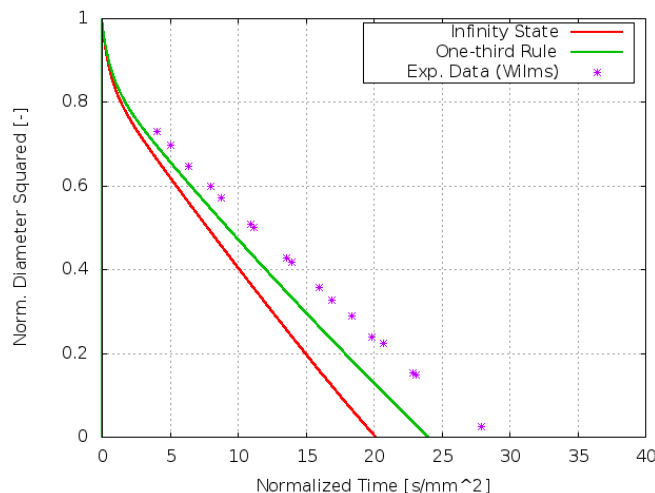


Abbildung 7: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Referenzzustände eines fallenden Pentan Tropfens bei 1 bar und 300 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur.

Beide Fälle zeigen einen signifikanten Einfluss des gewählten Referenzzustandes auf die Verdunstungskurve der untersuchten Tropfen. Wie bereits bei den vorherigen Untersuchungen zur Gitterabhängigkeit beeinflusst der Referenzzustand das Ergebnis des ruhenden Tropfens deutlich stärker als das des fallenden Tropfens, was jedoch auch in den größeren initialen Temperaturunterschieden zwischen Tropfen und Umgebungsgas begründet ist. Während beim ruhenden Tropfen der Infinity State eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen aufweist und das Ergebnis für die 1/3 Regel die Verdunstung deutlich verzögert, zeigt sich beim fallenden Tropfen das umgekehrte Bild. Hier liefert die 1/3 Regel eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen und der Infinity State berechnet eine zu schnelle Tropfenverdunstung. Somit konnten die Erkenntnisse von Knudsen et al. [Knu14] bestätigt werden, der in seiner Studie keine eindeutige Überlegenheit eines Referenzzustandsmodells gefunden hat.

### 3.1.4 Simulation von Validierungsfällen (AP 1.4)

Als Validierungsfall wurde der Spray G Fall des Engine Combustion Networks (ECN) verwendet. Hierbei wird die Einspritzung von Iso-Oktan als Benzin Surrogat mit Hilfe eines Achtloch-Injektors in einer Spraykammer untersucht. Untersuchungen in einer Spraykammer haben den Vorteil, dass die Effekte der Einspritzung separat von der Gasströmung im Motor untersucht werden können. Zudem existiert eine Vielzahl an Messdaten und veröffentlichten Studien zu diesem Fall, was das Aufsetzen der Simulation und Auswertung der Ergebnisse erleichtert. Die Randbedingungen von Spray G sind in Tabelle 3 aufgeführt.

Tabelle 3: Randbedingungen von Spray G nach [ECN1].

Gastemperatur	573 K
Gasdruck	6 bar
Gasart	100% Stickstoff
Eingespritzte Kraftstoffmasse	10 mg
Einspritzdruck	200 bar
Kraftstoff	Iso-Oktan

Im Gegensatz zu den RANS Simulationen des DI-Ottomotors aus AP 1.1, handelt es sich bei den Simulationen des Referenzfalles um Large-Eddy Simulationen (LES), die mit Hilfe des in-house LES/DNS Codes CIAO des Instituts für Technische Verbrennung durchgeführt wurden. Die Simulationsergebnisse sind in Abbildung 8 zusammen mit Schattenwurfbildern der flüssigen Phase dargestellt. Sowohl der Verlauf der flüssigen Eindringtiefe als auch die Form des Strahlkegels der Simulation stimmen gut mit den experimentellen Ergebnissen überein. Wie bereits bei der Untersuchung der Kraftstoffeinspritzung im Motor zeigt sich in der Simulation eine stärkere Aufweitung des Strahlkegels bei späteren Zeitpunkten. Dies lässt sich wie bereits oben aufgeführt durch das zu niedrige Detektionssignal dieser Regionen mit geringen Tropfendichten erklären.

Auch die gasförmige Eindringtiefe, welche in Abbildung 9 abgebildet ist, zeigt eine sehr gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation, was durch eine sehr feine Gitterauflösung erreicht wurde.



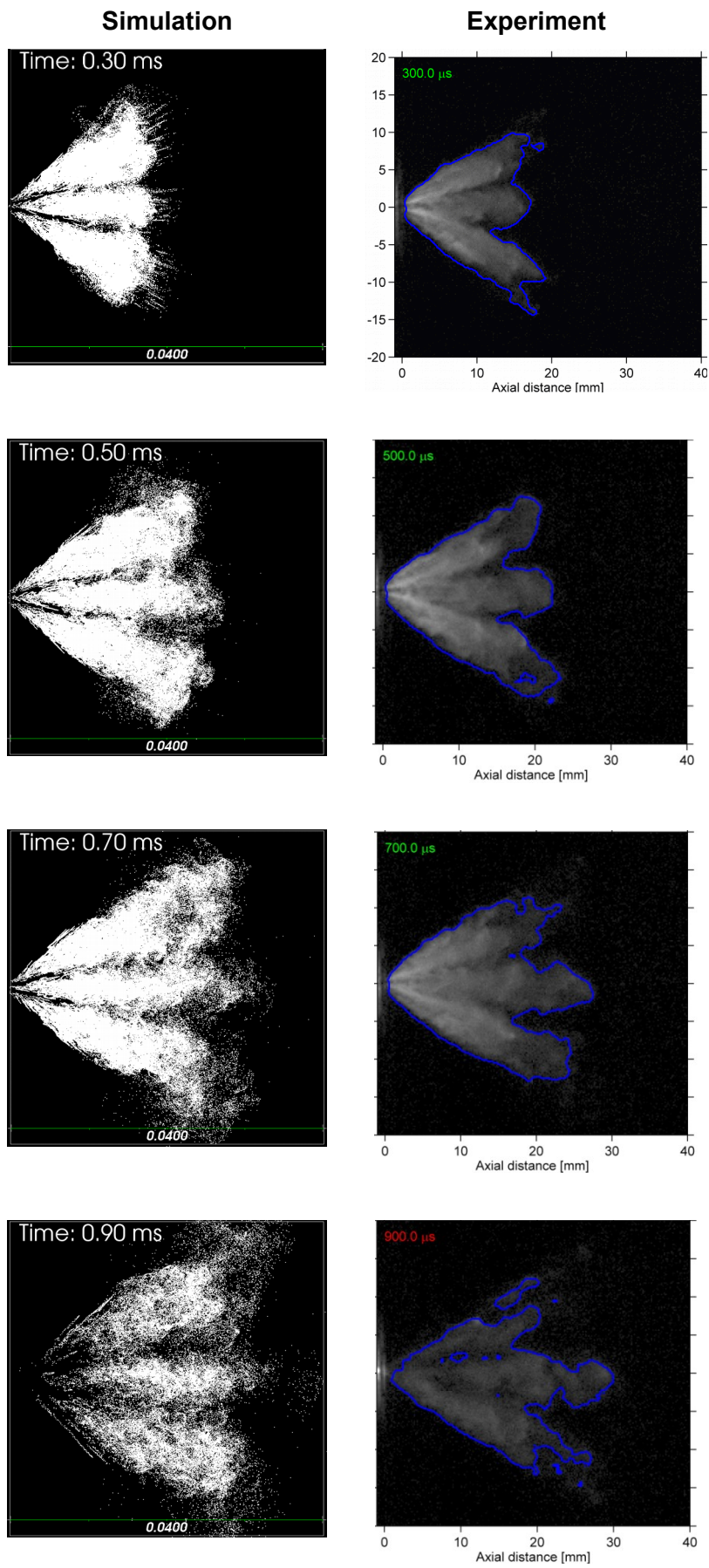


Abbildung 8: Ausbreitung des Kraftstoffsprays in Simulation und Experiment von 0,3 – 0,9 ms.

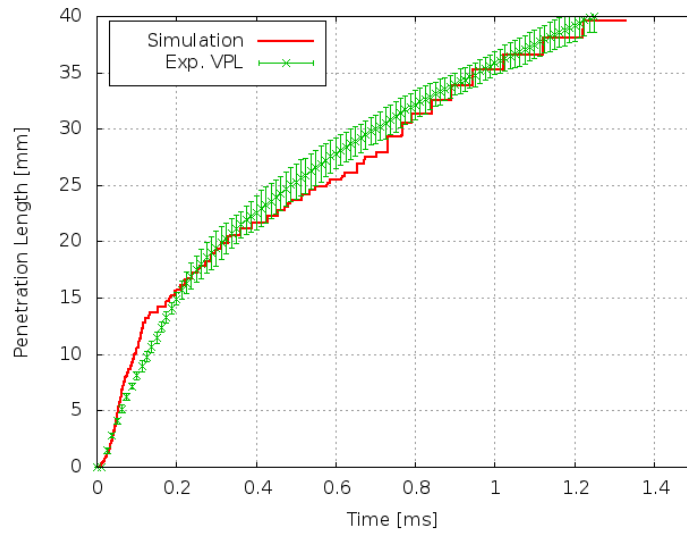


Abbildung 9: Verlauf der gasförmigen Eindringtiefe über der Zeit für Simulation und Experiment des Spray G [ECN1].

### 3.2 Modellbildung, Implementierung und Validierung / Arbeitspakete 4 und 5

Die Verdunstungsmodelle, die in kommerziellen CFD Codes verwendet werden [Spa53, Abr89, Mil98, Mil99], basieren auf der Filmtheorie nach Lewis und Whitman [Lew24]. Zur Herleitung dieser Modelle wurde ein ruhender, sphärischer und damit punktsymmetrischer Einzeltropfen betrachtet. Aufgrund der Punktsymmetrie ist eine eindimensionale Betrachtung in radialer Richtung möglich. Für dieses System wird die Massenbilanz an der Tropfenoberfläche aufgestellt.

$$\frac{\dot{m}_F}{4\pi r^2} = Y_F \left( \frac{\dot{m}}{4\pi r^2} \right) - \rho D \frac{dY_F}{dr} \quad (1)$$

In dieser Gleichung beschreibt der Term auf der linken Seite den verdunstenden Massenstrom über die Tropfenoberfläche. Während der erste Term auf der rechten Seite den Kraftstoffdampfstrom auf der Gasseite darstellt (sogenannter Stefanstrom), repräsentiert der zweite Term den Diffusionsstrom des Kraftstoffdampfes weg von der Tropfenoberfläche.

Es wird nun angenommen, dass das Umgebungsgas sich nicht im Tropfen lösen kann, wodurch der Stefanstrom dem verdunstenden Massenstrom entspricht ( $\dot{m}_F = \dot{m}$ ). Zudem wird die Annahme getroffen, dass der Diffusionsterm  $\rho D$  konstant über dem Radius ist. Mit diesen Annahmen lässt sich die Gleichung durch eine Trennung der Variablen umstellen und von der Tropfenoberfläche (Index  $R$ ) bis ins sogenannte Fernfeld (Index  $\infty$ ), welches von der Tropfenverdunstung unbeeinflusst ist, integrieren:

$$\frac{\dot{m}_F}{4\pi\rho D} \int_R^{r_\infty} \frac{1}{r^2} dr = \int_{Y_R}^{Y_\infty} \frac{1}{1-Y_F} dY_F \quad (2)$$

Die Integration dieser Gleichung ergibt folgenden Ausdruck:

$$\frac{\dot{m}_F}{4\pi\rho D} \left( \frac{-1}{r_\infty} + \frac{1}{R} \right) = \ln \left( \frac{1-Y_\infty}{1-Y_R} \right) \quad (3)$$

Üblicherweise wird der Zustand des Fernfeldes (in diesem Fall der Kraftstoffmassenbruch  $Y_\infty$ ) in der Zelle ausgewertet, die den Tropfen beinhaltet. Damit dies zulässig ist, müssen die Abmaße der Zelle  $\Delta x$  deutlich größer sein als der Tropfenradius  $R$ , was als Fernfeldannahme bezeichnet wird:

$$r_\infty = \frac{1}{2} \Delta x \gg R \quad (4)$$

Setzt man dies in die obige Gleichung ein, so ergibt sich:

$$\frac{\dot{m}_F}{4\pi\rho D} \left( \frac{1}{R} \right) = \ln \left( \frac{1-Y_{cell}}{1-Y_R} \right) \quad (5)$$

Durch Umstellen der Gleichung und Einführen der Spalding-Zahl für den Massentransport

$$B_M = \frac{Y_R - Y_\infty}{1 - Y_R} \quad \text{erhält man schließlich die allgemein bekannte Formulierung für die}$$

Tropfenverdunstungsrate:

$$\dot{m}_F = 4\pi\rho DR \ln(1+B_M) \quad (6)$$

Dieser Ausdruck wird in der Regel noch um die Sherwood-Zahl  $Sh$  erweitert, die den Einfluss eines konvektiven Stofftransportes auf die Verdunstungsrate berücksichtigt.

$$\dot{m}_F = 2 \pi \rho D R Sh \ln(1 + B_M) \quad (7)$$

Die gestiegenen Rechenkapazitäten und die daraus resultierende Möglichkeit immer feinere Gitterauflösungen zu wählen, hat dazu geführt, dass die Fernfeld-Annahme nicht mehr zutrifft. Um dies zu berücksichtigen, wird die obige Gleichung nicht mehr bis ins Fernfeld integriert, sondern man wählt ausgehend von der Tropfenoberfläche einen diskreten Punkt entfernt von der Oberfläche ( $r_\infty = R + \Delta r$ ). An dieser Stelle wird der lokale Kraftstoffmassenbruch ausgewertet, der dann in die Berechnung der Spalding-Zahl einfließt.

Gleichzeitig ist nun die Annahme  $\Delta r \gg R$  nicht mehr gültig, so dass der Term  $\frac{1}{r_\infty}$  in der Gleichung enthalten bleibt. Durch Umstellen der Gleichung erhält man folgenden Ausdruck:

$$\dot{m}_F = 4 \pi \rho D R \frac{r_\infty}{r_\infty - R} \ln(1 + B_M) \quad (8)$$

Diese Formulierung entspricht der vorherigen Gleichung der Verdunstungsrate bis auf den neu hinzugekommenen Term  $\frac{r_\infty}{r_\infty - R}$ , welcher im folgenden Gitterfaktor genannt wird.

Setzt man den Ausdruck für  $r_\infty$  in den Gitterfaktor ein, erhält man:

$$\frac{R + \Delta r}{R + \Delta r - R} = \frac{R + \Delta r}{\Delta r} \quad (9)$$

Hierbei wird deutlich, dass das erweiterte Verdunstungsmodell gegen die ursprüngliche Formulierung konvergiert, wenn der gewählte Punkt, an dem der Kraftstoffmassenbruch ausgewertet wird, sehr weit von der Tropfenoberfläche entfernt oder der betrachtete Tropfen

sehr klein ist, so dass  $\Delta r \gg R$  und somit  $\frac{R + \Delta r}{\Delta r} \approx 1$  gilt. Für kleine Werte von  $\Delta r$ ,

z. B. wenn der Kraftstoffmassenbruch in der Zelle ausgewertet wird, die den Tropfen beinhaltet und diese Zelle sehr klein ist, dann ergibt der Gitterfaktor einen Wert größer als 1. Hierdurch wird der Sättigungseffekt der Zelle, die zu einem reduzierten Gradienten im Kraftstoffdampffeld führt, kompensiert und ist damit ein Schritt hin zu einem gitterunabhängigen Verdunstungsmodell.

Dasselbe Verfahren wird nun auf die Gleichung der Tropfenerwärmung angewendet. Hierbei wird die Energiebilanz an der Tropfenoberfläche gebildet:

$$\frac{\dot{Q}_{heat}}{4 \pi r^2} = \frac{\dot{m}_F L_v}{4 \pi r^2} - \lambda_g \frac{dT}{dr} \quad (10)$$

In dieser Gleichung repräsentiert der Term auf der linken Seite die Wärme, die zur Tropfenaufheizung zur Verfügung steht. Der erste Term auf der rechten Seite steht für die zur Verdunstung erforderliche Verdunstungsenthalpie, während der zweite Term die Wärmeleitung des Gases zum Tropfen hin beschreibt.

Neben der erneut angenommenen Punktsymmetrie des Tropfens, die eine ausschließliche Betrachtung in radialer Richtung ermöglicht, wird zudem die Annahme getroffen, dass der Tropfen perfekt durchmischt ist (sogenannte „well-mixed“ Annahme) und keine Temperaturgradienten innerhalb des Tropfens auftreten. Zudem wird angenommen, dass der Term der Verdunstungsenthalpie konstant ist. Durch eine Trennung der Variablen und Integration ergibt sich folgender Ausdruck:

$$\frac{\dot{Q}_{heat} - \dot{m}_F L_v}{4\pi} \int_R^{r_\infty} \frac{1}{r^2} dr = \int_{T_R}^{T_\infty} \lambda_g dT \quad (11)$$

Durch Integrieren und Umstellen ergibt sich dann:

$$\dot{Q}_{heat} = 4\pi \left( \frac{-1}{r_\infty} + \frac{1}{R} \right)^{-1} \lambda_g (T_\infty - T_R) + \dot{m}_F L_v \quad (12)$$

Durch Einsetzen von  $\dot{Q}_{heat} = \frac{m_d c_L dT}{dt}$  und der Erweiterung mit der Nusselt-Zahl  $Nu$  zur Berücksichtigung eines konvektiven Wärmetransportes (analog zur Sherwood-Zahl in der Bestimmung der Verdunstungsrate) ergibt sich schließlich:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{2\pi R \lambda_g Nu \frac{r_\infty}{r_\infty - R} (T_\infty - T_R) + \dot{m}_F L_v}{m_d c_L} \quad (13)$$

In dieser Herleitung wurde direkt auf die Fernfeldannahme verzichtet, so dass sich diese Gleichung erneut durch den zuvor eingeführten Gitterfaktor  $\frac{r_\infty}{r_\infty - R}$  von der sonst geläufigen Formulierung der Tropfenaufheizrate unterscheidet. Damit ist das Modell in der Lage die Sättigung im Temperaturfeld für kleine Gittergrößen zu kompensieren, während das Modell für große Gitterkantenlängen gegen das ursprüngliche Modell konvergiert.

Um ein Gefühl für den Gitterfaktor zu bekommen, welcher sich im Verlauf der Verdunstung aufgrund des sich ändernden Tropfenradius  $R$  ändert, ist in Abbildung 10 der Verlauf des Gitterfaktors für einen 0,6 mm großen Tropfen dargestellt bei einer Gitterkantenlänge von 1 mm. Die Auswertung der Gradienten im Kraftstoffdampf- sowie Temperaturfeld wird 1 mm entfernt von der Tropfenoberfläche durchgeführt. Hierbei ist gut zu erkennen, dass der Gitterfaktor bei einem Wert von 1,6 startet. Folglich bestimmt das erweiterte Modell zu Beginn der Verdunstung eine 60% erhöhte Verdunstungs- sowie Aufheizrate. Mit zunehmender Verdunstung und somit abnehmendem Tropfenradius nähert sich der Gitterfaktor dem Wert 1 an und konvergiert wie bereits zuvor beschrieben gegen das ursprüngliche Modell, welches für große Gitter zu Tropfen Verhältnissen gute Ergebnisse liefert.

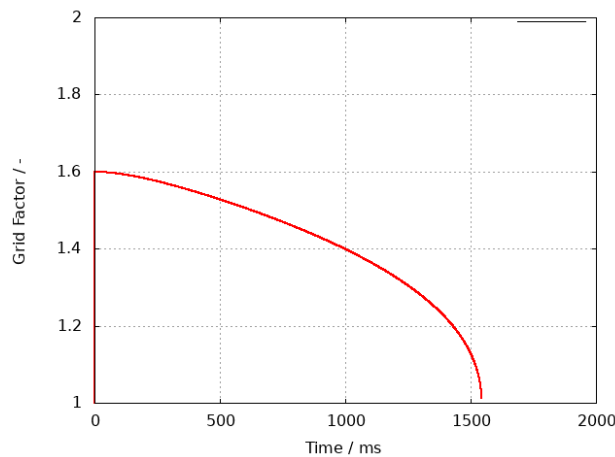


Abbildung 10: Verlauf des Gitterfaktors über der Zeit für einen Tropfen während seiner Verdunstung.

Um zu überprüfen, ob das erweiterte Verdunstungsmodell gitterunabhängige Ergebnisse liefert, wurden weitere Simulationen eines ruhenden Einzeltropfens durchgeführt, da bei dieser Konfiguration der Gittereinfluss am Größten ist. Hierbei wurde der bereits erwähnte Fall eines Heptan Tropfens von Nomura et al. [Nom96] mit einem Durchmesser von 0,6 mm verwendet. Dieser Tropfen wurde mit verschiedenen Gitterkantenlängen von 0,5 mm 1,0 mm und 2 mm untersucht, was einem Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnis von 0,833; 1,66 bzw. 3,33 entspricht. Hierbei muss erwähnt werden, dass bei einer Gitterkantenlänge von 0,5 mm, das flüssige Volumen innerhalb der Zelle größer ist als das lokale Gasvolumen. Bei derartigen Gitterabmessungen sind die Bedingungen der Lagrange'schen Methode nicht mehr erfüllt, so dass dieser Fall einen Grenzfall für das neue Verdunstungsmodell darstellt.

Die Ergebnisse sind in Abbildung 11 illustriert und zeigen, dass für eine Gitterkantenlänge von 1 mm das neue Modell eine beschleunigte Verdunstung im Vergleich zum alten Modell aufweist. Für eine Gitterkantenlänge von 2 mm bzw. einem Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnis von 3,33 zeigt das neue Modell eine sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten, was mit dem alten Modell erst bei einem Verhältnis von 10 erreicht wurde (siehe Abbildung 4). Allerdings ist auch zu sehen, dass das neue Modell keine gitterunabhängigen Ergebnisse liefert. Bei einer Gitterkantenlänge von 0,5 mm und 1,0 mm wird die Verdunstung wieder verzögert, da die Sättigungseffekte den Einfluss des Gitterfaktors überwiegen. Folglich müssen weitere Maßnahmen ergriffen werden, um mit dem Modell gitterunabhängige Ergebnisse zu erzielen.

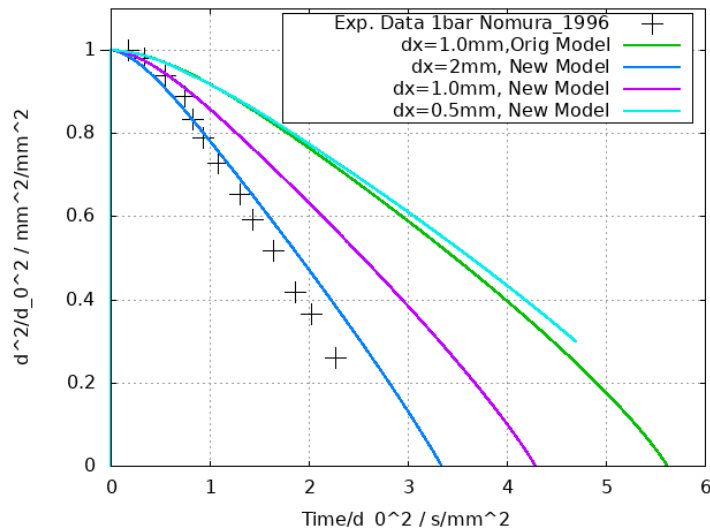


Abbildung 11: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse eines ruhenden Heptan Tropfens bei 1 bar und 741 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur für das alte und neue Verdunstungsmodell mit Gitterfaktor.

Wie bereits erwähnt, führt das Aufprägen des Quellterms in der Kontinuitäts- und Energiegleichung der Gasphase bei feinen Gittern zu Sättigungseffekten. Diese Sättigungseffekte können durch die Verwendung einer geeigneten Verteilungsfunktion minimiert bzw. verhindert werden. Zu diesem Zweck wurde in diesem Projekt die Quelltermverteilung nach Apte et al. [Apt08] verwendet, bei dem der Quellterm mit Hilfe einer Gaußverteilung um die Tropfenposition herum verteilt wird. Die Breite der Gaußfunktion ist als Vielfaches des aktuellen Tropfendurchmessers definiert, so dass für kleine Tropfen in großen Gitterzellen der Quellterm nach wie vor nur auf eine Zelle verteilt wird. Somit wird auch die Bedingung erfüllt, dass die Änderung des Verdunstungsmodells die guten Ergebnisse des ursprünglichen Modells bei großen Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnissen nicht beeinflusst.

Um die Breite der Quellterm-Verteilungsfunktion abzuschätzen, wurde auf die Ergebnisse der aufgelösten Tropfensimulationen aus AP 2 zurückgegriffen, bei denen eine Abschätzung der Grenzschichtdicke des Temperatur- und Kraftstoffdampffeldes um den Tropfen herum vorgenommen wurde. Hierbei wurde für einen Iso-Oktan Tropfen eine thermische Grenzschichtdicke vom 6,5-fachen Tropfendurchmesser festgestellt. Die Grenzschichtdicke im Kraftstoffdampffeld ergab sich zum 5,75-fachen des Tropfendurchmessers.

Basierend auf diesen Daten wurde dieselbe Konfiguration der aufgelösten Tropfensimulation mit dem neuen Modell und verschiedenen Vielfachen des Tropfendurchmessers zur Beschreibung der Quellterm-Verteilungsfunktionsbreite durchgeführt und mit den Ergebnissen der aufgelösten Tropfensimulation verglichen. Die dazugehörigen Verdunstungskurven sind in Abbildung 12 dargestellt. Es zeigt sich, dass für eine Verteilungsfunktionsbreite vom 6-fachen Tropfendurchmesser die beste Übereinstimmung der aufgelösten Tropfensimulation erreicht werden konnte.

Das neue Verdunstungsmodell, welches nun auf die Erweiterung um den Gitterfaktor sowie die Einführung der Quelltermverteilung zurückgreift, wurde nun erneut auf seine Gitterunabhängigkeit hin untersucht. Zu diesem Zweck wurde erneut der Fall von Nomura et al. [Nom96] betrachtet, wobei die Ergebnisse in Abbildung 13 abgebildet sind.

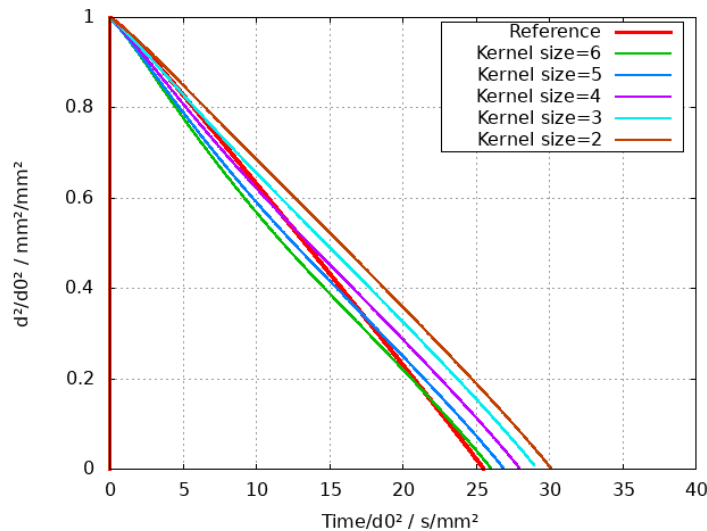


Abbildung 12: Einfluss der Breite der Quellterm-Verteilungsfunktion im Vergleich zum Ergebnis einer aufgelösten Tropfensimulation für einen  $10\ \mu\text{m}$  großen Iso-Oktan Tropfen bei einer Umgebungstemperatur bzw. Druck von  $353\ \text{K}$  und  $1\ \text{bar}$ .

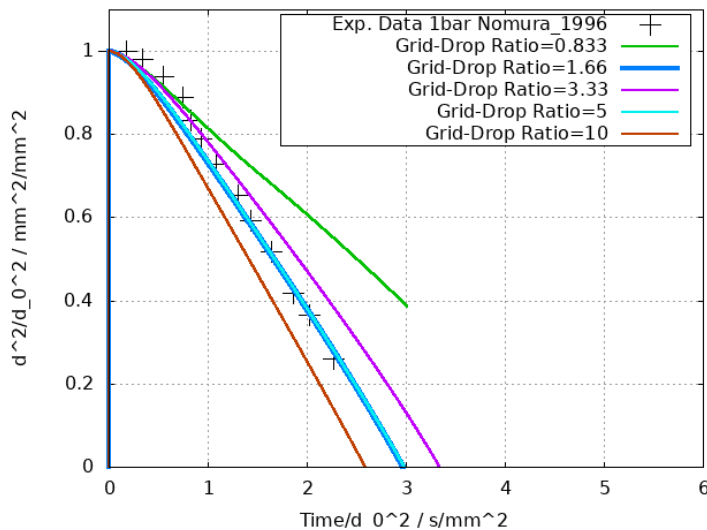


Abbildung 13: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Gitterkantlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse eines ruhenden Heptan Tropfens bei  $1\ \text{bar}$  und  $741\ \text{K}$  Umgebungsdruck bzw. -temperatur für das neue Verdunstungsmodell mit Gitterfaktor und Quelltermverteilung.

Das neue Verdunstungsmodell mit Gitterfaktor und Quelltermverteilung zeigt auch für Gitterkantlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse von weniger als  $3,33$  eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen und stellt somit eine Verbesserung gegenüber dem neuen Verdunstungsmodell ohne Quelltermverteilung dar. Erst ab einem Gitterkantlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnis kleiner als  $1$  läuft die Verdunstung deutlich verzögert ab. Wie bereits erwähnt wurde, werden für diese Gitterauflösungen die Bedingungen der Langrange'sche Formulierung verletzt, so dass auch die Ergebnisse des neuen Verdunstungsmodells nicht mehr zuverlässig sind. Bis zu diesem Verhältnis liefert das neue Modell aber nahezu gitterunabhängige Ergebnisse, die geringfügig um die experimentellen Werte schwanken.

Nachdem das neue Verdunstungsmodell nun die Anforderung der Gitterunabhängigkeit erfüllt, konnte sich im nächsten Schritt der Modellierung der Tropfen-Tropfen Interaktion gewidmet werden. Bei der Verdunstung wird im Allgemeinen angenommen, dass der Phasenübergang des Kraftstoffes von flüssig nach gasförmig auf einer schnelleren Zeitskala



abläuft als die Diffusion des gasförmigen Kraftstoffes weg von der Oberfläche (sogenanntes Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewicht). Demzufolge bestimmt die Diffusion in der Gasphase die Verdunstungsrate. Befinden sich nun mehrere verdunstende Tropfen in unmittelbarer Nähe zueinander, wird die Diffusion des Kraftstoffdampfes des einen Tropfens in die Richtung des anderen Tropfens gehemmt, da dort bereits eine erhöhte Kraftstoffdampfkonzentration im Gas vorliegt. Dieser Zusammenhang ist in Abbildung 14 vereinfacht skizziert.

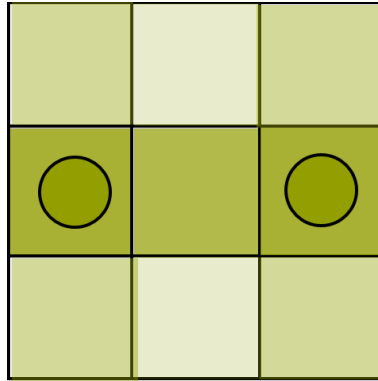


Abbildung 14: Tropfen-Tropfen Interaktion der Verdunstung über das Kraftstoffdampffeld.

Derselbe Effekt tritt bei der Wärmeleitung in Richtung des Tropfens auf. Aus der Richtung des benachbarten Tropfens kann weniger Wärme zum Tropfen geleitet werden, da ein Teil der Energie bereits zum benachbarten Tropfen diffundiert ist und somit die Temperatur zwischen den Tropfen niedriger ist als im restlichen Fernfeld. Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass die Interaktion benachbarter, verdunstender Tropfen über das Temperatur- und Kraftstoffdampffeld stattfindet.

Für die Berücksichtigung der Tropfen-Tropfen Interaktion in einer Lagrange'schen Simulation ergeben sich hieraus zwei Fälle, die im Folgenden unterschieden werden. Dies ist zum einen die Interaktion zweier Tropfen die sich in benachbarten Zellen befinden, so dass die Gradienten im Gasfeld vom verwendeten Gitter teilweise aufgelöst werden (siehe Abbildung 14). Zum anderen kann jedoch auch der Fall zweier Tropfen auftreten, die beide in derselben Zelle vorliegen (siehe Abbildung 16), was im Folgenden als subgrid Interaktion bezeichnet wird. Beide Fälle gilt es mit dem neuen Verdunstungsmodell zu berücksichtigen.

Aus Abbildung 14 wird ersichtlich, dass die Gradienten im Temperatur- und Kraftstoffdampffeld nicht mehr punktsymmetrisch zum jeweiligen Tropfen sind, sondern sich in Abhängigkeit der Ortsrichtung ändern. Diese unterschiedlichen Gradienten in die verschiedenen Raumrichtungen gilt es zu berücksichtigen.

Die erste Möglichkeit verschiedene ortsabhängige Gradienten zu bestimmen, ist sie auf einem fixen Auswertungsradius in alle drei Raumrichtungen auszuwerten. Eine zweidimensionale Skizze dieses Auswertungsradius ist in Abbildung 15 dargestellt. Ein Vorteil dieser Methode ist die Tatsache, dass eine einfache Mittelung der Gradienten vorgenommen werden kann, um einen mittleren Gradienten zu erhalten, auf dessen Basis anschließend die Verdunstungs- und Aufheizrate des Tropfens bestimmt werden kann. Da die Gradienten alle im selben Abstand zur Tropfenoberfläche ausgewertet werden, kann die Form des Temperatur- und des Kraftstoffdampfes vernachlässigt werden, welche ansonsten bei der nachfolgenden Mittelung berücksichtigt werden müsste, um Mittelungsfehler zu vermeiden. Ein Nachteil dieser Methode die Gradienten auf einem fixen Auswertungsradius zu bestimmen, ist der erhöhte Interpolationsaufwand. Da die Punkte auf dem Auswertungsradius in der Regel nicht mit Zellmittelpunkten oder -oberflächen zusammenfallen, müssen die lokale Gastemperatur und die Kraftstoffdampfkonzentration

erst auf die Position auf dem Auswertungsradius interpoliert werden. Für den Fall, dass die Gradienten in jede der drei Raumrichtungen vor und hinter dem Tropfen ausgewertet werden, ergeben sich sechs Interpolationen. Speziell für CFD Programme, die unstrukturierte Gitter benutzen, könnte sich der numerische Aufwand vergrößern, wenn der Auswertungsradius benachbarte oder noch weiter entfernte Zellen schneidet, auf die nur mit größerem Aufwand zugegriffen werden kann. Die Größe des Auswertungsradius beeinflusst folglich den numerischen Aufwand. Die Verdunstungs- und Aufheizrate sind von der Größe des Auswertungsradius jedoch unabhängig, solange konsistente Wertepaare aus einem fixen Abstand zur Oberfläche sowie der dort vorliegenden Temperatur und Kraftstoffdampfkonzentration gewählt werden. Es wird daher empfohlen kleine Abstände zu wählen.

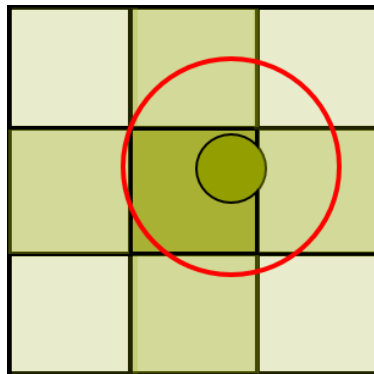


Abbildung 15: Berechnung der Gradienten für das Verdunstungsmodell entlang eines Auswertungsradius.

Ein weiterer Vorteil der Auswertungsradius-Methode ist die Möglichkeit auch Tropfen-Tropfen Interaktionen innerhalb einer Zelle zu berücksichtigen (subgrid Interaktion). Zwar können die hierbei auftretenden Gradienten im Gasfeld nicht vom numerischen Gitter aufgelöst werden, allerdings kann die Größe des Auswertungsradius entsprechend angepasst werden wie es in Abbildung 16 skizziert ist. Die Größe des Auswertungsradius fließt dann in die Berechnung des Gitterfaktors ein. Zudem führt die gleichzeitige Verdunstung zweier Tropfen innerhalb einer Zelle zu einer beschleunigten Sättigung, die beide Tropfen im weiteren Verlauf in ihrer Verdunstung hemmt.

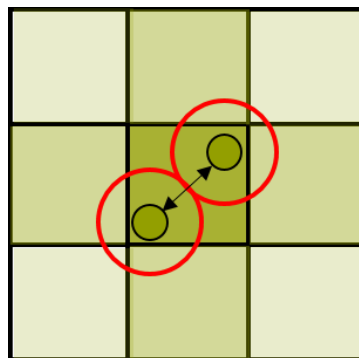


Abbildung 16: Subgrid Tropfen-Tropfen Interaktion mit angepasster Größe des Auswertungsradius.

Die zweite Möglichkeit um ortsabhängige Gradienten für die Verdunstungs- und Aufheizrate zu bestimmen, ist den Gradienten bis zur benachbarten Zelloberfläche zu bestimmen wie es in Abbildung 17 illustriert ist. Da die Temperatur und Kraftstoffdampfkonzentration auf den Zelloberflächen meist schon vorab zur Bestimmung der Flüsse berechnet wurden, kann auf diese Werte zugegriffen werden, was den numerischen Aufwand reduziert. Falls dies nicht der Fall sein sollte, könnten die Temperatur und Kraftstoffdampfkonzentration einmal zu

Beginn des Zeitschrittes auf die Zelloberflächen interpoliert werden, was gerade bei großen Tropfenzahlen einen reduzierten Rechenaufwand bedeuten würde.

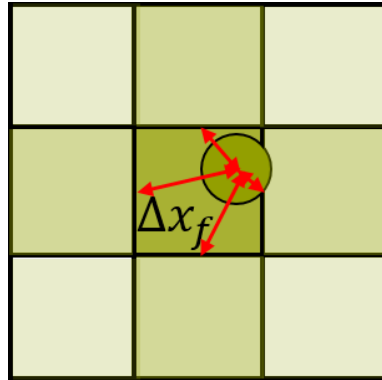


Abbildung 17: Bestimmung der Gradienten für das Verdunstungsmodell auf Basis der Zelloberflächenwerte.

Diese Werte auf den Zelloberflächen können dann direkt zur Bestimmung der Gradienten des Verdunstungsmodells verwendet werden. Da allerdings der Abstand des Tropfens zu den verschiedenen Zelloberflächen nicht identisch ist, muss die Form des Temperatur- und des Kraftstoffdampfgebietes berücksichtigt werden. Somit kann nicht einfach eine arithmetische Mittelung der Gradienten vorgenommen werden, sondern es müssen mehrere Verdunstungs- und Aufheizraten für die verschiedenen Raumrichtungen berechnet werden, über die dann schließlich ein Mittelwert bestimmt werden kann.

Zudem ist diese Methode zur Bestimmung der Gradienten nicht in der Lage, die Tropfen-Tropfen Interaktion innerhalb einer Zelle zu berücksichtigen. Aus diesem Grunde wurde im Rahmen dieses Projektes die erste Methode auf Basis eines Auswertungsradius implementiert und getestet. Die zweite Methode könnte jedoch gerade für CFD Methoden mit unstrukturierten Gittern eine günstigere Wahl sein, weshalb sie hier ebenfalls vorgestellt wurde.

Bevor das neue Verdunstungsmodell auf seine Fähigkeit zur Berücksichtigung von Tropfen-Tropfen Interaktionen untersucht werden kann, gilt es jedoch noch die Frage zu beantworten, wie die Größe des Auswertungsradius bestimmt werden kann. Da eine exakte Berechnung der Abstände zu benachbarten Tropfen einen immensen numerischen Aufwand bedeutet und speziell im Fall der üblicherweise verwendeten Stochastic-Parcel Methode nach [Duk80], bei der Tropfen gleicher Eigenschaften zu sogenannten Parcels zusammengefasst werden, sogar unmöglich ist, wird ein vereinfachter Weg gewählt. Hierbei wird jedem Tropfen innerhalb einer Zelle ein exklusives Volumen zugeordnet, das ihm zur Verdunstung zur Verfügung steht. Zu diesem Zweck wird das Zellvolumen  $V_{cell}$  durch die Tropfenanzahl  $N$  dividiert:

$$V_{excl} = \frac{V_{cell}}{N}. \quad (14)$$

Hierbei berücksichtigt die Tropfenanzahl sowohl alle Parcel innerhalb einer Zelle als auch die Tropfen innerhalb jedes Parcels. Aus diesem exklusiven Volumen wird dann die Größe des Auswertungsradius für alle Tropfen einer Zelle abgeleitet:

$$r_{AR} = \sqrt[3]{V_{excl}}. \quad (15)$$

Dieser Ansatz kann auch für einen einzelnen Tropfen innerhalb einer Zelle verwendet werden, wobei dem Tropfen dann das gesamte Zellvolumen zur Verfügung steht. Diese

Formulierung hat zudem den Vorteil, dass der Auswertungsradius dieselbe Größenordnung wie die Gitterkantenlänge der Zelle besitzt. Damit wird ein Zugriff auf weit entfernte Zellen während des Interpolationsvorgangs vermieden.

Im nächsten Schritt galt es nun die Fähigkeit des neuen Verdunstungsmodells zu untersuchen, Tropfen-Tropfen Interaktionen zu berücksichtigen. Zu diesem Zweck wurden Simulationen zweier benachbarter Tropfen mit verschiedenen Abständen simuliert. Um den Einfluss des benachbarten Tropfens auf die Verdunstung zu charakterisieren, verwendeten Cossali et al. [Cos18] den Hemmungsfaktor als Bewertungskriterium. Dieser Hemmungsfaktor beschreibt die Verdunstungsrate eines Tropfens des Tropfentandems in Bezug auf die Verdunstungsrate eines identischen Einzeltropfens. Die Randbedingungen der Simulation wurden aus den Motorsimulationen aus AP 1.1 abgeleitet und sind in Tabelle 4 aufgelistet.

Tabelle 4: Randbedingungen der Simulationen zur Untersuchung der Tropfen-Tropfen Interaktion mit dem neuen Verdunstungsmodell.

Tropfendurchmesser	10 $\mu\text{m}$
Gitterkantenlänge	10 $\mu\text{m}$
Tropfenabstand	10 – 50 $\mu\text{m}$
Kraftstoff	Iso-Oktan
Tropfentemperatur	300 K
Gastemperatur	353 K
Umgebungsdruck	1 bar

Die Ergebnisse der Simulationen sind in Abbildung 18 dargestellt, wobei auf der linken Seite die Verläufe der normierten, quadrierten Tropfendurchmesser über der normierten Zeit und auf der rechten Seite die daraus abgeleiteten Hemmungsfaktoren als Funktion des Tropfenabstandes abgebildet sind. Wie zu erwarten war, verdunstet der Einzeltropfen am schnellsten. Für das Tropfentandem sinkt die Verdunstungsrate mit abnehmendem Tropfenabstand kontinuierlich ab. Die hieraus abgeleiteten Hemmungsfaktoren für die verschiedenen Tropfenabstände liegen leicht oberhalb der von Cossali et al. [Cos18] bestimmten Faktoren.

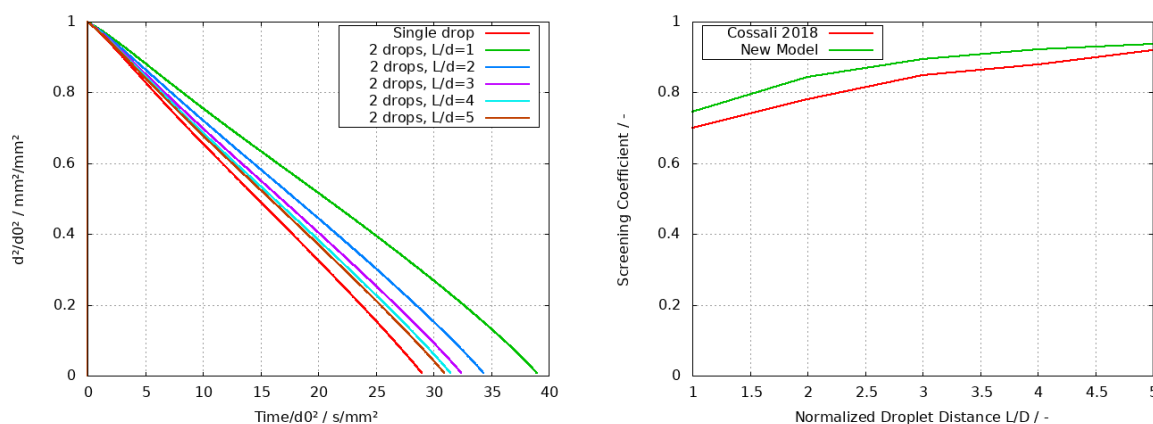


Abbildung 18: Links: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Tropfenabstände. Rechts: Verlauf des Hemmungsfaktors als Funktion des Tropfenabstands.

Zum Abschluss der Modellvalidierung wurde der in AP 1.4 untersuchte Fall des Spray G mit dem neuen Verdunstungsmodell simuliert und mit dem alten Modell verglichen. Die

Problematik bei dieser Konfiguration bestand in der Tatsache, dass der Tropfenzerfall die Gemischbildung in einem DI-Ottomotor stärker beeinflusst als die Verdunstung. Aus diesem Grund wurde auf den Einsatz von Tropfenzerfallsmodellen verzichtet und stattdessen die experimentell ermittelte Tropfengrößenverteilung direkt an der Düse aufgeprägt. Somit trug ausschließlich die Verdunstung zur Gemischbildung bei und die Unterschiede zwischen neuem und altem Modell konnten besser untersucht werden.

In dieser Konfiguration wurden jeweils drei verschiedene Gitterauflösungen für das neue und das alte Verdunstungsmodell betrachtet. Die Kantenlängen  $\Delta x$  entsprachen mit 0,165 mm, 0,413 mm und 0,825 mm dem 1-fachen, 2,5-fachen und 5-fachen des Düsenlochdurchmessers  $d$ . Als Vergleichsgröße wurde die aufsummierte verdunstete Masse betrachtet, welche in Abbildung 19 abgebildet ist.

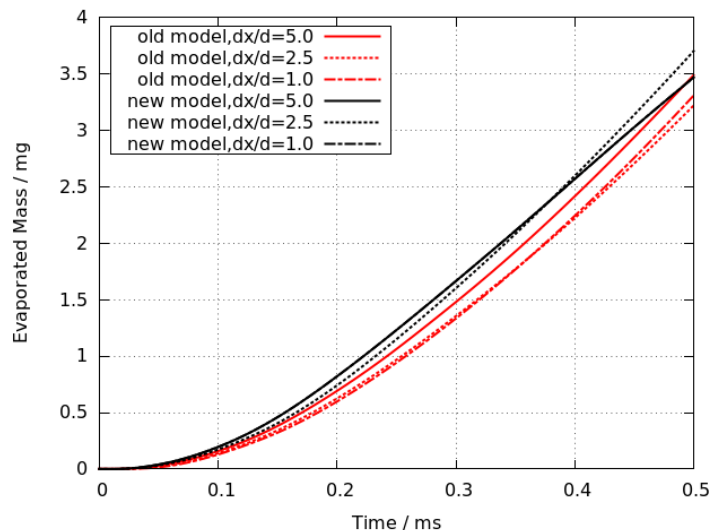


Abbildung 19: Verlauf der integrierten, verdunsteten Masse über der Zeit des Spray G für das neue und das alte Verdunstungsmodell für jeweils drei verschiedene Gitterauflösungen.

Das alte Verdunstungsmodell zeigt wie erwartet für feinere Gitter eine leicht reduzierte Verdunstungsrate, was sich mit den zuvor beschriebenen Sättigungseffekten erklären lässt. Das neue Verdunstungsmodell führt im Vergleich zum alten Modell zu einer beschleunigten Verdunstung und weist eine kleinere Gitterabhängigkeit auf.

Da es sich bei den vorliegenden Simulationen um LES Simulationen handelt, führt eine höhere Gitterauflösung auch zu einer besseren Auflösung der turbulenten Strukturen. Die aufgelösten Wirbelstrukturen erhöhen den Transport von verdunstetem Kraftstoff in noch ungesättigte Bereiche, wodurch die Verdunstung beschleunigt wird. Dieser Effekt tritt sowohl beim alten als auch beim neuen Verdunstungsmodell auf und überlagert den Effekt der beiden Verdunstungsmodelle.

Darüber hinaus muss festgestellt werden, dass durch die gewählte Konfiguration ohne Tropfenzerfallsmodelle die vorliegenden Tropfengrößen in einem Bereich von 1 bis 12  $\mu\text{m}$  liegen. Selbst wenn die größten Tropfen auf die Gitterkantenlänge des feinsten Gitters bezogen werden, erhält man immer noch ein Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnis von 13,75, was bereits für das ursprüngliche Modell zu guten Ergebnissen führte. Somit reduziert sich der Effekt des neuen Verdunstungsmodells auf die zusätzliche Berücksichtigung der Tropfen-Tropfen Interaktion.

Auch wenn die Unterschiede zwischen dem alten und dem neuen Verdunstungsmodell im Anwendungsfall der Strahl- und Gemischbildungssimulation nicht übermäßig groß

erscheinen mögen, so handelt es sich beim vorliegenden neuen Verdunstungsmodell trotzdem um eine signifikante Weiterentwicklung, welches nun gitterunabhängige Ergebnisse liefert und zudem in der Lage ist, Tropfen-Tropfen Interaktionen zu berücksichtigen.

**Forschungsstelle 2 (ITLR)**

**3.3 Direkte Numerische Simulationen und deren Validierung / Arbeitspakete 2 und 3**

Mithilfe von Direkten Numerischen Simulationen (DNS) unter Verwendung des in-house Programmpakets Free Surface 3D (FS3D) wurde in AP 2 das Geschehen innerhalb einer Rechenzelle detailliert simuliert. Das Rechengebiet der DNS entsprach somit einer/weniger Rechenzellen der LES oder RANS Rechnungen. Dabei wurden diese Rechenzellen mit mehreren Millionen Gitterzellen der DNS aufgelöst. Eine so hohe Auflösung ist nur möglich durch den Einsatz eines Supercomputers wie den des Höchstleistungsrechenzentrums Stuttgart (HLRS), ein Cray XC40 System namens „Hazel Hen“.

Das Ziel dieses Arbeitspakets war es, über die systematische Variation von Anfangs- und Randbedingungen herauszufinden, wie sehr sich die Tropfen gegenseitig in ihrer Verdunstung beeinflussen und wie dieser Einfluss modelliert werden kann. Das alte Verdunstungsmodell des Programmpakets FS3D lieferte für die hier betrachteten sehr großen Temperaturdifferenzen leider nur unzureichende Ergebnisse, welche auch dem Projektausschuss vorgestellt wurden. Der Vorschlag, ein verbessertes Modell einzubauen, auch wenn dies mit Zeitaufwand verbunden ist, wurde vom Projektausschuss einstimmig befürwortet. Alle daraus resultierenden Anpassungen des Arbeitspakets wurden ebenfalls mit dem Projektausschuss abgestimmt. Die Implementierung des neuen Verdunstungsmodells für die DNS erforderte außerdem eine erneute Validierung der Simulationen mit Daten aus der Literatur in AP 3.

**3.3.1 Tropfen mit schwacher Anströmung (AP 2.1)**

In AP 2.1 wurde das Verdunstungsverhalten von schwach angeströmten Tropfen untersucht. Kleine Tropfen haben sehr kurze Relaxationszeiten, bewegen sich daher oft mit der Strömung mit und erfahren folglich nur eine geringe bis keine Relativgeschwindigkeit zu ihrer Umgebung.

Die durchgeführten Simulationen umfassten unterschiedliche Parameter wie Tropfengröße und Umgebungstemperatur und analysierten die Verdunstungsvorgänge. Die in AP 1.1 bestimmten lokalen Verdunstungsbedingungen der Tropfen (s. Tabelle 2) wurden systematisch analysiert und die spezifischen Bedingungen für die DNS Rechnungen extrahiert. Der Tropfendurchmesser wurde auf  $11\mu\text{m}$  gesetzt; die Tropfentemperatur betrug in der LES überwiegend  $380\text{K}$ , weshalb diese Temperatur auch für die DNS gewählt wurde. Eine Analyse der Weber-Zahlen ergab, dass diese durchweg sehr klein waren. Daher wurden alle DNS Rechnungen mit einer Weber-Zahl von  $We=1$  durchgeführt. Insgesamt wurden drei zu untersuchende Rechenfälle ausgewählt, diese sind in Tabelle 5 zu finden.

*Tabelle 5: Gewählte Parameterkombinationen der DNS: Variation der Gastemperatur  $T_{gas}$  und des Kraftstoffmassenbruchs in der Anströmung  $Y_{v,inflow}$  mit dazugehöriger Anströmgeschwindigkeit  $u_{inflow}$ , Tropfen-Reynolds-Zahl  $\Re$  und Schmidt-Zahl  $Sc$ .*

Rechenfall	$T_{gas}$	$Y_{v,inflow}$	$u_{inflow}$	$\Re$	$Sc$
A	470 K	0.0	15.55 m/s	29.4	3.08
B	470 K	0.18	15.55 m/s	29.4	3.08
C	560 K	0.0	16.97 m/s	23.8	3.47

Auf Basis dieser Parameter wurden erste DNS Rechnungen unter Motorbedingungen durchgeführt. Bei den Rechnungen traten jedoch schnell Stabilitätsprobleme auf, die sich vor allem durch unphysikalische Verformungen des Tropfens deutlich machten. Die Entstehung dieser Probleme ließ sich aufgrund der hohen Umgebungstemperatur und der hohen absoluten Verdunstungsraten auf die Teile im Programmpaket zurückführen, in denen der Phasenübergang stattfindet.

Um den Verdunstungsprozess auch unter diesen Umgebungsbedingungen simulieren zu können, war die Implementierung eines neuen Verdunstungsmodells in das institutseigene Programmpaket FS3D notwendig. In dem neuen Verfahren werden zwei getrennte Temperaturfelder für die flüssige und die gasförmige Phase gelöst (2-Skalar-Ansatz). Dies ist hauptsächlich dort relevant, wo beide Phasen in einer Zelle vorliegen. Hier gab es bisher nur eine gemittelte Zelltemperatur, nun existieren innerhalb der Zelle zusätzlich noch Werte für die jeweilige Phase. Außerdem wird nun auch noch eine Grenzflächen-Temperatur bestimmt.

Im Code wurde jedoch nicht nur die Methode zur Lösung der Energiegleichung verändert, sondern auch die Berechnung des eigentlichen Phasenübergangs: Bisher wurde in jeder Oberflächenzelle das Volumen der verdunsteten Flüssigkeit bestimmt. Die Problematik lag hierbei vor allem in Zellen, in denen mehr Volumen verdunstete als Flüssigkeit vorhanden war. Dadurch ergaben sich Überschneidungen mit Nachbarzellen, was wiederum zu Instabilitäten führen konnte.

Im neuen Modell wird über ein vollimplizites Zeitintegrationsschema die Geschwindigkeit der Tropfenoberfläche bestimmt, mit der sie sich aufgrund der Verdunstung verändert. Dabei wird die oben erwähnte Oberflächentemperatur genutzt und über die Energiegleichung in das Modell eingebracht. Die so berechnete Oberflächengeschwindigkeit wird dann wiederum mit den üblichen Advektionsschritten der Flüssigkeit aufgeprägt. Das bedeutet, dass die Bewegung der Oberfläche aufgrund von Verdunstung nun als die Folge eines Flusses interpretiert wird und nicht wie bisher als die Folge einer Massenquelle.

Die in Tabelle 5 aufgeführten Rechenfälle konnten nach Abschluss der Implementierung des neuen Verdunstungsmodells erfolgreich durchgeführt werden. Der Vergleich der Rechenergebnisse mit experimentellen Daten trug dadurch auch zur Validierung des neuen Modells bei. Der Tropfen wurde jeweils im Zentrum des Rechengebiets initialisiert und mit 26 Zellen aufgelöst. Insgesamt wurde das Gebiet in jeder Raumrichtung mit 128 Zellen aufgelöst, wie in Abbildung 20 dargestellt. Auf einer Seite wurde eine gleichmäßige Einströmrandbedingung aufgeprägt. Hier strömt Stickstoff ein. Auf der gegenüberliegenden Seite wurde eine kontinuierliche Randbedingung verwendet. Auf den übrigen Seitenflächen wurden reibungsfreie Wände initialisiert.



### 3 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse im Projekt

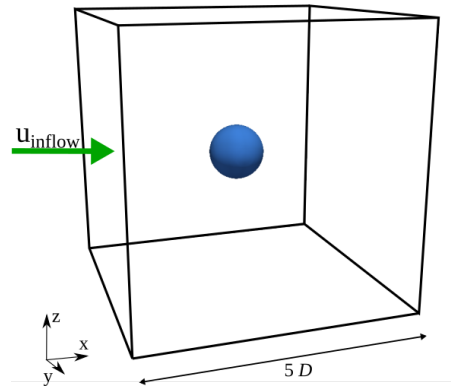


Abbildung 20: Rechengebiet der DNS. Gleichseitiger Würfel mit einer Kantenlänge von  $5D$  und einer Auflösung von insgesamt  $128^3$  Zellen.

Abbildung 21 zeigt exemplarisch die Temperaturverteilung für Rechenfall A in der Mitte des Rechengebiets. Zunächst wurde der zeitliche Verlauf integraler Größen betrachtet, wie die gemittelte Oberflächen- und die gemittelte Tropfentemperatur, die in Abbildung 22 dargestellt sind.

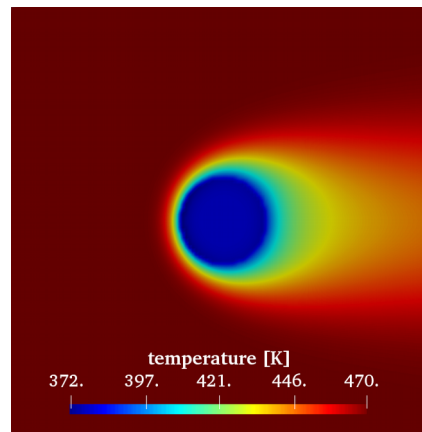


Abbildung 21: Temperaturverteilung im Mittelschnitt des Rechengebiets (Fall A).

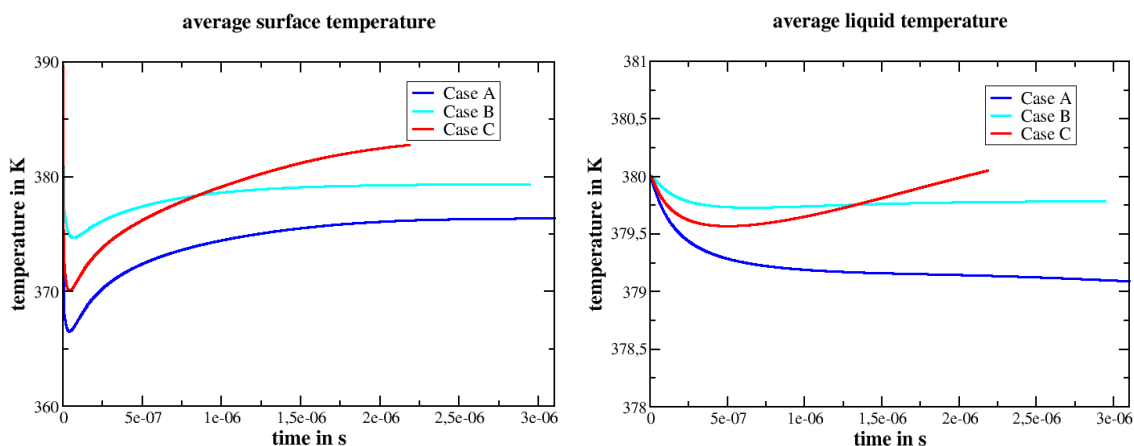


Abbildung 22: Zeitlicher Verlauf der gemittelten Oberflächentemperatur (links) und der gemittelten Tropfentemperatur (rechts) für alle drei Rechenfälle.

Die gemittelte Oberflächentemperatur zeigt für alle drei Rechenfälle zu Beginn der Simulation einen eindeutigen Abfall, bevor sie im Lauf der Zeit wieder ansteigt. Dieser

Temperaturabfall entsteht dadurch, dass der Tropfen in einer (fast) trockenen Umgebung initialisiert wird. Daher ist der Gradient des Kraftstoffmassenbruchs an der Oberfläche zu Beginn der Simulation sehr groß, was zu einer sehr hohen anfänglichen Verdunstungsrate führt. Bei der Verdunstung wird Energie in Form von Verdunstungsenthalpie benötigt. Ist die Verdunstungsrate also hoch, so wird auch dementsprechend viel Energie aus der unmittelbaren Umgebung benötigt und die Oberflächentemperatur sinkt. Da sich nun aber gasförmiger Kraftstoff in Oberflächennähe befindet, sinkt der Gradient des Kraftstoffmassenbruchs mit der Zeit wieder ab und damit auch die Verdunstungsrate. Zusammen mit der Energie, die dem Tropfen durch Wärmeleitung aus der heißen Umgebung zugeführt wird, steigt daraufhin die Oberflächentemperatur wieder an. Bei einem Vergleich der Rechenfälle A und B zeigt sich der Einfluss des zu Beginn in der Umgebung vorliegenden Kraftstoffs. Dadurch, dass in Fall B bereits gasförmiger Kraftstoff vorliegt, sinkt die Oberflächentemperatur am Anfang weniger stark ab.

Während sich in den Rechenfällen A und B relativ schnell eine fast stationäre Oberflächentemperatur einstellt, steigt sie für Fall C über die ursprüngliche Tropfentemperatur hinaus an. Dies wird auch deutlich bei Betrachtung der gemittelten Tropfentemperatur in Abbildung 22 (rechts). Für die niedrigere Gastemperatur (Fälle A und B) stellt sich relativ schnell ein Gleichgewicht aus abgeführter Verdunstungsenthalpie und zugeführter Wärme ein, während bei der höheren Gastemperatur (Fall C) über die gesamte Rechenzeit der Einfluss der Wärmeleitung aus der Umgebung überwiegt und die Tropfentemperatur ansteigen lässt.

Zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten und Korrelationen aus der Literatur wurde die Sherwood-Zahl herangezogen,  $Sh = \frac{\beta D}{D_{bin}}$ . Abbildung 23 zeigt den zeitlichen Verlauf für alle drei Rechenfälle. Wie man an Abbildung 23 erkennt, stellt sich recht schnell eine stationäre Sherwood-Zahl ein. Außerdem ist erkennbar, dass der Kraftstoffmassenbruch der Anströmung keinen Einfluss auf die Sherwood-Zahl hat. Dies liegt darin begründet, dass die Sherwood-Zahl die vorherrschende Sättigung bereits berücksichtigt.

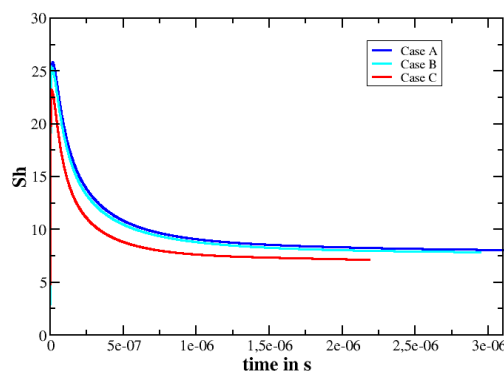


Abbildung 23: Zeitlicher Verlauf der Sherwood-Zahl für alle drei Rechenfälle.

Die stationären Sherwood-Zahlen wurden nun mit Werten aus der Literatur verglichen. Eine weit verbreitete Korrelation zur Vorhersage von Sherwood-Zahlen für die vorliegende Geometrie ist dabei die von Ranz und Marshall [Ran52a]

$$Sh = 2 + 0,6 Re^{1/2} Sc^{1/3}, \quad (16)$$

welche auf Basis ihrer eigenen Experimente [Ran52b] erstellt wurde. Etwas neuer ist die Korrelation von Kulmala und Vesala [Kul95], die auf Experimenten von Schwarz und Smolik [Sch94] basiert:

$$Sh = 2,009 + 0,514 Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (17)$$

Der Vergleich der numerischen Daten mit beiden Korrelationen und den neueren experimentellen Daten nach Schwarz und Smolik [Sch94] ist in Abbildung 24 dargestellt. Man sieht, dass die Sherwood-Zahlen der FS3D Simulationen allesamt über der Korrelation von Ranz und Marshall liegen. Dies liegt an den vergleichsweise hohen Verdunstungsraten bei den betrachteten Umgebungsbedingungen.

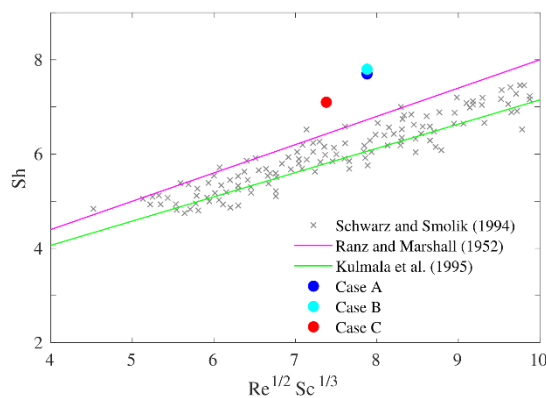


Abbildung 24: Vergleich der Sherwood-Zahlen aus den numerischen Simulationen mit experimentellen Daten und Korrelationen.

Für höhere Verdunstungsraten wird der Einfluss des Stefanstroms auf die Grenzschicht und damit auch auf die Sherwood-Zahl immer größer. Dieser Einfluss ist in den beiden Korrelationen nach Gleichungen (16) und (17) nicht berücksichtigt. Man muss stattdessen diesen Einfluss zusätzlich berücksichtigen. Dies wird in der Korrelation von Renksizbulut [Ren91]

$$Sh(1+B_M)^{0,7} = 2 + 0,87 Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (18)$$

durch den Faktor  $(1+B_M)$  gemacht. Die Reynolds-Zahl wird hierbei aus einer Mischung aus Film- und Freistrombedingungen berechnet. Vergleicht man die numerischen Ergebnisse aus FS3D mit dieser Korrelation, so liegen alle drei Fälle unterhalb der Korrelation (s. Abbildung 25). Dieses Verhalten lässt darauf schließen, dass die untersuchten Fälle in einem Übergangsbereich zwischen niedrigen und hohen Verdunstungsbedingungen liegen. Allerdings soll angemerkt sein, dass die Übereinstimmung zwischen Experiment/Korrelation und DNS in Abbildung 25 schon sehr gut ist, besonders wenn man die Streuung in den Messdaten betrachtet.

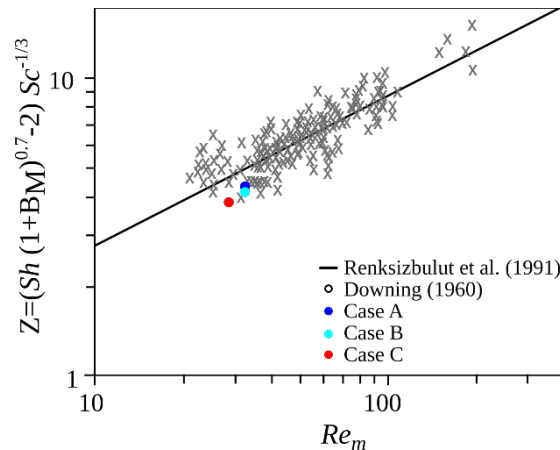


Abbildung 25: Vergleich der Simulationsergebnisse mit der Korrelation von Renksizbulut et al. Experimentelle Daten extrahiert aus [Ren91].

### 3.3.2 Einfluss von Nachbartropfen-Interaktion (AP 2.2)

In AP 2.2 wurde der Einfluss von Nachbartropfen untersucht. Befinden sich Tropfen in enger Nachbarschaft, so wie es zum Beispiel in einem dichten Spray der Fall ist, so beeinflussen sie sich gegenseitig in ihrem Verhalten, wie zum Beispiel der Verdunstung. Castanet et al. [Cas16] untersuchten in Experimenten das Verdunstungsverhalten von Tropfentandems mit verschiedenen Abständen. War der Abstand der Tropfenmittelpunkte kleiner als  $8D$ , so wurde der gegenseitige Einfluss relevant.

Im Rahmen des vorliegenden Projekts wurde dieser Einfluss beispielhaft an einem Tandem von Wassertropfen untersucht. Die Tropfen wurden in einer ruhenden Umgebung initialisiert (Luft) mit einer Temperatur von  $293\text{K}$  initialisiert. Die Tropfenmittelpunkte hatten dabei einen Abstand von  $2D$ . In Abbildung 26 ist die Dampf- und Temperaturverteilung des Tropfentandems im Mittelschnitt des Rechengebiets zum Zeitpunkt  $t=3.35899\text{ms}$  zu sehen.

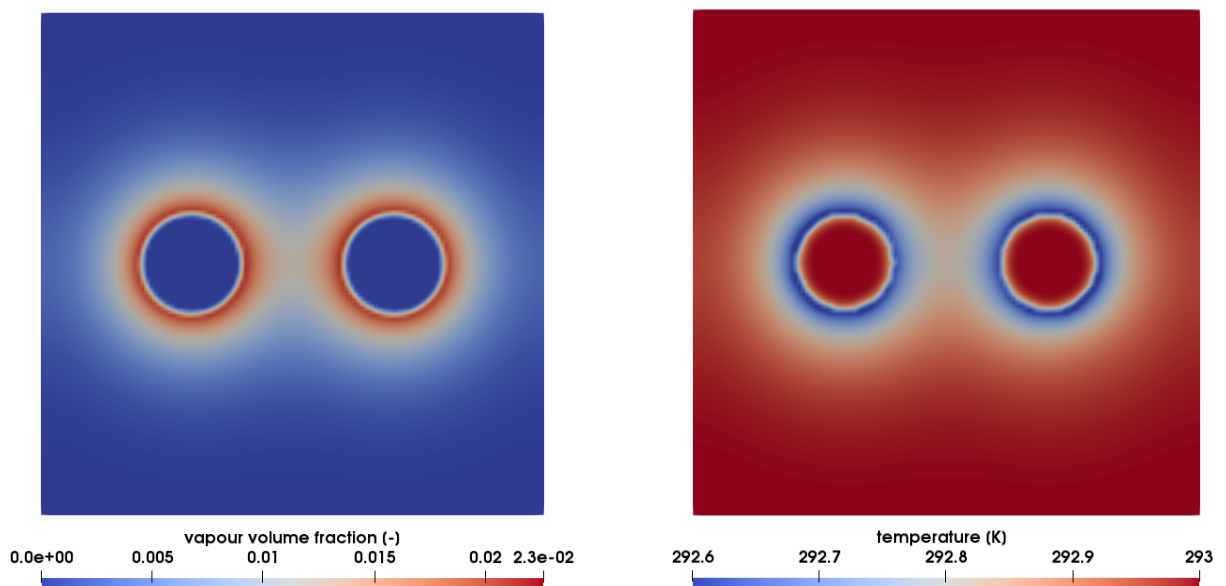


Abbildung 26: Dampf- (links) und Temperaturverteilung (rechts) im Mittelschnitt des Rechengebiets.

Beide Tropfen haben einen Anfangsdurchmesser von  $D=6 \times 10^{-4}\text{m}$ . Das Rechengebiet hatte eine Größe von  $5D \times 5D \times 5D$  mit einer Auflösung von  $128 \times 128 \times 128$  Zellen.

Sowohl das Dampf- als auch das Temperaturfeld in Abbildung 26 zeigen die erwartete Symmetrie des Rechenfalls. Obwohl die Simulation mit isothermen Anfangsbedingungen gestartet wurde (die Umgebungsluft hatte ebenfalls eine Temperatur von 293 K), kann an der Tropfenoberfläche ein Temperaturabfall festgestellt werden. Dieser Abfall lässt sich auf die benötigte Verdunstungsenthalpie zurückführen, die für den Phasenübergang benötigt wird. Noch deutlicher zu sehen ist dies in Abbildung 27, in der die Dampf- und Temperaturverläufe entlang der Mittellinie des Rechengebiets dargestellt sind.

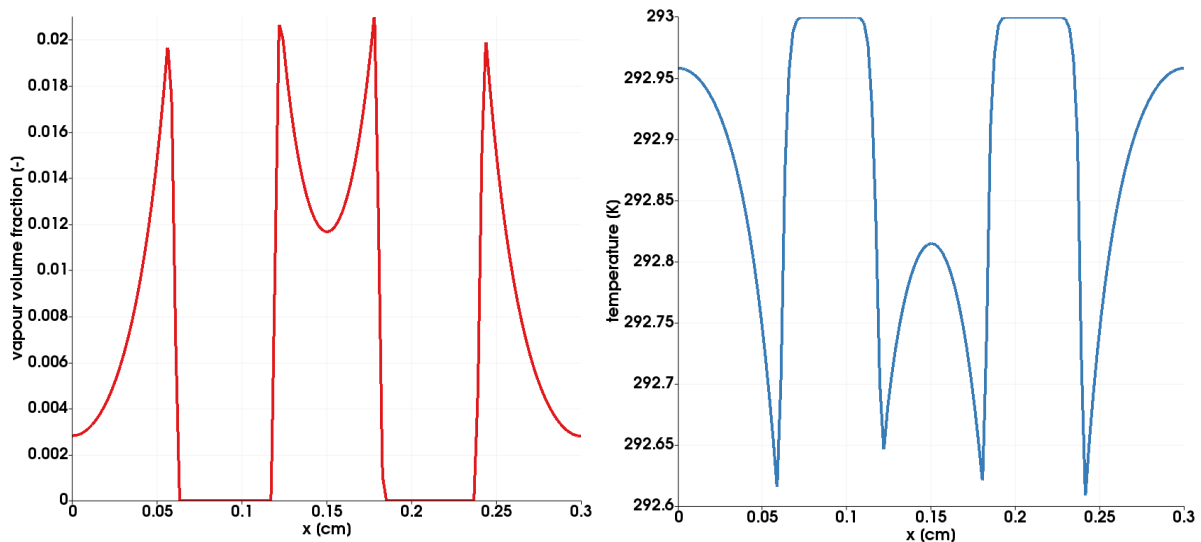


Abbildung 27: Dampf- (links) und Temperaturverteilung (rechts) entlang der Mittellinie des Rechengebiets.

Die Anwesenheit eines zweiten Tropfens in unmittelbarer Nähe hat einen eindeutigen Einfluss sowohl auf das Dampf- als auch das Temperaturprofil. Die absolute Verdunstungsrate des Tropfentandems ist geringer als die Summe zweier einzelner, verdunstender Tropfen. Zwischen den Tropfen sammelt sich Dampf an und kann nicht so einfach in die Umgebung diffundieren. Dadurch sinken der Gradient des Dampfmassenanteils und damit ebenfalls die Verdunstungsrate jedes Tropfens. Außerdem kühlt sich die Umgebungsluft zwischen den beiden Tropfen aufgrund der zur Verdunstung notwendigen Wärme ab, was zu einer weiteren Verminderung der Verdunstungsrate führt.

Die numerischen Ergebnisse des verdunstenden Tropfentandems wurden anschließend noch mit dem analytischen Modell von Cossali und Tonini [Cos18] verglichen (s. Abschnitt 3.2). Die Autoren entwickelten in einem analytischen Ansatz eine einfache Abschätzung dieses Einflusses in Form eines Hemmungsfaktors  $\phi$ , welcher für identische Tropfen (gleiche Größe und Temperatur) nur vom Abstand der Tropfenmittelpunkte abhängt. Für den hier vorgestellten Tropfenabstand von  $2D$  ergibt das analytische Modell einen Hemmungsfaktor von  $\phi_{analytical} = 80.48\%$ , während die DNS zu einem Ergebnis von  $\phi_{DNS} = 92.98\%$  kommt. Ähnlich wie die in Abbildung 18 in Abschnitt 3.2 vorgestellten Ergebnisse, liegt auch hier die Numerik über dem analytischen Modell, d.h. die Beeinflussung ist in der Numerik weniger stark ausgeprägt. Dies liegt höchstwahrscheinlich an den Approximationen, die in das analytische Modell nach Cossali und Tonini [Cos18] eingehen.

#### 3.3.3 Effekte der Anströmung (AP 2.3)

In AP 2.3 sollten die Effekte der Anströmung genauer untersucht werden. Dafür wurde eine Simulation mit zwei Tropfen hintereinander in der Strömung durchgeführt. Dieses Setup

entspricht quasi einem fallenden Tropfentandem. Da dies ebenfalls für das FVV Projekt „Motorische Verdampfung von Biokraftstoffen“ relevant war, wurden die Simulationen bei den dort im Experiment vorherrschenden Bedingungen durchgeführt. Die Bedingungen sind in Tabelle 6 zusammengefasst.

Tabelle 6: Umgebungsbedingungen für die Simulation eines fallenden Tropfentandems.

Tropfendurchmesser	$D=0,84$ mm
Abstand der Tropfenmittelpunkte	$\Delta D=1,95$ mm
Dimensionsloser Tropfenabstand	$\kappa=2,32$
Anströmgeschwindigkeit	$u_{inflow}=1,32$ m/s
Tropfentemperatur	$T_f=295$ K
Gastemperatur	$T_g=295$ K
Tropfen	Ethanol
Gas	Luft

Das Ziel dieser Simulation war es unter anderem zu untersuchen, ob die Tropfenkette im Experiment als Reihe von Einzeltropfen betrachtet werden kann, oder ob der vorausfallende Tropfen den Verdunstungsprozess des hinteren Tropfens stark beeinflusst. In Abbildung 28 ist die Geschwindigkeitsverteilung entlang der Mittellinie dargestellt. Die Geschwindigkeit sinkt vor dem ersten Tropfen zum Staupunkt hin auf null ab. Nach dem zweiten Tropfen steigt sie wieder an, erreicht aufgrund des begrenzten Rechengebiets aber noch nicht wieder ganz ihren ursprünglichen Wert. Zwischen den beiden Tropfen sieht es bei der reinen Betrachtung der absoluten Geschwindigkeitswerte so aus, als würde die Geschwindigkeit hier ebenfalls wieder ansteigen. Tatsächlich liegt hier aber ein Rückströmgebiet vor, d.h. der hintere Tropfen erfährt ein deutlich anderes Geschwindigkeitsprofil als der erste Tropfen.

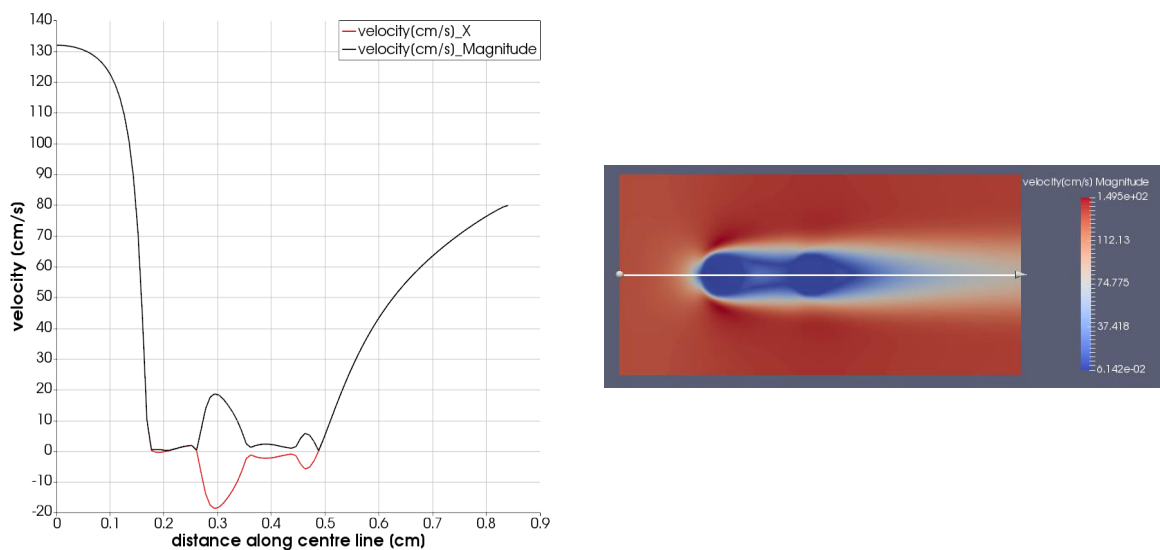


Abbildung 28: Geschwindigkeitsverteilung entlang der Mittellinie (links) und im Mittelschnitt des Rechengebiets (rechts).

Betrachtet man die Dampfverteilung, wie sie in Abbildung 29 zu sehen ist, so ist deutlich zu erkennen, wie sich die Tropfen beeinflussen: Die Anströmung, die der hintere Tropfen im Nachlauf erfährt, ist bereits mit dem verdunsteten Kraftstoff des vorderen Tropfens angereichert. Dadurch ist der Dampfgehalt der Strömung bereits höher und die Verdunstungsrate des Tropfens im Nachlauf sinkt.

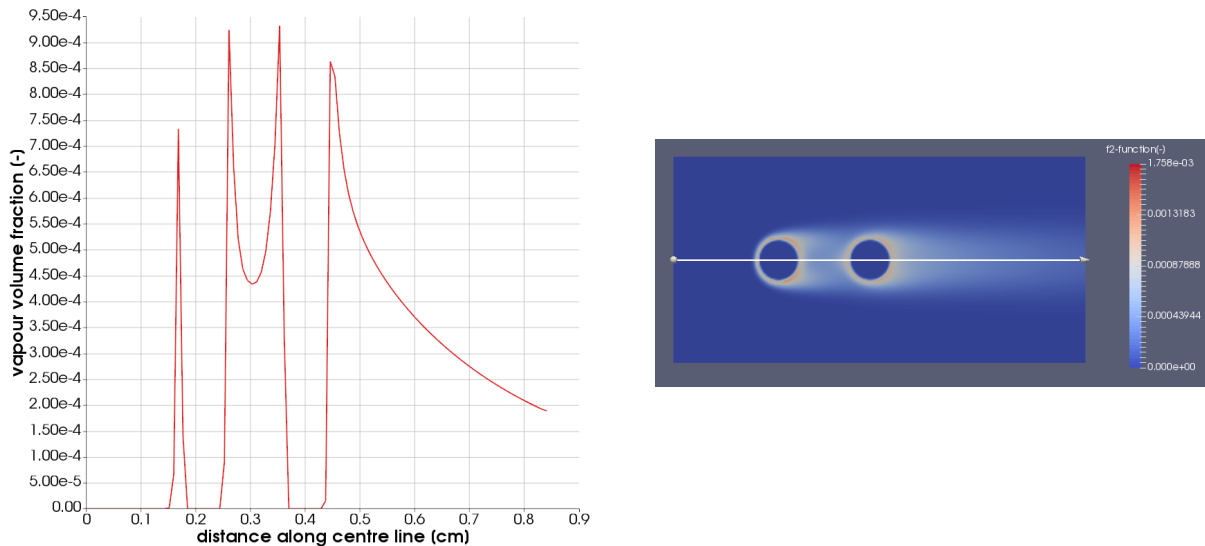


Abbildung 29: Dampfverteilung entlang der Mittellinie (links) und im Mittelschnitt des Rechengebiets (rechts).

#### 3.3.4 Tropfenoszillationen (AP 2.4)

Aufgrund des Tropfenzerfalls zu Beginn des Einspritzprozesses haben die vorliegenden Tropfen im Spray zunächst oft keine sphärische Kugelform, sondern sind verformt. Die dadurch entstehenden Oszillationen wurden mithilfe der DNS genauer untersucht. Bei der Validierung von Simulationsergebnissen mit analytischen Modellen wird dabei häufig nur auf den Vergleich geometrischer Tropfeneigenschaften wie die Länge der Halbachsen, die Größe der Tropfenoberfläche, deren Schwingungsamplitude und -frequenz zurückgegriffen. In Anbetracht der Menge der zur Verfügung stehenden Daten scheinen diese Vergleiche jedoch nicht alle Möglichkeiten auszunutzen. Durch Spektralzerlegung in Legendre-Polynome können zum Beispiel analytische Modelle die Dämpfung der Amplitude und die Schwingungsperiode für verschiedene Schwingungsmoden vorhersagen. Diese Methode wurde nun auch auf die numerischen Ergebnisse angewandt, um einen tiefergehenden Vergleich von Simulation und Analytik zu ermöglichen. Für die Auswertung wurde zu jedem Zeitschritt der Simulation in jeder Oberflächenzelle der Abstand des Flächenschwerpunkts zum Massenschwerpunkt des Tropfens bestimmt. Anschließend wurde eine Spektralzerlegung der so ermittelten Radien mit Legendre-Polynomen der ersten Art durchgeführt:

$$R(\eta^i) = \sum_{k=0}^{\infty} A_k P_k(\eta^i) \quad (19)$$

$i=1,2,3,\dots,N$  Anzahl FS3D Datenpunkte;  $k=0,1,2,\dots,M$  Anzahl der Moden;  $A_k$  Koeffizienten

Dabei wurde die Methode der kleinsten Quadrate genutzt, um die numerische Lösung dann in Bezug auf die Koeffizienten  $A_k$  anzunähern. Dies führt zu einem linearen Gleichungssystem, welches für jeden Zeitschritt gelöst werden muss.

Zunächst wurde die zeitliche Entwicklung der Koeffizienten  $A_k$  betrachtet (s. Abbildung 30). Die nullte Mode  $A_0$  konvergiert sehr schnell zum Radius einer volumengleichen Kugel. Die erste Mode  $A_1$  beschreibt das Schwingungsverhalten des Massenschwerpunkts und ist damit im vorliegenden Fall null. Am Verlauf des Koeffizienten  $A_2$  ist klar das Dämpfungsverhalten über der Zeit zu erkennen. Die weiteren Moden sind um mehrere Größenordnungen kleiner.

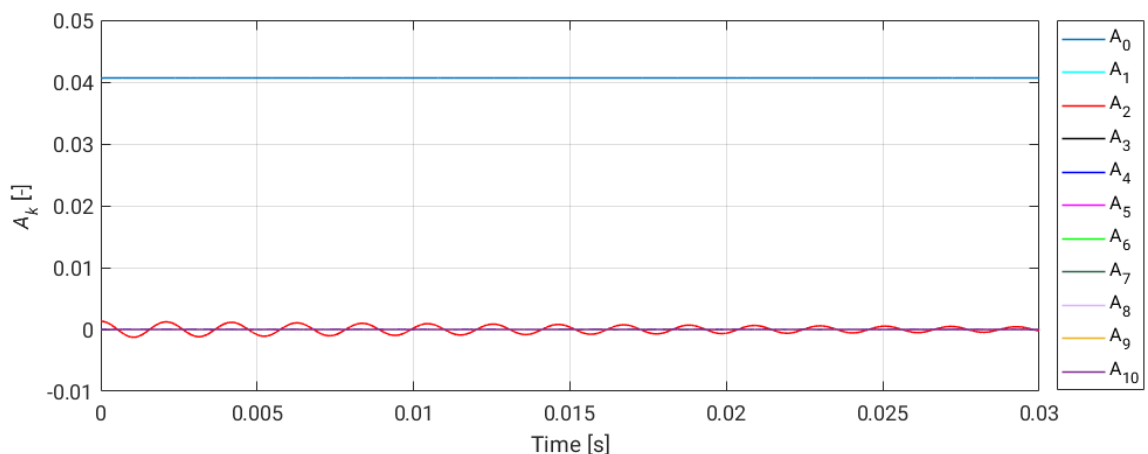


Abbildung 30: Entwicklung der Koeffizienten  $A_k$  über der Zeit

Als nächstes wurde der Einfluss der anfänglichen Auslenkung aus der Kugelform auf die verschiedenen Moden untersucht. Abbildung 31 zeigt das Schwingungsverhalten der ersten drei geraden Moden für vier verschiedene Auslenkungen ( 1%, 5%, 20%, 40% ). Die Amplituden der ungeraden Moden sind alle vernachlässigbar klein. Die zweite Mode  $A_2$  beschreibt die Form des Tropfens: Im Maximum hat der Tropfen eine prolate Form, im Minimum eine oblate Form. Im Nulldurchgang hat der Tropfen gerade eine sphärische Kugelform. Die vierte Mode  $A_4$  ist um eine Größenordnung kleiner und wird erst mit sehr hohen Anfangsauslenkungen (40%) relevant.

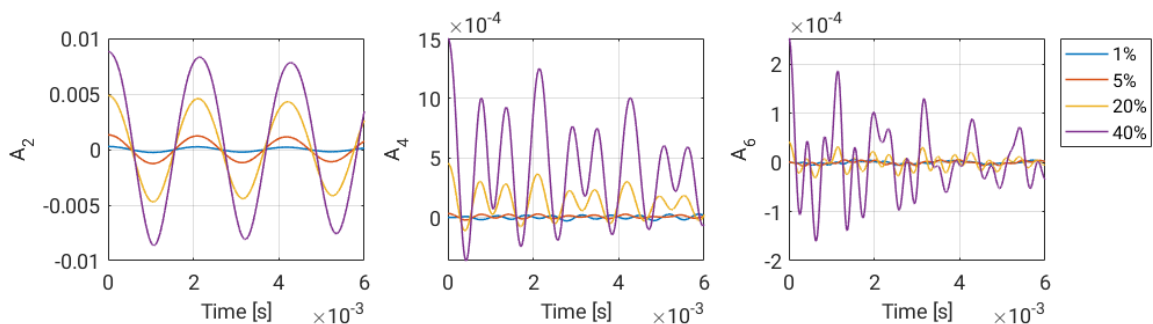


Abbildung 31: Zeitlicher Verlauf der ersten drei geraden Moden  $A_2$ ,  $A_4$  und  $A_6$  für vier verschiedene anfängliche Auslenkungen aus der Kugelform von 1%, 5%, 20% und 40% .

Abschließend wurden mittels einer Fast Fourier Transformation (FFT) die Schwingungsfrequenzen der ersten sechs Moden für eine Auslenkung von 5% ausgewertet und mit den analytischen Modellen von Lamb [Lam32] und Prosperetti [Pro80]



### 3 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse im Projekt

---

verglichen. Die Ergebnisse in Tabelle 7 zeigen eine sehr gute Übereinstimmung zwischen der DNS und den Literaturwerten.

*Tabelle 7: Schwingungsfrequenzen der ersten sechs Moden für eine anfängliche Auslenkung von . Vergleich der DNS Ergebnisse mit analytischen Modellen.*

	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$A_5$	$A_6$
DNS [Hz]	471.2	911.1	1421	1979	2608
Lamb [Hz]	468.8	907.8	1407	1961	2568
Prosperetti [Hz]	468.6	907.5	1406	1960	2567
$\Delta F_{DNS/Lamb}$ [%]	0.51	0.37	0.99	0.99	1.55
$\Delta F_{DNS/Prosp}$ [%]	0.55	0.40	1.07	0.97	1.60

### 3.4 Aufbereitung der Daten und Mittelungen / Arbeitspaket 4.1

Aus den DNS Rechnungen, die in AP 2 durchgeführt und AP 3 validiert wurden, sollten nun in AP 4.1 allgemeingültige Gesetzmäßigkeiten ermittelt werden, die in AP 4.2 zur Modellbildung verwendet werden können. Das Ziel war es, die Temperatur- und Dampfprofile in der unmittelbaren Nähe der Tropfenoberfläche durch eine geeignete Kurvenanpassung, die aus der Physik des Problems motiviert ist, zu parametrisieren. Als Ansatz diente hierfür die Gaußsche Fehlerfunktion in folgender Form:

$$\Theta(\xi) = C_1 + C_2 \operatorname{erf} \left( \frac{\xi}{\sqrt{3}} \right) \quad (20)$$

Die Variable  $\xi$  beschreibt dabei den Abstand zur Tropfenoberfläche. Dieser Ansatz lässt sich auf die Lösung für eine instationäre eindimensionale Wärmeleitung einer halbumendlichen Platte zurückführen. Er wurde bereits von Ma und Bothe [Ma13] zur Subgridmodellierung des Temperaturprofils bei anderen Problemen verwendet und führte dort zu sehr guten Ergebnissen.

In einem ersten Schritt galt es zu überprüfen, ob der Fehlerfunktions-Ansatz generell für die in diesem Projekt untersuchten Verdunstungsbedingungen in der Lage ist, die Dampf- und Temperaturprofile zu beschreiben. Die Koeffizienten  $C_{1-3}$  wurden dafür mit der Methode der kleinsten Quadrate bestimmt. Abbildung 32 zeigt die Kurvenanpassungen für alle drei der in AP 2.1 vorgestellten Rechenfälle A, B und C. Ausgewertet wurde zunächst nur der Verlauf entlang einer Zellreihe quer zur Strömung in der Mittelebene des Rechengebiets.



Abbildung 32: Dampf- (links) und Temperaturprofile (rechts) entlang einer Zellreihe quer zur Strömung in der Mittelebene des Rechengebiets. Die Symbole repräsentieren jeweils die DNS Daten, die durchgezogene Linie jeweils die Kurvenanpassung mithilfe des Fehlerfunktions-Ansatzes.

Um allgemeingültigere Aussagen treffen zu können wurden die Ergebnisse der DNS im Anschluss dimensionslos dargestellt. Dazu wurde der Abstand zur Tropfenoberfläche so mit dem Radius normiert, dass  $\xi=0$  an der Oberfläche gilt. Außerdem wurden sowohl die Temperatur- als auch der Dampfwert mit der Differenz des jeweils ersten und letzten Werts in der Reihe (also dem Wert an der Oberfläche und dem in der Umgebung) normiert:

$$\Theta_v = \frac{f_2 - f_{2,\infty}}{f_{2,s} - f_{2,\infty}}, \Theta_T = \frac{T - T_\infty}{T_s - T_\infty} \quad (21,22)$$

Durch diese Normierung wurden sowohl für den Dampf- als auch den Temperaturverlauf alle drei Rechenfälle selbstähnlich und konnten mit einer einzelnen Kurvenanpassung angenähert werden, wie in Abbildung 33 zu sehen ist.



### 3 Durchgeführte Arbeiten und Ergebnisse im Projekt

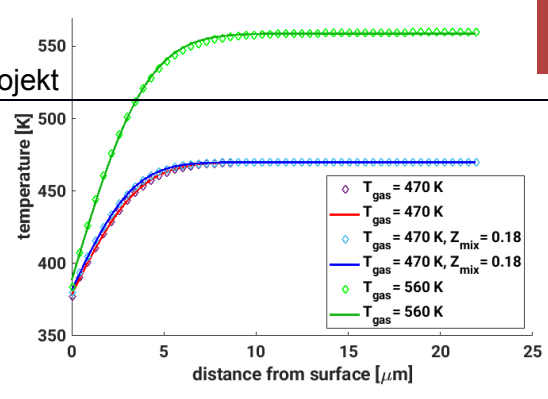
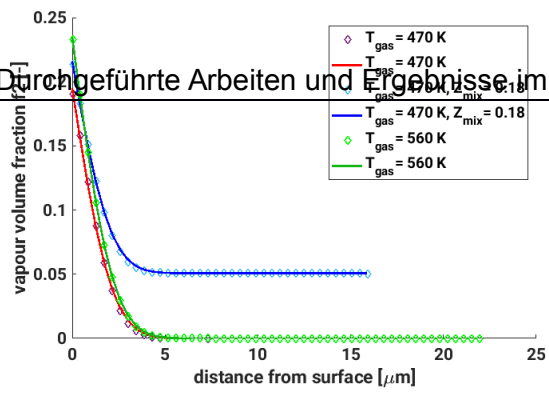


Abbildung 33: Normierte Dampf- (links) und Temperaturprofile (rechts) in einer Zellreihe quer zur Strömung in der Mittelebene des Rechengebiets. Die Symbole repräsentieren jeweils die DNS Daten, die durchgezogene Linie jeweils die Kurvenanpassung mithilfe des Fehlerfunktions-Ansatzes.

Durch die Anströmung sind sowohl das Dampf- als auch das Temperaturfeld um den Tropfen jeweils sehr richtungsabhängig. Zur einfacheren Implementierung im später genutzten Lagrange'schen Verdunstungsmodell wurde nun noch eine Umfangsmittelung der Dampf- und Temperaturprofile durchgeführt. Dazu wurde in jeder Zelle der Abstand zur Oberfläche bestimmt und das dadurch entstandene Profil wieder mit dem Fehlerfunktions-Ansatz angenähert. Für ein besseres Ergebnis der Kurvenanpassung, und um die Datenmenge zu reduzieren (und das Verfahren damit zu beschleunigen), wurde das umfangsgemittelte Profil vor der Näherung noch geglättet. Dabei wurden über Zellen mit einem sehr ähnlichen Radius gemittelt. Wie in Abbildung 34 beispielhaft für das Dampfprofil von Rechenfall A gezeigt, scheint dabei eine Mittelung über einen Radius von  $\Delta r = 0,1 \mu\text{m}$ , also 2 % des Tropfenradius, am besten für die Glättung geeignet. Eine gröbere Mittelung mit größerem  $\Delta r$  verfälscht das Profil und führt vor allem im tropfennahen Bereich zu einer Verschiebung. Ein kleineres  $\Delta r$  führt weder zu dem gewünschten Glättungseffekt noch zu einer signifikanten Reduktion der Datenmenge.

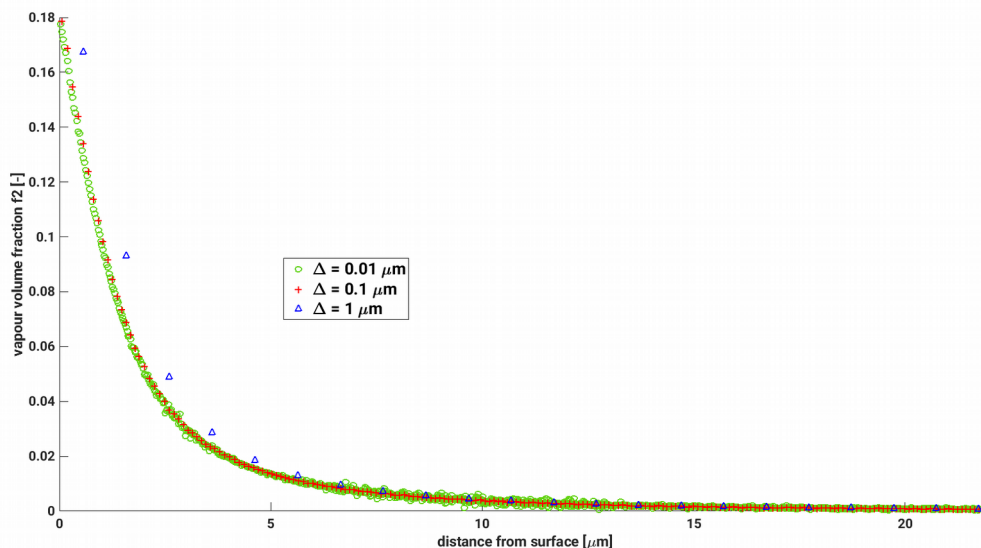


Abbildung 34: Einfluss des  $\Delta r$  der Glättung auf den Verlauf des Dampfprofils für Rechenfall A.

Abbildung 35 zeigt die umfangsgemittelten Dampf- und Temperaturprofile für alle drei Rechenfälle in dimensionsloser Form. Es ist klar zu sehen, dass die gewählte Normierung in der Lage ist, alle drei Rechenfälle mit einer einzigen Kurve zu nähern. Sie ist folglich unabhängig von der vorliegenden Umgebungstemperatur und des Kraftstoffmassengehalts der Umgebung.

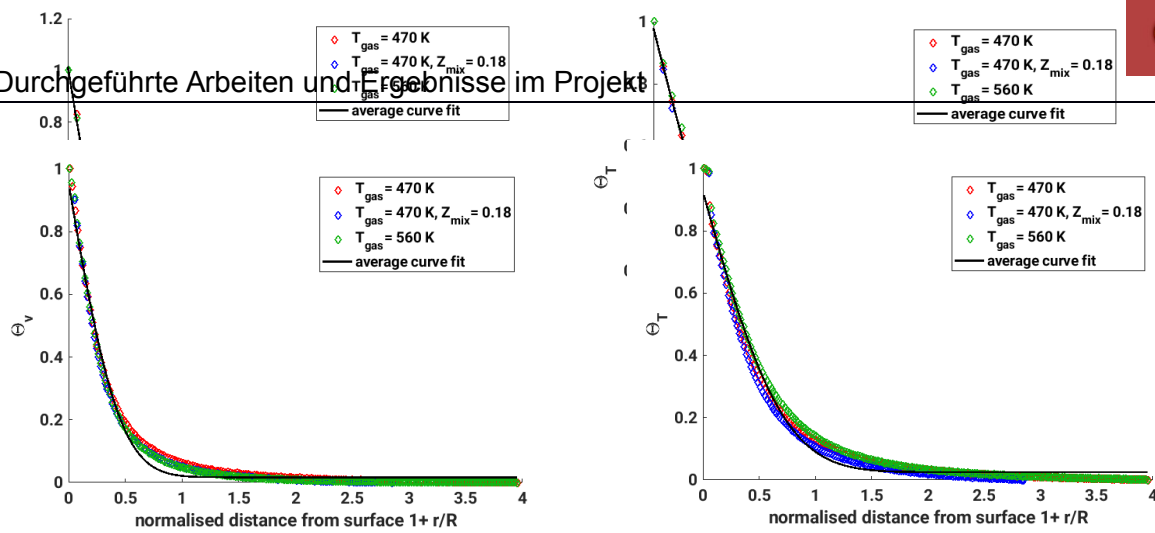


Abbildung 35: Umfangsgemittelte, normierte Dampf- (links) und Temperaturprofile (rechts) für alle drei Rechenfälle. Die Symbole repräsentieren jeweils die DNS Daten, die durchgezogene Linie jeweils die Kurvenanpassung mithilfe des Fehlerfunktions-Ansatzes.

Um nun auch noch die Abhängigkeit vom Tropfendurchmesser zu untersuchen, wurde für Rechenfall A zusätzlich noch eine Durchmesservariation durchgeführt. Dabei wurden weitere DNS Rechnungen mit einem halbem und einem doppelten Radius ausgewertet. Die Gittergröße wurde entsprechend verkleinert/vergrößert und die Anströmgeschwindigkeit so angepasst, dass die Weber-Zahl konstant blieb. Die Tropfen-Reynolds-Zahl änderte sich dabei nur geringfügig. Es konnte gezeigt werden, dass die Kurvenanpassung ebenfalls unabhängig vom Tropfendurchmesser ist, wie in Abbildung 36 gezeigt.

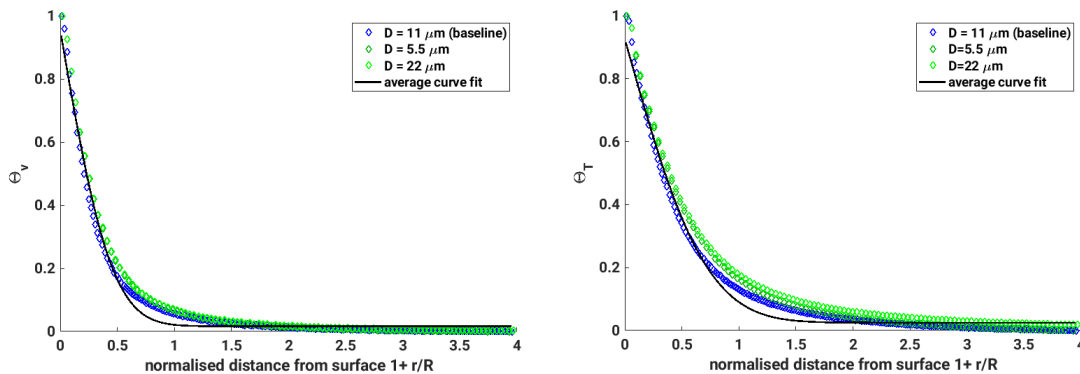


Abbildung 36: Umfangsgemittelte, normierte Dampf- (links) und Temperaturprofile (rechts) für drei verschiedene Durchmesser, sowie die dazugehörige gemittelte Kurvenanpassung mithilfe des Fehlerfunktion-Ansatzes.

Mit dem Fehlerfunktions-Ansatz konnten damit dimensionslose, universelle Profile für den Dampf- und Temperaturverlauf in unmittelbarer Nähe der Tropfenoberfläche gefunden werden. Diese Profile kamen in AP 4.2 dahingehend zum Einsatz, dass sie einerseits eine gute Abschätzung ergaben, über welche Kernelgröße der entstandene Dampf verteilt werden soll. Außerdem konnten mithilfe der Profile nun die konsistenten Wertepaare aus Abstand zur Tropfenoberfläche und Temperatur/Kraftstoffdampfkonzentration bestimmt werden, die für die Auswertungsradius-Methode des verbesserten Verdunstungsmodells benötigt werden.

#### 4 Zusammenfassung und Ausblick

Zur Simulation der innermotorischen Gemischbildung wird in kommerziellen CFD Programmen üblicherweise der Lagrange'schen Ansatz zur Beschreibung der flüssigen Phase verwendet, da so eine Auflösung der Tropfen durch das numerische Gitter vermieden werden kann, was zu erheblich reduzierten Rechenzeiten führt. Die an der Tropfenoberfläche stattfindenden Prozesse wie der Tropfenzerfall sowie die Verdunstung werden bei diesem Ansatz jedoch nicht aufgelöst, sondern durch geeignete Modelle berücksichtigt.

Das im Rahmen von Lagrange'schen Simulationen der Kraftstoffeinspritzung üblicherweise verwendete Verdunstungsmodell wurde auf Basis der Film-Theorie eines Einzeltropfens hergeleitet. Folglich ist das Modell nicht in der Lage, die Interaktion mehrere Tropfen – wie sie üblicherweise in Kraftstoffsprays auftreten – zu berücksichtigen. Zudem zeigte eine Sensitivitätsstudie im Rahmen dieses Projektes, dass die Ergebnisse mit steigender Gitterfeinheit durch Sättigungseffekte zunehmend von den experimentellen Ergebnissen abweichen. Hierfür ist die in der Herleitung getroffene Fernfeldannahme verantwortlich, die bei Tropfendurchmesser zu Gitterkantenlänge-Verhältnissen kleiner als 10 verletzt wird.

In diesem Projekt wurde daher ein verbessertes Verdunstungsmodell entwickelt, welches nicht mehr auf der Fernfeldannahme basiert und welches zudem durch die Einführung eines Auswertekernels in der Lage ist, den Einfluss benachbarter Tropfen auf die Verdunstung zu berücksichtigen. In die Entwicklung des verbesserten Modells flossen dabei sowohl theoretische Überlegungen als auch Ergebnisse aufgelöster Tropfensimulationen ein. Das verbesserte Modell liefert nun für Tropfendurchmesser zu Gitterkantenlänge-Verhältnisse bis eins gitterunabhängige Ergebnisse. Erst bei Verhältnissen unterhalb von eins weichen die Ergebnisse wieder von den experimentellen Ergebnissen ab. Allerdings ist bei diesen Gitterauflösungen der Lagrange'sche Ansatz generell nicht mehr gültig.

Da der Implementierungsaufwand des verbesserten Verdunstungsmodells sehr gering und der erforderliche Rechenaufwand nur minimal größer als beim ursprünglichen Modell ist, wird mit einer breiten Anwendung des Modells in kommerziellen CFD Programmen gerechnet. Viele KMU verwenden diese kommerziellen CFD Programme für ihre Simulationen der innermotorischen Gemischbildung, so dass die Relevanz dieses Projektes für die beteiligten Unternehmen gegeben ist.



**5 Anhang****5.1 Literaturverzeichnis**

- [Abr89] B. Abramzon, W. A. Sirignano, Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations, *Int. J. Heat Mass Transfer* vol. 32, pp. 1605-1618, 1989
- [Apt08] Apte et al.: Accounting for finite-size effects in simulations of disperse particle-laden flows, *International Journal of Multiphase Flows*, 2008
- [Cas16] G. Castanet, L. Perrin, O. Caballina, F. Lemoine, Evaporation of closely-spaced interacting droplets arranged in a single row, *Int. J. Heat Mass Transfer* 93, pp. 788-802, 2016
- [Cos18] Cossali, G. E.; Tonini, S: Variable gas density effects on transport from interacting evaporating spherical drops, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 127, pp 485-496, 2018
- [Duk80] J. K. Dukowicz, A Particle-Fluid Numerical Model for Liquid Sprays, *Journal of Computational Physics* vol. 35, pp. 229-253, 1980
- [ECN1] <http://www.sandia.gov/ecn/>
- [Hub75] G. L. Hubbard, V. E. Denny, A. F. Mills, Droplet Evaporation: Effects of Transients and Variable Properties, *Int. J. Heat Mass Trans.*(18), pp. 1003-1008, 1975
- [Knu14] E. Knudsen, Shashank, H. Pitsch: Modeling Partially Premixed Combustion Behaviour In Multiphase LES, *Combustion and Flame*, 2014
- [Kul95] M. Kulmala, T. Vesala, J. Schwarz, J. Smolik, Mass-transfer from a drop. 2. Theoretical analysis of temperature-dependent mass flux correlation. *Int. J. Heat Mass Trans.*, vol. 38(9), pp. 1705–1708, 1995.
- [Lam32] H. Lamb, *Hydrodynamics*, 6th edn, Cambridge University Press, pp. 473-475, 1932
- [Lew24] W. Lewis, W. Whitman *Principles of Gas Absorption*, *Ind. Eng. Chem.* vol. 16, pp. 1215-1220, 1924
- [Luo08] K. Luo, O. Desjardins, H. Pitsch, DNS of droplet evaporation and combustion in a swirling combustor, *Annual Research Briefs*, pp. 253-266, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2008
- [Ma13] C. Ma, D. Bothe, Numerical modeling of thermocapillary two-phase flows with evaporation using a two-scalar approach for heat transfer, *Journal of Computational Physics*, vol. 233, pp. 552-573, 2013
- [Mil98] R. S. Miller, K. Harstad, J. Bellan, Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations, *Int. J. Multiphase Flow* vol. 24, pp. 1025-1055, 1998
- [Mil99] R. S. Miller, J. Bellan, Direct numerical simulation of a confined three-dimensional gas mixing layer with one evaporating hydrocarbon-droplet-laden stream, *J. Fluid Mech.* Vol. 384, pp. 293-338, 1999
- [Nom96] H. Nomura, Y. Ujiie, H. J. Rath, J. Sato, M. Kono, Experimental study on high-pressure droplet evaporation using microgravity conditions, *Int. Symp. on Combustion* 26, pp 1267-1273, 1996
- [Pro80] A. Prosperetti, Free oscillations of drops and bubbles: the initial-value problem, *Journal of Fluid Mechanics*, vol.100(2), pp. 333-347, 1980

- [Ran52a] W. E. Ranz, W. R. Marshall, Evaporation from drops: Part 1, *Chemical Engineering Progress*, vol. 48(3), pp. 141–146, 1952.
- [Ran52b] W. E. Ranz, W. R. Marshall, Evaporation from drops: Part 2, *Chemical Engineering Progress*, vol. 48(4), pp. 173–180, 1952.
- [Ren91] M. Renksizbulut, R. Nafziger, X. G. Li, A mass-transfer correlation for droplet evaporation in high-temperature flows. *Chemical Engineering Science*, vol. 46(9), pp. 2351–2358, 1991.
- [Sch94] J. Schwarz, J. Smolik, Mass-transfer from a drop. 1. Experimental study and comparison with existing correlations, *Int. J. Heat Mass Trans.*, vol. 37(14), pp. 2139–2143, 1994.
- [Sir10] W. A. Sirignano, *Fluid Dynamics and Transport of Droplet and Sprays*, Cambridge University Press, 2010
- [Spa53] D. B. Spalding, *The Combustion of Liquid Fuels*, Fourth Symposium on Combustion, pp. 847-864, 1953
- [Wil05] J. Wilms, *Evaporation of Multicomponent Droplets*. PhD Thesis, Universität Stuttgart, Verlag Dr. Hut, 2005. ISBN 3-89963-255-9

## 5.2 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Inzylinder-Druckverlauf von Simulation und Experiment als Funktion des Kurbelwinkels für einen Ventilhub von 4 mm bei einer Motordrehzahl von 1200 1/min.....	6
Abbildung 2: Vergleich des Strömungsfeldes während des Einlasstaktes von 400°KW bis 460°KW zwischen Simulation und Experiment für einen Ventilhub von 4 mm bei einer Motordrehzahl von 1200 1/min.....	6
Abbildung 3: Ausbreitung des Kraftstoffsprays in Simulation und Experiment von 672,5°KW bis 677,5°KW im Motor. Die roten Konturlinien in den experimentellen Bildern stellen den Grenzwert der Signalintensität dar, welche die Gasphase von der flüssigen Phase trennt....	7
Abbildung 4: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse eines ruhenden Heptan Tropfens bei 1 bar und 741 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur.....	9
Abbildung 5: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse eines fallenden Pentan Tropfens bei 1 bar und 300 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur.....	9
Abbildung 6: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Referenzzustände eines ruhenden Heptan Tropfens bei 1 bar und 741 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur.....	10
Abbildung 7: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Referenzzustände eines fallenden Pentan Tropfens bei 1 bar und 300 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur.....	10
Abbildung 8: Ausbreitung des Kraftstoffsprays in Simulation und Experiment von 0,3 – 0,9 ms.....	12
Abbildung 9: Verlauf der gasförmigen Eindringtiefe über der Zeit für Simulation und Experiment des Spray G [ECN1].....	13
Abbildung 10: Verlauf des Gitterfaktors über der Zeit für einen Tropfen während seiner Verdunstung.....	16
Abbildung 11: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse eines ruhenden Heptan Tropfens bei 1 bar und 741 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur für das alte und neue Verdunstungsmodell mit Gitterfaktor.....	17
Abbildung 12: Einfluss der Breite der Quellterm-Verteilungsfunktion im Vergleich zum Ergebnis einer aufgelösten Tropfensimulation für einen 10 µm großen Iso-Oktan Tropfen bei einer Umgebungstemperatur bzw. Druck von 353 K und 1 bar.....	18
Abbildung 13: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Gitterkantenlänge zu Tropfendurchmesser Verhältnisse eines ruhenden Heptan Tropfens bei 1 bar und 741 K Umgebungsdruck bzw. -temperatur für das neue Verdunstungsmodell mit Gitterfaktor und Quelltermverteilung.....	18
Abbildung 14: Tropfen-Tropfen Interaktion der Verdunstung über das Kraftstoffdampfelfeld....	19
Abbildung 15: Berechnung der Gradienten für das Verdunstungsmodell entlang eines Auswertungsradius.....	20
Abbildung 16: Subgrid Tropfen-Tropfen Interaktion mit angepasster Größe des Auswertungsradius.....	20
Abbildung 17: Bestimmung der Gradienten für das Verdunstungsmodell auf Basis der Zelloberflächenwerte.....	21
Abbildung 18: Links: Verlauf des normierten, quadrierten Tropfendurchmessers über der normierten Zeit für verschiedene Tropfenabstände. Rechts: Verlauf des Hemmungsfaktors als Funktion des Tropfenabstands.....	23

Abbildung 19: Verlauf der integrierten, verdunsteten Masse über der Zeit des Spray G für das neue und das alte Verdunstungsmodell für jeweils drei verschiedene Gitterauflösungen.....	23
Abbildung 20: Rechengebiet der DNS. Gleichseitiger Würfel mit einer Kantenlänge von $5D$ und einer Auflösung von insgesamt 1283 Zellen.....	26
Abbildung 21: Temperaturverteilung im Mittelschnitt des Rechengebiets (Fall A).....	27
Abbildung 22: Zeitlicher Verlauf der gemittelten Oberflächentemperatur (links) und der gemittelten Tropfentemperatur (rechts) für alle drei Rechenfälle.....	27
Abbildung 23: Zeitlicher Verlauf der Sherwood-Zahl für alle drei Rechenfälle.....	28
Abbildung 24: Vergleich der Sherwood-Zahlen aus den numerischen Simulationen mit experimentellen Daten und Korrelationen.....	29
Abbildung 25: Vergleich der Simulationsergebnisse mit der Korrelation von Renksizbulut et al. Experimentelle Daten extrahiert aus [Ren91].....	29
Abbildung 26: Dampf- (links) und Temperaturverteilung (rechts) im Mittelschnitt des Rechengebiets.....	30
Abbildung 27: Dampf- (links) und Temperaturverteilung (rechts) entlang der Mittellinie des Rechengebiets.....	30
Abbildung 28: Geschwindigkeitsverteilung entlang der Mittellinie (links) und im Mittelschnitt des Rechengebiets (rechts).....	32
Abbildung 29: Dampfverteilung entlang der Mittellinie (links) und im Mittelschnitt des Rechengebiets (rechts).....	32
Abbildung 30: Entwicklung der Koeffizienten $A_k$ über der Zeit.....	33
Abbildung 31: Zeitlicher Verlauf der ersten drei geraden Moden $A_2$ , $A_4$ und $A_6$ für vier verschiedene anfängliche Auslenkungen aus der Kugelform von 1%, 5%, 20% und 40% .....	34
Abbildung 32: Dampf- (links) und Temperaturprofile (rechts) entlang einer Zellreihe quer zur Strömung in der Mittelebene des Rechengebiets. Die Symbole repräsentieren jeweils die DNS Daten, die durchgezogene Linie jeweils die Kurvenanpassung mithilfe des Fehlerfunktions-Ansatzes.....	35
Abbildung 33: Normierte Dampf- (links) und Temperaturprofile (rechts) in einer Zellreihe quer zur Strömung in der Mittelebene des Rechengebiets. Die Symbole repräsentieren jeweils die DNS Daten, die durchgezogene Linie jeweils die Kurvenanpassung mithilfe des Fehlerfunktions-Ansatzes.....	36
Abbildung 34: Einfluss des $\Delta r$ der Glättung auf den Verlauf des Dampfprofils für Rechenfall A.....	36
Abbildung 35: Umfangsgemittelte, normierte Dampf- (links) und Temperaturprofile (rechts) für alle drei Rechenfälle. Die Symbole repräsentieren jeweils die DNS Daten, die durchgezogene Linie jeweils die Kurvenanpassung mithilfe des Fehlerfunktions-Ansatzes..	37
Abbildung 36: Umfangsgemittelte, normierte Dampf- (links) und Temperaturprofile (rechts) für drei verschiedene Durchmesser, sowie die dazugehörige gemittelte Kurvenanpassung mithilfe des Fehlerfunktion-Ansatzes.....	37

### 5.3 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Eigenschaften des optisch zugänglichen, direkteinspritzenden Einzylinder-Ottomotors des Instituts für Verbrennung und Gasdynamik der Universität Duisburg-Essen..	5
Tabelle 2: Bereich der lokalen Verdunstungsbedingungen für Tropfen in einem direkteinspritzendem Ottomotor bei einem Einspritzzeitpunkt bei 672°KW.....	8
Tabelle 3: Randbedingungen von Spray G nach [ECN1].....	11
Tabelle 4: Randbedingungen der Simulationen zur Untersuchung der Tropfen-Tropfen Interaktion mit dem neuen Verdunstungsmodell.....	22
Tabelle 5: Gewählte Parameterkombinationen der DNS: Variation der Gastemperatur $T_{gas}$ und des Kraftstoffmassenbruchs in der Anströmung $Y_{v,inflow}$ mit dazugehöriger Anströmgeschwindigkeit $u_{inflow}$ , Tropfen-Reynolds-Zahl $\Re$ und Schmidt-Zahl $Sc$ .	25
Tabelle 6: Umgebungsbedingungen für die Simulation eines fallenden Tropfentandems.....	31
Tabelle 7: Schwingungsfrequenzen der ersten sechs Moden für eine anfängliche Auslenkung von . Vergleich der DNS Ergebnisse mit analytischen Modellen.....	34