

VERFASST VON



Viktoria Huschka, M. Sc.
ist Wissenschaftliche Mitarbeiterin des Instituts für Simulation reaktiver Thermo-Fluid Systeme (STFS) der TU Darmstadt.



Benjamin Klevansky, M. Sc.
ist Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU).



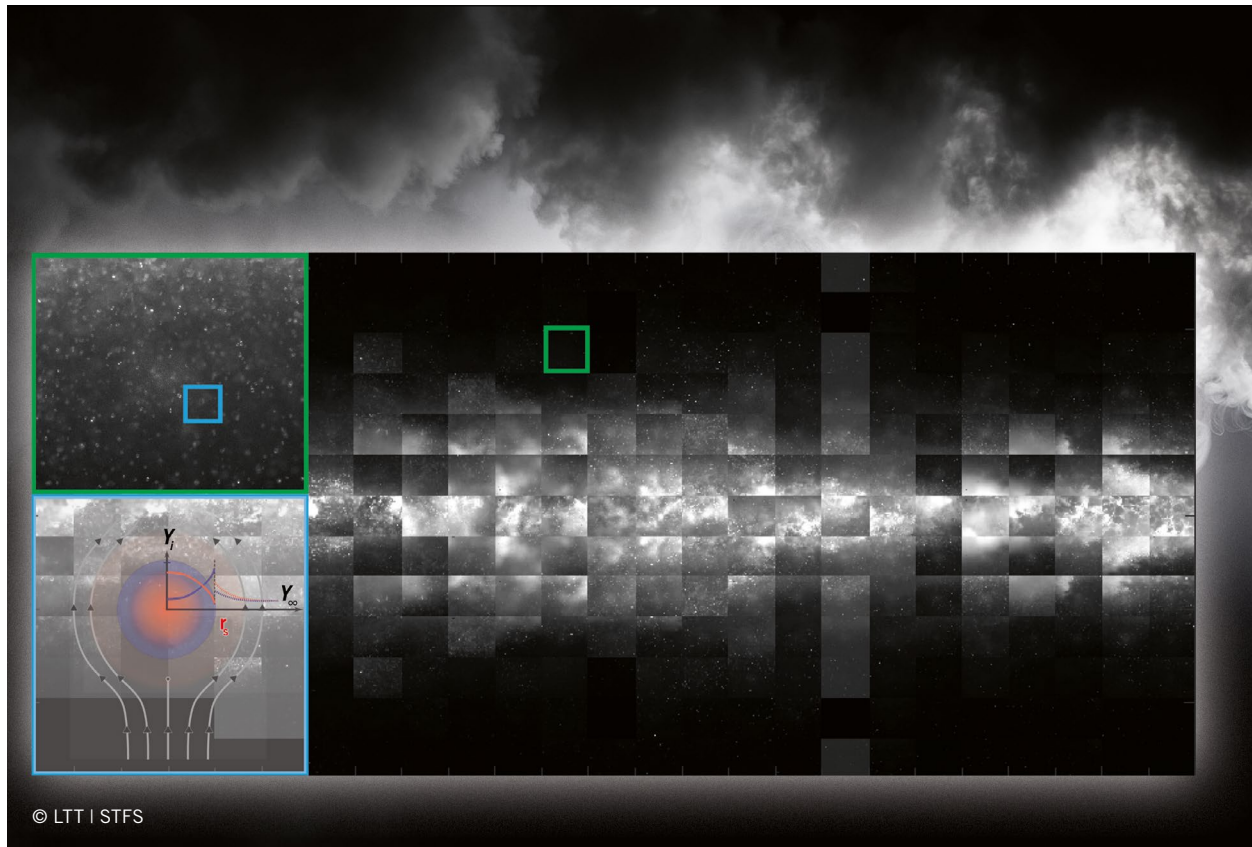
Prof. Dr.-Ing. Christian Hasse
ist Leiter des Instituts für Simulation reaktiver Thermo-Fluid Systeme (STFS) der TU Darmstadt.



Prof. Dr.-Ing. Stefan Will
ist Leiter des Lehrstuhls für Technische Thermodynamik (LTT) der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU).

Präferentielle Verdunstung alternativer Kraftstoffgemische in motorischen Sprays

Die Defossilisierung des Verkehrssektors erfordert zunehmend den Einsatz regenerativer, teiloxxygenierter Kraftstoffe. Deren physikochemische Eigenschaften unterscheiden sich jedoch signifikant von fossilen Brennstoffen, insbesondere hinsichtlich des Verdunstungsverhaltens in Mehrkomponentengemischen. Im Rahmen eines FVV-Forschungsvorhabens (Nr. 1476) wurde an der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) und der TU Darmstadt eine kombinierte experimentell-numerische Methodik entwickelt, um die präferentielle Verdunstung in motorischen Sprays zu charakterisieren.



1 MOTIVATION

2 EXPERIMENTELLE METHODEN

3 EXPERIMENTELLE ERGEBNISSE

4 NUMERISCHE METHODIK

5 NUMERISCHE ERGEBNISSE

6 ZUSAMMENFASSUNG

1 MOTIVATION

Herkömmlichen Kraftstoffen werden zunehmend teiloxygenierte Kraftstoffe beigemischt, diese verändern jedoch die physikalisch-chemischen Eigenschaften und beeinflussen damit direkt die Verbrennung und Schadstoffbildung in Motoren. Es treten physikalische Effekte auf, die ohne diese Beimischungen eher vernachlässigbar sind – zum Beispiel die präferentielle Verdunstung. Hiermit ist die selektive Verdunstung einzelner Komponenten in Mehrstoffgemischen gemeint, was maßgeblich die lokale Gemischbildung bestimmt. Die präzise Modellierung dieser Phänomene ist entscheidend, um die lokale Gemischbildung sowie weitere Motorprozesse beschreiben zu können.

Mit dem Projekt „Präferentielle Verdunstung alternativer Kraftstoffgemische“ wurde durch die enge Verknüpfung von laserdiagnostischen Messungen und hochauflösenden numerischen Simulationen ein vertieftes Verständnis der Verdunstungsprozesse und der Gemischbildung geschaffen. Dank der am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) der FAU durchgeführten Experimente und den Berechnungen am Fachgebiet Simulation reaktiver Thermo-Fluid-Systeme (STFS) der TU Darmstadt stehen nun Benchmarkdatensätze zur Verfügung, deren Erhebung insbesondere für kleine und mittlere Unternehmen (KMU) zu aufwendig wäre.

2 EXPERIMENTELLE METHODEN

Die experimentelle Untersuchung der präferentiellen Verdunstung in motorischen Sprays erfordert eine Messtechnik, die simultan die Tropfengröße (Mittlerer Sauter-Durchmesser, SMD) und die lokale Zusammensetzung erfasst. Die Umsetzung des Messkonzepts erfolgte ratiometrisch über einen Laserlichtschnitt, wobei das Streulicht der Tropfen sowie die Fluoreszenz des solvatochromischen Farbstoffs Nilrot erfasst werden. Dieser Farbstoff hat die Eigenschaft, die Fluoreszenzwellenlänge in Abhängigkeit der Umgebungspolarität zu ändern. Mittels einer Verhältnisbildung aus zwei spektralen Banden kann auf die Kraftstoffkomposition polares Ethanol (EtOH) versus unpolares Isooktan geschlossen werden.

Zunächst wurden Kalibriermessungen in einer Küvette und in einer Tropfenkette vorgenommen. Bei der Anwendung auf mikroskopische Tropfen (10 bis 100 μm) treten jedoch Morphologieabhängige Resonanzen (MDR) auf. Hierbei agieren Tropfen als optische Resonatoren, die die Fluoreszenz in einem bestimmten Spektralbereich verstärken. Da sie die Volumenabhängigkeit des Signals stören und die Bestimmung des SMDs verfälschen würden, entwickelten die Forschenden ein Detektionskonzept mit zwei spezifischen Bandpassfiltern (BP1: 575 nm, BP2: 700 nm). Diese liegen

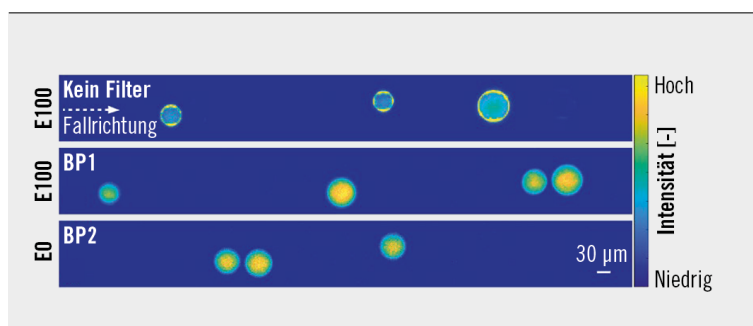


BILD 1 Abbild einzelner Tropfen für E100 ohne Bandpassfilter (oben), für E100 mit BP1 (Mitte), für EO mit BP2 (unten) [1] © [M] LTT | CC BY 4.0

außerhalb der auftretenden Resonanzen und ermöglichen über ein ratiometrisches Prinzip die Bestimmung des EtOH-Anteils. Der Effekt der ausgewählten Filter wurde, wie in **BILD 1** dargestellt, in der Tropfenkette validiert. **BILD 2** zeigt die nach der Eliminierung der MDR entstandenen Kalibrierkurven in der Küvette, die das entstehende Signalverhältnis aus den zwei spektralen Banden der Zusammensetzung zuweisen.

Um ein grundlegendes Verständnis der Verdunstungsprozesse zu erlangen, wurden Kraftstofftropfen variabler Zusammensetzung zunächst in einem akustischen Levitator berührungsfrei stabilisiert. Das ermöglichte deutlich längere Beobachtungszeiten als in der Tropfenkette. Mittels Raman-Spektroskopie wurde die zeitliche Änderung der Tropfenzusammensetzung quantifiziert, um den Verlauf der präferentiellen Verdunstung unter kontrollierten Bedingungen zu untersuchen.

Die finale Anwendung des Messprinzips erfolgte in einer optischen Druckkammer unter zwei Umgebungsdrücken (1 und 10 bar) sowie variablen initialen Kraftstofftemperaturen (25, 40 und 60 °C) und Umgebungstemperaturen (25, 140 und 200 °C). Über ein System aus drei Kameras wurden simultan das Mie-Streulicht sowie die Laserinduzierten Fluoreszenz(LIF)-Signale aufgenommen. Daraus wurden die Tropfengröße und der EtOH-Anteil abgeleitet.

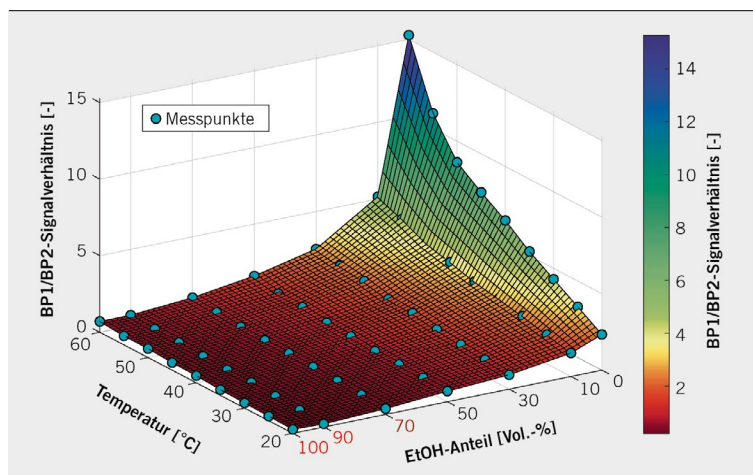


BILD 2 BP1/BP2-Fluoreszenzsignalverhältnis als Funktion der EtOH-Konzentration in einer beheizten Küvette für Fluidtemperaturen zwischen 20 und 60 °C und lineare Interpolation zwischen den Messpunkten [1] © [M] LTT | CC BY 4.0

3 EXPERIMENTELLE ERGEBNISSE

Die spektroskopische Charakterisierung im akustischen Levitator verdeutlicht ein nichtideales, stark konzentrationsabhängiges Evaporationsverhalten der binären Kraftstoffmischungen. Speziell bei Gemischen mit geringem EtOH-Anteil (zum Beispiel E10 mit 10 Vol.-% EtOH und 90 Vol.-% Isooktan) resultiert die hohe Flüchtigkeit der EtOH-Komponente in einer rapiden Abreicherung, so dass bereits nach kurzer Zeit nahezu reiner Basiskraftstoff vorliegt. Ein analoger Effekt, wenngleich in der Dynamik vermindert, ist bei geringen Isooktan-Konzentrationen in EtOH (zum Beispiel E90) zu beobachten. Eine Sonderstellung hinsichtlich der präferentiellen Verdunstung nimmt die Mischung E30 ein: Hier bleibt die EtOH-Konzentration im Tropfen über ein signifikantes Zeitintervall nahezu stabil, mit einer rapiden Anreicherung von Isooktan. Im Gegensatz dazu unterliegen die Mischungen E50, E70 und E90 einer deutlich beschleunigten Änderung ihrer stofflichen Zusammensetzung während des Verdunstungsprozesses.

Die Übertragung des ratiometrischen Messverfahrens auf motor-relevante Sprays ermöglichte die bildgebende Bestimmung der Veränderung der Kraftstoffzusammensetzung. Dabei zeigen die im Einzeltropfen identifizierten Konzentrationstrends eine Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Sprayuntersuchungen. **BILD 3** illustriert den Trend der Kraftstoffzusammensetzung (linke Spalte) und der Tropfengrößenverteilung (rechte Spalte) für die Gemische E10, E30 und E50. Im Fall der initialen Konzentration E10 ist ein charakteristischer radialer Abfall der EtOH-Konzentration hin zum Sprayrand zu beobachten. Dieses Phänomen fällt mit einer reduzierten mittleren Tropfengröße in der Sprayperipherie zusammen. In Übereinstimmung mit den Einzeltropfenuntersuchungen wies die E30-Mischung eine weitgehend homogene Konzentrationsverteilung über die gesamte Sprühfahne auf. Im Gegensatz zum E10-Spray zeigte E50 eine EtOH-Anreicherung hin zur radialen Sprayperipherie. Abschließend ist festzustellen: Eine Erhöhung des EtOH-Anteils geht tendenziell mit einer Verringerung des mittleren Tropfendurchmessers innerhalb des Gesamtsprays einher.

4 NUMERISCHE METHODIK

Die Gemischbildung wird mit einer Mehrphasensimulation im Euler-Lagrange-Ansatz berechnet: Die Gasphase im Eulerschen

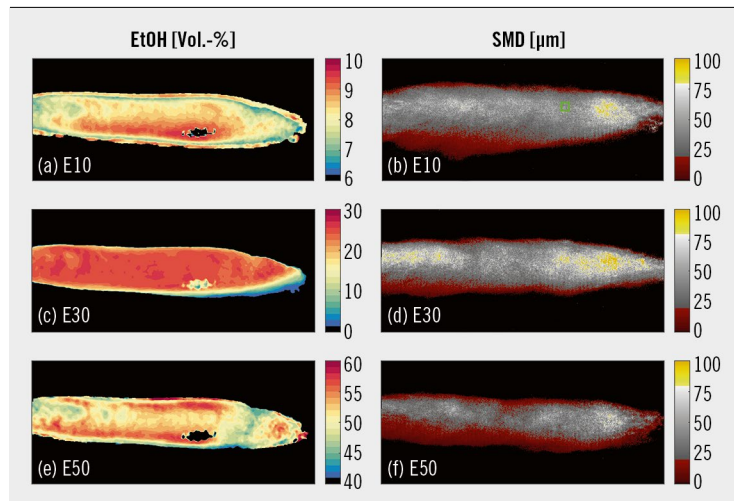


BILD 3 Gemittelte Aufnahmen des EtOH-Volumenanteils (linke Spalte) und der SMD-Verteilung (rechte Spalte) für E10, E30, E50; Umgebungsdruck = 1 bar; Umgebungstemperatur = 180 °C; die Werte für den EtOH-Volumenanteil sind für jede Kraftstoffprobe individuell skaliert, um Veränderungen der Kraftstoffkonzentration innerhalb des Sprays besser zu visualisieren [1] © [M] LTT | CC BY 4.0)

Raum wird durch die Erhaltungsgleichungen für Kontinuität, Impuls (Navier-Stokes-Gleichungen), Enthalpie und Spezies beschrieben; die disperse Flüssigphase wird durch Lagrangesche Partikel repräsentiert. Die Phasenkopplung erfolgt zweiseitig: In den Erhaltungsgleichungen der Gasphase werden Quellterme eingefügt, die Impuls-, Energie- und Massentransfer der Partikel berücksichtigen. Für die Partikel werden Gleichungen für die Masse, Geschwindigkeit und Temperatur in Abhängigkeit der Gasphasenwerte gelöst.

Besonderer Fokus lag auf der Modellierung des Phasenwechsels in Mehrkomponentenmischungen: Zur Beschreibung nicht-idealer Wechselwirkungen erfolgte die Modellierung mit der Gruppenbeitragsmethode Universal Quasichemical Functional Group Activity Coefficient (UNIFAC) [2]. Der Aktivitätskoeffizient wird hierbei in Abhängigkeit von Zusammensetzung, Temperatur und Molekülstruktur berechnet. Die Auswirkungen der

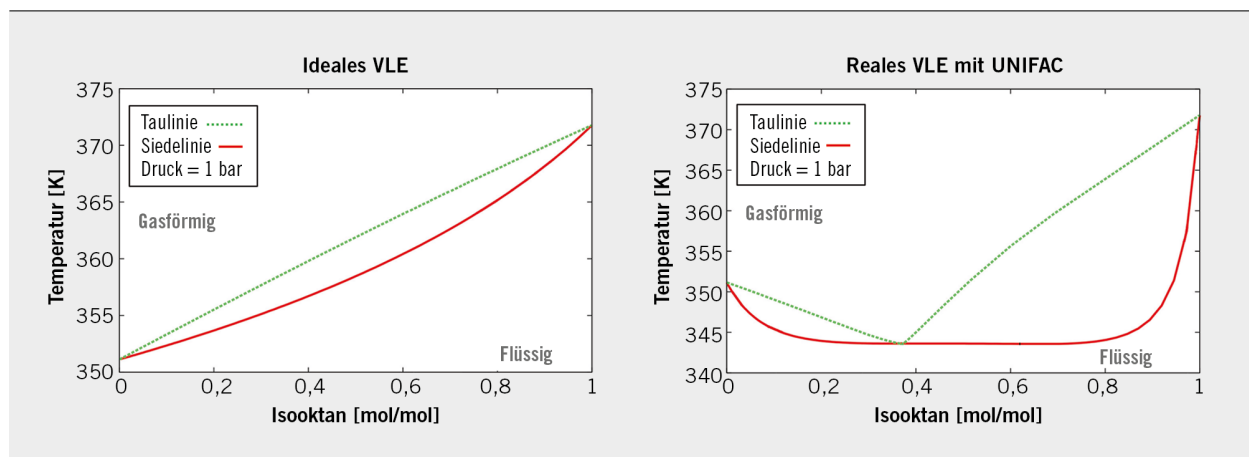


BILD 4 Siedediagramm des idealen VLE (links) und eines realen VLE (rechts) mit azeotropen Punkt einer EtOH/Isooktan-Mischung © STFS)

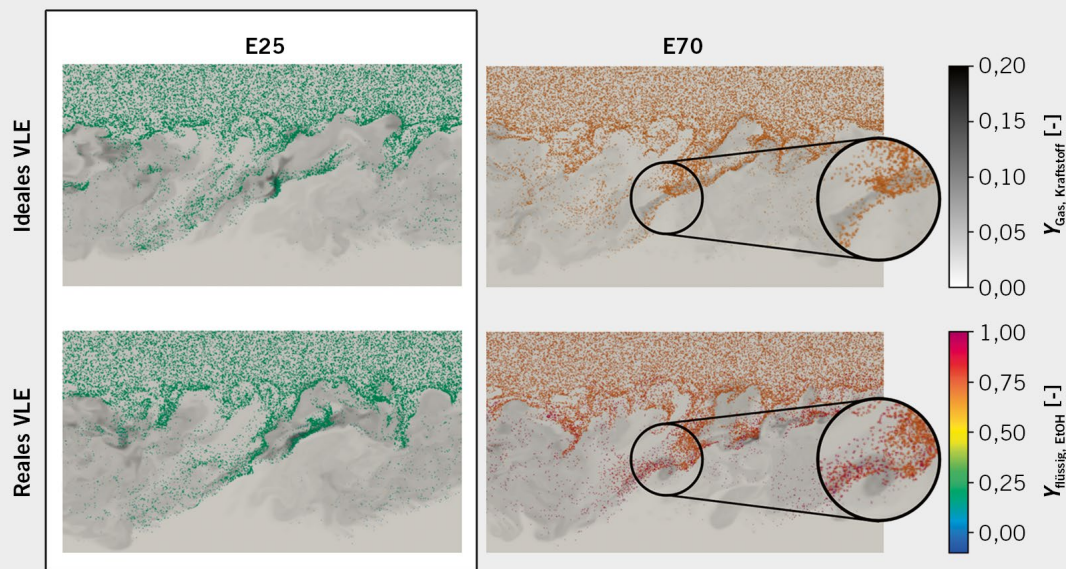


BILD 5
Gemischbildung von E25 (links) und E70 (rechts) in einer turbulenten Mischungs-schicht für unterschiedliche Anfangszusammensetzungen (© STFS)

idealen beziehungsweise realen Modellierung sind in **BILD 4** dargestellt. Während die ideale Beschreibung keine Azeotropbildung vorhersagt, weist das reale VLE einen azeotropen Punkt auf. Im realen System ändert sich in Abhängigkeit von der Zusammensetzung die relative Flüchtigkeit der Komponenten, sodass entweder EtOH oder Isooktan die volatilere Komponente ist. Eine realitätsnahe Abbildung des Verdunstungsverhaltens von Mischungen polarer und unpolare Kraftstoffe erfordert daher die Berücksichtigung nichtidealer Wechselwirkungen.

5 NUMERISCHE ERGEBNISSE

Zur isolierten Analyse der Unterschiede zwischen idealer und realer Beschreibung des Dampf-Flüssigkeits-Gleichgewichts (Vapor-Liquid Equilibrium, VLE) wurde zunächst eine generische Konfiguration in Form einer turbulenten Mischungsschicht untersucht.

Dieser Modellfall stellt eine abstrahierte Form der äußeren Sprayzone dar, in der kalte Kraftstofftropfen und warmes Umgebungsgas interagieren.

In **BILD 5** sind die Ergebnisse für zwei Sprayanfangszusammensetzungen mit idealem sowie mit realem, auf der UNIFAC-Methode basierendem VLE dargestellt. In der Gasphase ist der Kraftstoffmassenbruch $Y(\text{EtOH und Isooktan})$ zu sehen, in der Flüssigphase der EtOH-Massenbruch. Für beide Zusammensetzungen ist Y in der Gasphase bei der Annahme eines idealen Verhaltens geringer, somit wird die Verdunstungsrate unterschätzt. Für hohe EtOH-Gehalte (E70) unterscheidet sich die Mischungszusammensetzung.

Aufbauend auf diesen Erkenntnissen wurde das UNIFAC-Verdunstungsmodell auf die experimentell untersuchte Spraykonfiguration angewendet. Um die Experimente mit dem numerischen Ansatz zu simulieren, wurden die Anfangs- und Randbedingungen wie die Einspritzrate gemessen und für die Simulation vorgegeben.

OBERFLÄCHEN WEITERDENKEN.

MIT DEM JOT-NEWSLETTER.

Jetzt registrieren:

jot-oberflaeche.de/newsletter



- Die ganze Welt der Oberflächentechnik
- Trends schneller erkennen
- Mit dem eigenen Wissen glänzen
- Aktuelle Impulse mit konkreten Anregungen
- Praxisnah und anwenderorientiert.

#joinjot

JOT
WISSEN, WIE ES WEITERGEHT.

In **BILD 6** sind ausgewählte Simulationen der Spraykonfiguration dargestellt. Für die Anfangszusammensetzungen E10 und E70 sind die Verteilung von Y in der Gasphase, das Verhältnis von EtOH zum gesamten gasförmigen Kraftstoff sowie der EtOH-Massenbruch in der Flüssigphase abgebildet. Obwohl sich für die Anfangszusammensetzungen E10 und E70 vergleichbare Massenbrüche des gesamten Kraftstoffs in der Gasphase einstellen, zeigt die mittlere Darstellung deutlich, dass sich das Verhältnis von EtOH zum Gesamtkraftstoff in der Gasphase unterscheidet. Abhängig

von der Mischung verdunstet bevorzugt eine der beiden Komponenten, sodass sich sowohl in der Gasphase als auch in der verbleibenden Flüssigphase eine veränderte Zusammensetzung einstellt. Diese selektive Verdunstung beeinflusst die lokale Gemischbildung maßgeblich und ist für eine realitätsnahe Abbildung der nachfolgenden Verbrennungsprozesse von zentraler Bedeutung.

6 ZUSAMMENFASSUNG

Der Beitrag zeigt in Auszügen die experimentelle und numerische Untersuchung der präferentiellen Verdunstung binärer Kraftstoffmischungen in unterschiedlichen Konfigurationen. Mit der entwickelten experimentellen Methode kann die präferentielle Verdunstung in Tropfen eines industrierelevanten Sprays charakterisiert werden. Die begleitenden Simulationen ermöglichen eine konsistente Abbildung der Versuchsrandbedingungen und detaillierte Analysen der zugrunde liegenden physikalischen Mechanismen. Die systematische Verknüpfung beider Ansätze liefert belastbare Referenz- und Validierungsdaten, die eine Implementierung und Bewertung von Verdunstungs- und Gemischbildungsmodellen erlauben.

LITERATURHINWEISE

- [1] Klevansky, B. W. et al.: Characterization of preferential evaporation in binary ethanol-isooctane sprays: 2D droplet size and volume fraction measurements. In: Applied Physics B 132 (2026), Artikel 9
- [2] Fredenslund, A.; Jones, R. L.; Prausnitz, J. M.: Group-contribution estimation of activity coefficients in nonideal liquid mixtures. In: AIChE Journal 21 (1975), Nr. 6, S. 1086-1099
- [3] Huschka, V.; Luu, T. D.; Stein, O. T.; Scholtissek, A.; Hasse, C.: Analysis of preferential evaporation of bi-component droplets in a turbulent mixing layer. 33rd ILASS Europe Conference on Liquid Atomization & Spray Systems, Lund, 2025

DANKE

Das Forschungsvorhaben (FVV-Projektnr. 1476) wurde am Fachgebiet für Simulation reaktiver Thermo-Fluid Systeme (STFS) der TU Darmstadt unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Christian Hasse und am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik (LTT) der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU) unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Stefan Will durchgeführt. Es wurde durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWE) über die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen (AiF) e. V. (IGF-Fördernr. 01IF23507N) aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestags finanziell gefördert und von einem Arbeitskreis unter der Leitung von Dr.-Ing. Jonas Villforth (Dr. Ing. h.c. F. Porsche AG) begleitet. Die Autorin und Autoren bedanken sich bei den Fördergebern, der FVV e. V. und allen Projektbeteiligten für die Unterstützung des Vorhabens. Ein besonderer Dank gilt zudem der LaVision GmbH für die Bereitstellung von zwei Kamerasystemen als Leihgabe, die die Durchführung der Untersuchungen maßgeblich ermöglicht haben. Spezieller Dank gilt Dr.-Ing. Florian Bauer (LTT Erlangen) für wesentliche Projektbeiträge und Dr.-Ing. Bastian Lehnert und Prof. Dr.-Ing. Michael Wensing (Professur für Fluidsystemtechnik, FAU) für die Unterstützung der Kammernmessungen.

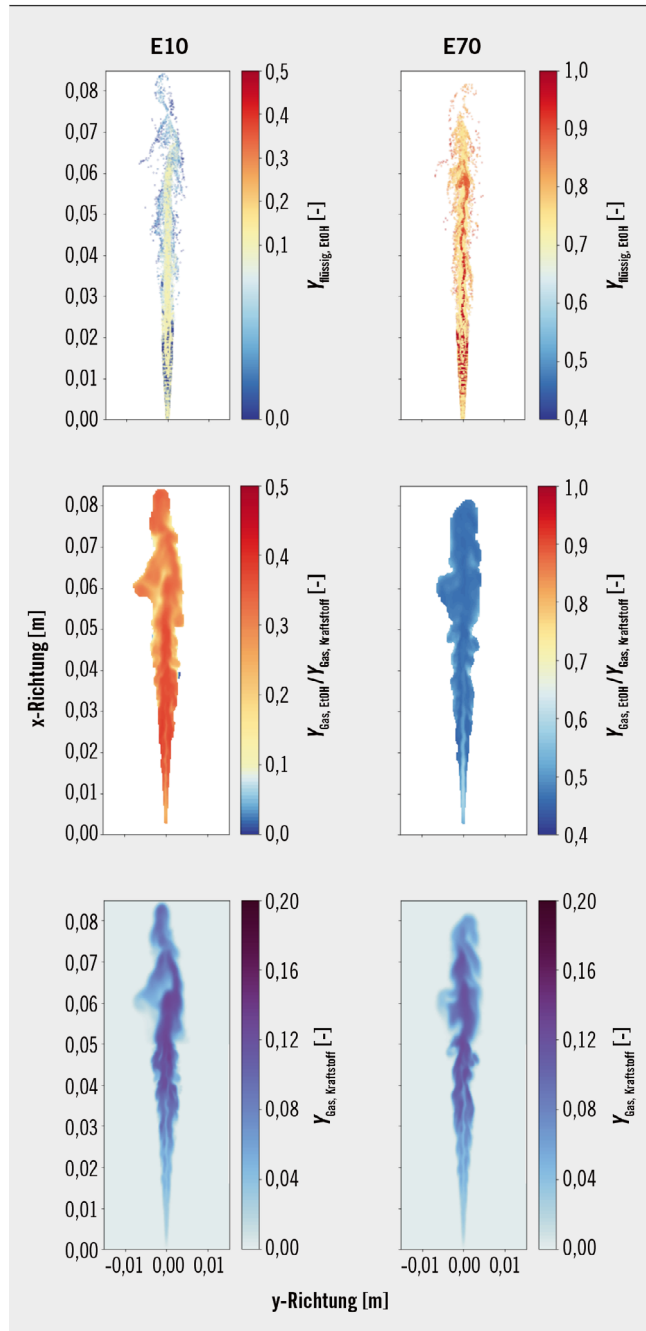


BILD 6 Simulationsergebnisse der Spraykonfiguration E10 (links) und E70 (rechts): Y in der Gasphase (untere Zeile), Verhältnis von EtOH zum Gesamtmassenbruch des Kraftstoffs in der Gasphase (mittlere Zeile); EtOH-Massenbruch in der Flüssigphase (obere Zeile); Umgebungsdruck = 10 bar (© STFS)



READ THE ENGLISH E-MAGAZINE

Test now for 30 days free of charge: www.mtz-worldwide.com