

# Schlussbericht

## zum Vorhaben

Thema:

**Entwicklung geeigneter Kennzahlen für die Charakterisierung von ethanolhaltigen Kraftstoffen zur Beschreibung abnormaler Verbrennungserscheinungen**

Zuwendungsempfänger:

**Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen**

Förderkennzeichen:

**22001614 (14NR016)**

Laufzeit:

**01.04.2014 bis 30.09.2017**

Datum der Veröffentlichung: 23.07.2018

Gefördert durch:



**aufgrund eines Beschlusses  
des Deutschen Bundestages**

Das diesem Bericht zugrundeliegende Vorhaben wurde aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages mit Mitteln des Bundesministeriums für Ernährung und Landwirtschaft (BMEL) über die Fachagentur Nachwachsende Rohstoffe e.V. (FNR) als Projektträger des BMEL für das Förderprogramm Nachwachsende Rohstoffe unterstützt. Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.



## **Abstract**

Modern boosted spark ignition engines are subject to an increased risk of abnormal combustion due to higher specific power output and the increased utilization of biogenic fuel components like ethanol. Nowadays the phenomenon called pre-ignition (PI) marks a serious challenge to engine development. In order to make further progress in engine development, solving the issue of pre-ignition is one of the major goals.

This FVV project had the aim to define a characteristic fuel number and a corresponding test procedure, which captures a fuel's pre-ignition sensitivity. Several approaches were followed for this purpose. Engine based procedures on a CFR (Cooperative Fuel Research) test engine and a single cylinder research engine (SCE) were included as well as fundamental evaluations of ignition delay of premixed air-fuel mixtures. These ignition delay experiments were conducted on a rapid compression machine and an automated facility for ignition delay measurements of non-premixed air-fuel mixtures (AFIDA – Advanced Fuel Ignition Delay Analyzer). Another way to address the investigations was to define a fuel's pre-ignition sensitivity based on its chemical composition.

The CFR-test was based on a modified CFR engine incorporating two fuel numbers. One is the so called Hot Spot Pre-Ignition Number (HSPI) which quantifies the fuel's sensitivity towards surface induced pre-ignition. The other number is the Compression Pre-Ignition Number (CPI) which expresses the gas-phase auto-ignition tendency of a fuel. A large variety of over 30 fuels was introduced in this ongoing project to validate the fuel numbers on a broad scale.

Simplified engine process simulations reveal that the air-fuel mixture is operated in completely different chemical reaction regimes in the CFR engine and in the SCE due to differences in the intake air conditions of the engines. Correspondingly the CPI test procedure on the CFR engine got modified to correlate with modern engine conditions. By supercharging and inter-cooling the intake air of the CFR engine a significant correlation of determination  $R^2$  of 90 % to a fuel's behavior in modern engines is achieved. The results obtained from AFIDA tests and state-of-the-art engine measurements show a significant correlation of determination  $R^2$  of more than 80 %.

Extensive experimental and numerical investigation show that flow dynamics have a considerable influence on a fuel's glow ignition tendency. Therefore the results of the HSPI at the CFR engine could not be correlated to the glow ignition characteristics at the single cylinder engine. Further research is necessary to fully understand the fundamentals of surface ignition. This could not be done in the remaining time of this project.

An evaluation of the pre-ignition behavior based on the fuel composition was found to be insufficient. The complexity of potential molecules in gasoline fuels is not captured by an industrially applicable gas chromatography.

## **Kurzfassung**

Die steigende Leistungsdichte moderner hochaufgeladener Ottomotoren und die Kraftstoffbeimischung biogener Anteile wie Ethanol begünstigen das Auftreten von Verbrennungsanomalien. Aus heutiger Sicht stellt besonders das Phänomen der Vorentflammung (VE) eine Herausforderung für die Motorenentwicklung dar, weshalb es für die weiterführende Entwicklung von entscheidender Bedeutung ist, die Ursache der Verbrennungsanomalie zu vermeiden.

Mit diesem FVV-Vorhaben wurde das Ziel verfolgt, eine Kennzahl zu ermitteln, welche den Kraftstoffeinfluss auf die Vorentflammung bewertet. Hierbei wurde zwischen der Selbstzündung an einer heißen Oberfläche (Glühzündung) und jener infolge einer kritischen Gasphase unterschieden.

Zur Charakterisierung eines Kraftstoffes bzw. seiner Vorentflammungsneigung wurden unterschiedliche Ansätze verfolgt. Motorische Verfahren in einem modifizierten CFR (Cooperative Fuel Research)-Prüfmotor und einem seriennahen Einzylinder-Forschungsmotor wurden ebenso untersucht, wie die fundamentale Bewertung des Zündverzuges vorgemischter Luft-Kraftstoff-Proben. Die Zündverzugsanalysen wurden in diesem Zusammenhang in einem Einhubtriebwerk (Rapid compression machine) und einer automatisierten Vorrichtung zur Messung von Zündverzugszeiten nicht vorgemischter Luft-Kraftstoff-Proben (AFIDA – Advanced Fuel Ignition Delay Analyzer) vorgenommen.

Ein weiterer Ansatz der Kraftstoffbewertung war die Charakterisierung des Vorentflammungsverhaltens mittels der Stoffzusammensetzung des Kraftstoffes auf Basis einer gaschromatografischen Analyse (PIONA).

Grundlage der CFR-Messverfahren bildet ein modifizierter CFR-Prüfmotor, auf welchem zwei Kraftstoffkennzahlen zur Bewertung der Vorentflammungsneigung gemessen werden. Die sogenannte Hot Spot Pre-Ignition Number (HSPI) quantifiziert dabei die Neigung eines Kraftstoffes an einer heißen Oberfläche im Brennraum zu zünden. Die Compression Pre-Ignition Number (CPI) wiederum dient der Bewertung der Selbstzündung aus der kritischen Gasphase. Im Sinne der umfassenden Validierung dieser Kennzahlen wurde in diesem FVV-Projekt eine komplexe Kraftstoffmatrix mit mehr als 30 Kraftstoffen herangezogen.

Vereinfachte Motorsimulationen zeigen auf, dass die unterschiedlichen Ansaugbedingungen der Motoren dazu beitragen, dass das Luft-Kraftstoff-Gemisch im Brennraum in grundlegend unterschiedlichen Regimen der Zündchemie geführt wird.

Ausgehend von diesen Erkenntnissen wurde eine Modifikation des CPI-Verfahrens am CFR-Prüfmotor vorgenommen. Mittels externer Aufladung und Ladeluftkühlung ist es möglich die CFR-Betriebsbedingungen jener von modernen Aggregaten anzunähern und eine signifikante Übereinstimmung der Vorentflammungstendenzen von mehr als 90% zu erzielen.

Zwischen den Ergebnissen des AFIDA und den Daten der modernen Versuchsträger lässt sich ebenfalls eine deutliche Korrelation mit einem Bestimmtheitsmaß von über 80 % aufzeigen.

Hinsichtlich der oberflächeninduzierten Vorentflammung (Glühzündung) haben umfassende experimentelle sowie numerische Untersuchungen unter anderem einen erheblichen Einfluss der Strömungsbedingungen auf das Glühzündungsverhalten aufgezeigt. Dementsprechend ist die Übertragbarkeit der Ergebnisse vom CFR-Motor (HSPI) auf die Glühzündungstendenzen am modernen Versuchsträger nicht ausreichend gegeben und bedarf zusätzlichen Forschungsaufwandes, welcher im Zuge dieses FVV-Vorhabens nicht mehr durchführbar war.

Eine Bewertung des Vorentflammungsverhaltens auf Grundlage der Kraftstoffzusammensetzung hat sich als unzureichend erwiesen. Die industriell einsetzbare, gaschromatografische Analyse (GC-Analyse) von Ottokraftstoffen schlüsselt die Komplexität der potenziellen Kraftstoffspezies nicht detailliert genug auf.



## Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung .....	1
1.1	Motivation .....	1
1.2	Zielsetzung des Forschungsvorhabens.....	2
2	Grundlagen .....	4
2.1	Oxidation von Kohlenwasserstoffen .....	4
2.1.1	Einfluss der Molekülstruktur.....	8
2.2	Reaktionskinetiksimulation.....	13
2.3	Numerische Strömungssimulation.....	14
2.3.1	Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen.....	16
2.3.2	Einspritzmodellierung .....	18
2.4	Selbstzündung im ottomotorischen Betrieb .....	19
3	Auswahl der Kraftstoffe .....	29
4	Methodik.....	33
4.1	Untersuchungen zur Reaktionskinetik am Einhubtriebwerk.....	33
4.2	Untersuchungen am AFIDA (Advanced Fuel Ignition Delay Analyzer) .....	35
4.3	Untersuchungen am seriennahen Einzylinder-Motor .....	38
4.3.1	Experimentelle Untersuchungen.....	38
4.3.2	Numerische Untersuchungen .....	43
4.4	Untersuchungen am CFR-Motor .....	45
4.5	Untersuchungen am Vollmotor.....	48
5	Ergebnisse und Diskussion .....	49
5.1	Analyse und Bewertung des Selbstzündungsverhaltens der Kraftstoffe.....	50
5.1.1	Kraftstoffbewertung auf Basis der Zündverzugszeit .....	50
5.1.2	Kraftstoffbewertung auf Basis des CFR Prüfmotors.....	55
5.2	Analyse der oberflächeninduzierten Vorentflammung .....	57
5.2.1	Bewertung am Einzylinder-Forschungsmotor .....	57
5.2.2	Korrelation mit dem CFR-Prüfverfahren (HSPI) .....	76
5.3	Analyse der Gasphasenvorentflammung .....	80
5.3.1	Bewertung am Einzylinder-Forschungsmotor .....	80
5.3.2	Korrelation mit dem CFR-Prüfverfahren (CPI) .....	90
5.3.3	Korrelation mit dem AFIDA-Prüfverfahren.....	97
5.4	Analyse einer Vorentflammungsbewertung auf Basis der Stoffzusammensetzung	104
6	Zusammenfassung und Schlussfolgerungen .....	109
7	Anhang.....	112
7.1	Literaturverzeichnis.....	112
7.2	Abbildungsverzeichnis .....	122
7.3	Tabellenverzeichnis .....	128





## 1 Einleitung

### 1.1 Motivation

Eine stetig strenger werdende Abgasgesetzgebung führt zu zunehmenden Herausforderungen an die Motorenentwicklung. Vorrangiges Entwicklungsziel bei der Konzeption neuer Fahrzeuge bleibt die Verringerung des Kraftstoffverbrauches und Senkung der Schadstoffemissionen bei gleichzeitig erhöhter Fahrdynamik [1].

Bei Ottomotoren hat sich die Kombination aus Direkteinspritzung, Downsizing und Aufladung in den vergangenen Jahren als weltweit einsetzbare Technologie zur Erzielung der geforderten Verbrauchsminderung durchgesetzt. Neben den motorischen Maßnahmen zur CO<sub>2</sub>-Reduktion gerät zunehmend der Kraftstoff in den Fokus der Entwicklung. Alternative Kraftstoffe auf biogener Basis wie etwa Ethanol bieten als Beimischkomponente signifikantes Potenzial zur Treibhausgasreduktion, sofern diese durch regenerative Herstellungsprozesse bereitgestellt werden. Zusätzlich besitzen alkoholische Kraftstoffe durch ihre hohe Klopfresistenz ein erhebliches Wirkungsgradpotenzial im Verbrennungszyklus.

Die Bedeutung von Biokraftstoffen wird verdeutlicht durch die Richtlinie 2003/30/EG der Europäischen Union, in welcher ein energetischer Anteil von 5.75 % von Biokraftstoffen am Gesamtkraftstoffverbrauch festgelegt wurde. Für das Jahr 2020 sieht die Europäische Union im gesamten Transportsektor einen Anteil an erneuerbaren Energien von 10 %, gemessen am Gesamtenergieverbrauch vor [2].

Moderne Kraftstoffe mit biogenen Anteilen (Ethanol, ETBE etc.) als auch gesteigerte Downsizing-Grade führen zu neuen Herausforderungen durch das Auftreten von Verbrennungsanomalien. Eine Vielzahl von Untersuchungen hat bereits bestätigt, dass die bestehenden, genormten Kraftstoffkennzahlen Research-Oktanzahl (ROZ) und Motor-Oktanzahl (MOZ) das Verbrennungsverhalten von Kraftstoffen nicht in vollem Umfang abdecken. So zeigt sich, dass neben einer unzureichenden Bewertung des Vorentflammungsverhaltens eines Kraftstoffes auch das Klopfverhalten eines Kraftstoffes in modernen Ottomotoren signifikant von jenem laut ROZ und im speziellen MOZ zu erwartendem abweicht [3–10].

Irregulären Verbrennungsphänomenen liegen dabei verschiedene Auslösemechanismen zugrunde [6, 11–14]. Im FVV Vorhaben M1059 „Kraftstoffkennzahlen Biofuels Otto-DI“ [15] konnte ein Vorschlag zur Bestimmung von Vorentflammungskennzahlen mittels eines Einzylinder-Forschungsmotors abgeleitet werden, welche insbesondere für Benzinmischkraftstoffe mit hohen Anteilen an Bio-Ethanol oder anderen Alkoholkomponenten anwendbar sind. Der flächendeckende Einsatz eines neuen motorischen Verfahrens mit ebenfalls neuem Versuchsträger zur Kraftstoffqualitätskontrolle ist jedoch eher unrealistisch. Eine realistische Möglichkeit einer industriellen Akzeptanz stellt die Umsetzung eines motorischen Prüfverfahrens auf einem weltweit etablierten CFR-Triebwerk (Cooperative Fuel Research) dar.

Im Zuge des an der TU Wien bearbeiteten FVV Vorhabens M1078 „Downsizingkraftstoff“ [16] wurde ein bestehender CFR-Motor zur Entwicklung neuartiger Kraftstoffkennzahlen auf innere Gemischbildung umgerüstet. Die darauf basierenden Kennzahlen dienen der Kraftstoffcharakterisierung bezüglich oberflächen- bzw. gasphaseninduzierter Selbstzündungen (HSPI – Hot Surface Pre-Ignition, CPI – Compression Pre-Ignition). Zusätzlich beschreibt die DOZ (Direkteinspritzende Oktanzahl) das Klopfverhalten ottomotorischer Kraftstoffe hohen Alkoholanteils. Die Validierung der CPI auf Basis alkoholischer Kraftstoffe zeigt hierbei vielversprechende Ergebnisse.

Ein weiteres Prüfverfahren mit dem Potenzial eines industriellen Einsatzes basiert auf der Messung der nicht-vorgemischten Zündverzugszeit in einer automatisierten Vorrichtung, folgend als AFIDA bezeichnet. Falls dieser Messmethodik eine ausreichende Korrelation bzgl. der Vorentflammungsbewertung eines Kraftstoffes im motorischen Betrieb nachgewiesen werden kann, stünde ein automatisiertes Messverfahren der Kraftstoffcharakterisierung zur Verfügung.

### 1.2 Zielsetzung des Forschungsvorhabens

Das Forschungsvorhaben verfolgte zwei Hauptziele. Ersteres war die Entwicklung eines Vorschlages für ein industriell einsetzbares Verfahren zur **Charakterisierung des Glühzündungs- und Vorentflammungsverhaltens von Ottokraftstoffen**. Dies ist insbesondere deshalb von Bedeutung, da die verstärkte Zumischung von Alkoholen zum Benzinkraftstoff eine Anpassung des Benzingrundkraftstoffes notwendig macht, um einen Kraftstoff normgerecht (EN228) darzustellen. Als Beispiel sei hier die Änderung des Siedeverlaufes von Benzin mit erhöhten Ethanol-Anteilen erwähnt, wodurch leichtflüchtige HC-Komponenten durch schwerere Komponenten ersetzt werden müssen. Es liegt die Vermutung nahe, dass durch diese Adaptierung des Grundkraftstoffes ein signifikanter Einfluss des Vorentflammungsverhaltens hervorgerufen wird.

Für die industrielle Anwendung eines CFR-basierten Verfahrens sollten die während des Vorgängerprojektes M1078 [16] entwickelten Methoden auf Basis des CFR-Motors mit den Erkenntnissen des Projekts M1059 [15] an einem Einzylinder-Motor mit realer Brennraumgeometrie abgeglichen und optimiert werden. Parallel dazu wurden verschiedene Betriebsbedingungen für den AFIDA untersucht, um gegebenenfalls ein geeignetes Verfahren zur Bestimmung der Vorentflammungsneigung auf dieser Vorrichtung zu definieren.

Zweites Hauptziel war die Weiterentwicklung und Verifizierung der im Vorgängerprojekt „Kraftstoffkennzahlen Biofuels Otto-DI“ entwickelten Methode für zusätzliche Kraftstoffkomponenten. Damit sollte eine breitere Datenbasis der Korrelationen geschaffen werden, die eine prädiktive Bestimmung von anormalen Verbrennungsphänomenen ermöglicht. Dazu wurden Untersuchungen an beiden Versuchsträgern (Einzylinder seriennahe Brennraumge-

ometrie und CFR-Motor) mit einer umfassenden Kraftstoffmatrix (>30 Kraftstoffe) durchgeführt.

Um ein besseres Verständnis der physikalischen und chemischen Vorgänge zu erlangen, welche zur Auslösung einer Vorentflammung führen, wurden numerische Simulationen zum Einspritzverhalten und der Gemischaufbereitung sowie Untersuchungen zur Reaktionskinetik durchgeführt.

Zur Validierung der entwickelten Prüfmethode zur Bestimmung der kraftstoffspezifischen Vorentflammungsneigung diente ein modernes aufgeladenes Dreizylinder-Serienaggregat.

## 2 Grundlagen

### 2.1 Oxidation von Kohlenwasserstoffen

Der zeitliche Verlauf der chemischen Reaktion von Kohlenwasserstoffen mit Sauerstoff bis hin zum chemischen Gleichgewicht setzt sich aus einer Vielzahl an Reaktionspfaden zusammen. Alle Reaktionspfade laufen in unterschiedlichen Zeitskalen ab, je nachdem welche Gastemperatur vorliegt, welche Aktivierungsenergien in den einzelnen Elementarreaktionen dieser Pfade aufgebracht werden müssen und in welcher Konzentration die Edukte im Gemisch vorhanden sind [17]. Die Geschwindigkeit einer chemischen Reaktion lässt sich nach Arrhenius [17] unter Einbeziehung des Boltzmann-Faktors durch

$$k_r = A e^{-\frac{E_A}{R \cdot T}} \quad (2.1)$$

beschreiben. Darin ist die Geschwindigkeitskonstante der Reaktion  $k_r$ , der Stoßfaktor  $A$ , die Aktivierungsenergie  $E_A$ , die universelle Gaskonstante  $R$  und die Systemtemperatur  $T$  enthalten. Es ist zu beachten, dass die Aktivierungsenergie im Wesentlichen eine Temperaturschwelle darstellt. Die Energie, die ein Stoßpartner in eine Reaktion hineinträgt, hängt nach der kinetischen Gastheorie maßgebend von seiner Geschwindigkeit ab, welche wiederum durch dessen Temperatur bestimmt ist [18, 19]. Somit lässt sich ableiten, dass hohe Aktivierungsenergien erst bei höheren Temperaturen überwunden werden und niedrige Aktivierungsenergien bereits bei geringeren Temperaturen überschritten werden können. Nach diesem Sachverhalt lassen sich bestimmte Reaktionspfade auch gewissen Temperaturregimen zuordnen. Typischerweise erfolgt diese Einteilung nach Temperaturregimen für die Oxidation von Kohlenwasserstoffen in zwei Bereiche, dem Niedertemperaturbereich und dem Hochtemperaturbereich [20–23]. Zusätzlich ist es zum Zwecke einer anschaulichen Erklärung der Interaktionen beider Temperaturbereiche notwendig einen dritten Bereich, den Intermediärbereich, zu definieren.

Die Anzahl der möglichen Elementarreaktionen steigt zwar grundsätzlich mit Zunahme der Kohlenstoffatome eines Kraftstoffes, allerdings lassen sich gewisse Reaktionsgruppen definieren, welche die Edukte und Produkte einer Elementarreaktion auf gemeinsame Merkmale reduzieren und zusammenfassen [20, 24, 25].

Die Gruppen des dominierenden Reaktionspfades im **Niedertemperaturbereich** sind in Abbildung 2-1 schematisch dargestellt.



Abbildung 2-1. Schematische Darstellung des Niedertemperaturpfades der Oxidation von Kohlenwasserstoffen.

Ausgehend von einem beliebigen Kohlenwasserstoff, aufgeteilt in Alkylrest und Wasserstoffatom, findet durch die Reaktion mit einem Radikal (Hydroxid, Wasserstoffperoxid, etc.) eine Abspaltung des dargestellten Wasserstoffatoms statt [20, 24]. Das daraus hervorgehende Alkylradikal bildet unter Anlagerung von molekularem Sauerstoff ein Alkylperoxid-Radikal. Dieses Molekül durchläuft eine interne Wasserstoffumlagerung, woraus ein Alkylhydroperoxid hervorgeht [20, 24]. Schließlich lagert sich erneut Sauerstoff an und weitere Zwischenschritte führen zum Zerfall des partiell oxidierten Kraftstoffes und zur Bildung von zwei Hydroxid-Radikalen. Dieser Reaktionspfad bildet nicht den einzig möglichen Ablauf im Niedertemperaturpfad ab, stellt aber die dominierende Kombination aus charakteristischen Reaktionsgruppen dar [20, 24, 26]. Hierbei ist hervorzuheben, dass ein sehr reaktives Radikal benötigt wird um die Reaktionskette zu initiieren welche schließlich zur Produktion zweier Radikale führt. Diese initiieren wiederum weitere Oxidationsketten, wodurch es zu einer Verzweigung von Reaktionspfaden kommt. Daher wird solch ein Reaktionspfad auch als kettenverzweigend charakterisiert [27, 28].

Ein wichtiges Merkmal des kettenverzweigenden Niedertemperaturpfades ist die mit steigender Temperatur exponentiell abnehmende Zündverzugszeit, wie Anhand des Arrhenius-Ansatzes (2.9) veranschaulicht wird.

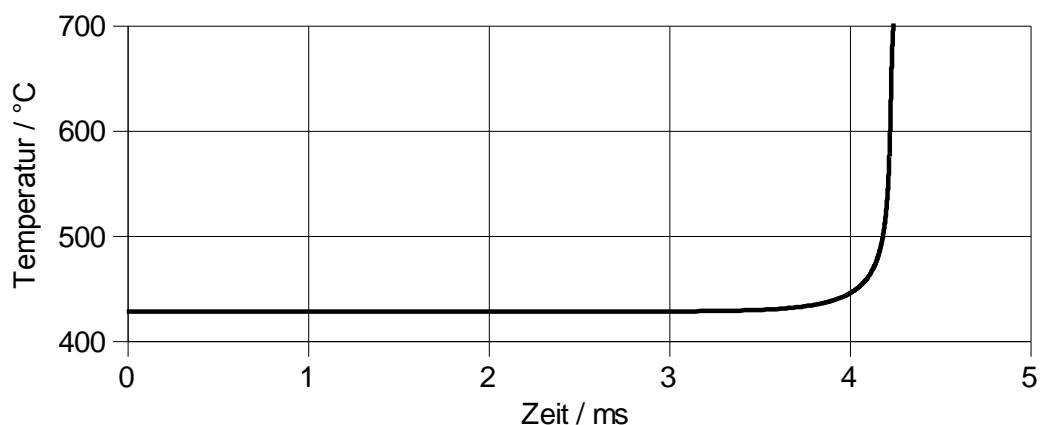


Abbildung 2-2. Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan/Luft-Gemisch bei 20 bar und 430 °C mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [20].

In Abbildung 2-2 ist am Beispiel von n-Heptan der Temperaturverlauf einer Zündung im Niedertemperaturbereich zu sehen. Nach etwa 4 ms stellt sich infolge der zuvor beschriebenen Reaktionen und der damit verbundenen Wärmefreisetzung eine Zündung des Luft-Kraftstoff-Gemisches ein.

Im **Intermediärbereich** ereignet sich eine Abweichung vom zuvor diskutierten Pfad. Die interne Wasserstoffumlagerung wird mit steigender Temperatur vom Niedertemperaturbereich hin zum Intermediärtemperaturbereich durch Konsumierung des Alkylperoxid-Radikals oder des Alkylhydroperoxid Radikals in anderen Reaktionen zunehmend außer Kraft gesetzt [20, 23, 24, 26]. Dieser Sachverhalt ist in Abbildung 2-3 beispielhaft dargestellt.

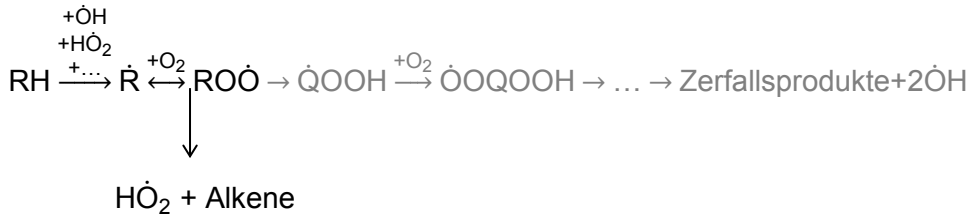


Abbildung 2-3. Schematische Darstellung des Intermediärtemperaturpfades der Oxidation von Kohlenwasserstoffen.

Der gegenüber Abbildung 2-1 zusätzliche Reaktionspfad zeigt nur einen der möglichen konkurrierenden Pfade und führt insgesamt nicht zu einer Zunahme der Hydroxid-Radikale. Andere Reaktionspfade resultieren sogar in einem Abbruch der Reaktionsketten. Daher hat der Intermediärtemperaturbereich ebenfalls einen entschleunigenden Charakter.

In Abbildung 2-4 ist, erneut am Beispiel von n-Heptan, der Temperaturverlauf einer Zündung im Intermediärtemperaturbereich zu sehen.

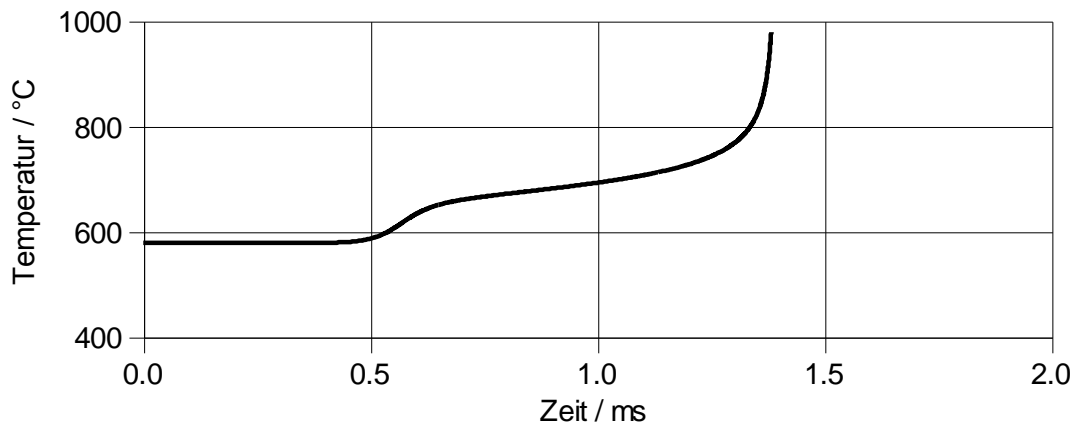


Abbildung 2-4. Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan/Luft-Gemisch bei 20 bar und 580 °C mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [20].

Nach etwa 0.5 ms ist ein Temperaturanstieg aufgrund der im Niedertemperaturbereich dominierenden Reaktionen aus Abbildung 2-1 zu beobachten. Durch die Temperaturerhöhung verlagern sich Reaktionen zunehmend zum konkurrierenden Pfad aus Abbildung 2-3. Dies verlangsamt die Wärmefreisetzung des Systems, weshalb die Temperaturerhöhung in Abbil-

dung 2-4 zwischen 0.6 ms und 1.2 ms eine geringere Steigung annimmt als zwischen 0.5 ms und 0.6 ms. Diese Charakteristik wird als Zweistufenzündung bezeichnet.

Bei Zunahme der Gemischtemperatur hin zum **Hochtemperaturbereich** gewinnen energetisch aufwendigere Zerfallsreaktionen des Alkylradikals an Bedeutung. In diesem Fall kommt es, wie in Abbildung 2-5 dargestellt, durch die Bildung von kleineren Kohlenwasserstoffen und anschließender Oxidation zu einem bisher nicht betrachteten Reaktionspfad, in welchem der Kraftstoff umgesetzt wird.

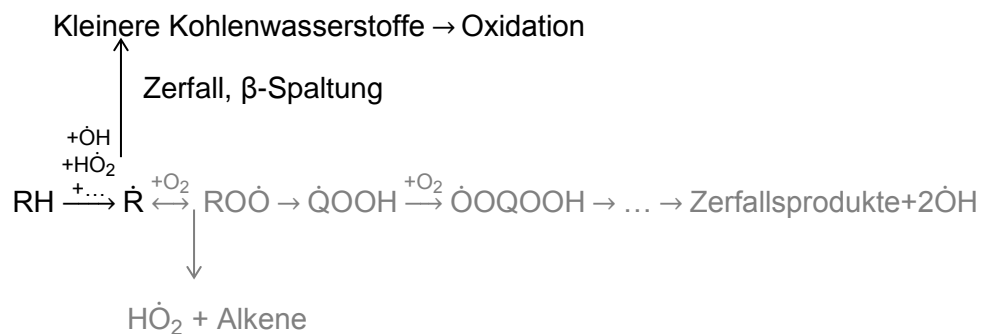


Abbildung 2-5. Schematische Darstellung des Hochtemperaturpfades.

In Abbildung 2-6 ist wiederum am Beispiel von n-Heptan der Temperaturverlauf einer Zündung im Hochtemperaturbereich zu sehen.

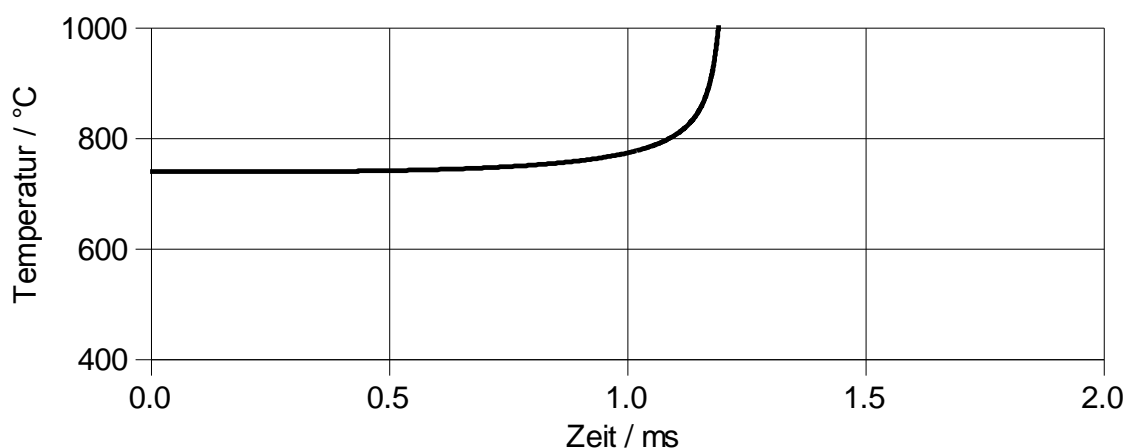


Abbildung 2-6. Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan/Luft-Gemisch bei 20 bar und 740 °C mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [20].

Die zweistufige Zündungscharakteristik ist in diesem Verlauf nicht mehr zu erkennen. Die Reaktionen des Hochtemperaturpfades dominieren und es liegen keine unterschiedlichen, konkurrierenden Pfade mehr vor. Daher zündet das Luft-Kraftstoff-Gemisch nach etwa 1 ms ohne ein Zwischenplateau wie in Abbildung 2-4.

Ebenso wie im Niedertemperaturbereich, ist der Hochtemperaturbereich mit zunehmender Temperatur von einer exponentiellen Abnahme der Zündverzugszeit gekennzeichnet.

Exemplarisch ist in Abbildung 2-7 die Einteilung der Zündverzugszeiten von n-Heptan in die oben diskutierten drei Bereiche dargestellt. Die Daten wurden in einer nulldimensionalen reaktionskinetischen Simulation mit einem konstanten Druck von 20 bar und einem rel. Luft-Kraftstoff-Verhältnis von 1.0 berechnet. Der zugrundeliegende Reaktionsmechanismus ist aus [20] entnommen.

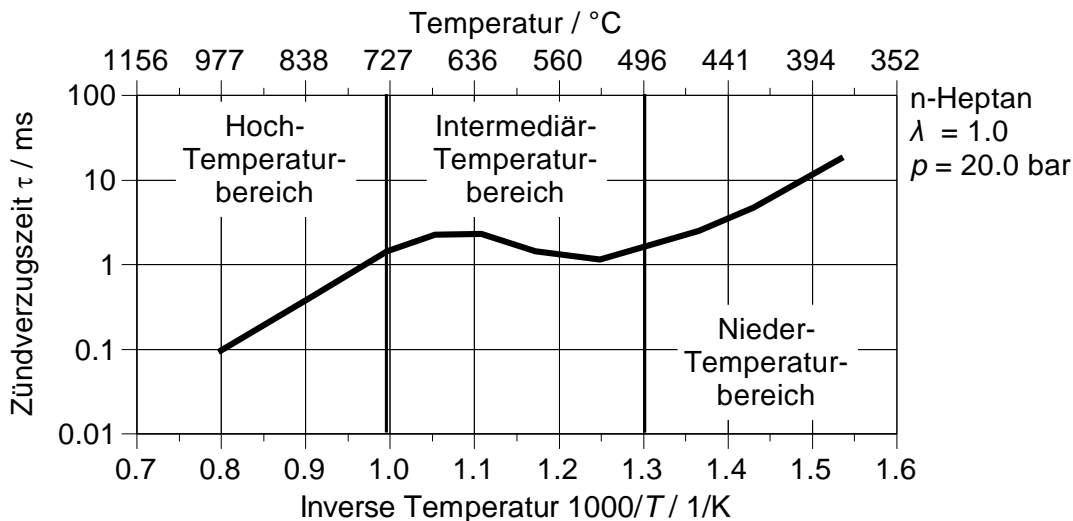


Abbildung 2-7. Simulierte Zündverzugszeiten für ein stöchiometrisches n-Heptan/Luft-Gemisch bei 20 bar mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [20].

In Abbildung 2-7 lassen sich die Charakteristiken der einzelnen Temperaturbereiche anschaulich betrachten. Der zunächst exponentiell abnehmenden Zündverzugszeit zwischen 380 °C und 500 °C folgt eine Zunahme dieser im Intermediärtemperaturbereich, bedingt durch den Wechsel von kettenverzweigenden Reaktionen zu kettenfortführenden Pfaden.

Dieses Verhalten wird aufgrund des Vorzeichenwechsels der Temperaturabhängigkeit als NTC-Charakteristik (**n**egative **t**emperature **c**oefficient) bezeichnet und stellt eine für motorische Anwendungen folgenreiche Abweichung vom Arrhenius-Verhalten dar. Ab Temperaturen um die 730 °C, ist deutlich der Einfluss jener Reaktionen mit hoher Aktivierungsenergie zu erkennen. Es stellt sich somit erneut eine exponentielle Abnahme der Zündverzugszeit in Abhängigkeit der Temperatur ein.

### 2.1.1 Einfluss der Molekülstruktur

In Abhängigkeit der Molekülstruktur eines Kohlenwasserstoffes können die zuvor ausgeführten Reaktionen eine unterschiedliche Gewichtung einnehmen.



Im Rahmen von ottomotorischen Anwendungen sind hierbei im Wesentlichen folgende Kohlenwasserstoffgruppen zu betrachten:

- Alkane oder Paraffine sind gekennzeichnet durch geradlinige einfach gebundene (gesättigte) Kohlenstoffketten.
- Iso-Alkane oder iso-Paraffine unterscheiden sich von Alkanen durch verzweigte Kohlenstoffketten.
- Alkene oder Olefine haben eine oder mehrere Doppelbindungen (ungesättigt) zwischen zwei C-Atomen.
- Zyklische Moleküle weisen eine Ringstruktur auf, die entweder nur aus Einfachbindungen (gesättigt) zwischen den C-Atomen besteht oder zusätzlich Doppelbindungen (ungesättigt) zwischen den C-Atomen aufweist. Letztere Moleküle werden Aromaten genannt.
- Alkohole kennzeichnen sich durch die Anwesenheit einer OH-Gruppe in Verbindung mit einem C-Atom.

### Kohlenstoffkettenlänge

Grundsätzlich steigt die Reaktivität im Nieder- bis Intermediärtemperaturbereich mit steigender Kohlenstoffkettenlänge an (siehe Abbildung 2-8) [23, 29–34]. Die Ursache ist eine erhöhte Tendenz der Alkylperoxid-Radikale zur internen Wasserstoffumlagerung ( $\text{RO}\dot{\text{O}} \rightarrow \dot{\text{Q}}\text{OOH}$ ) und damit zur Kettenverzweigung [31, 35].

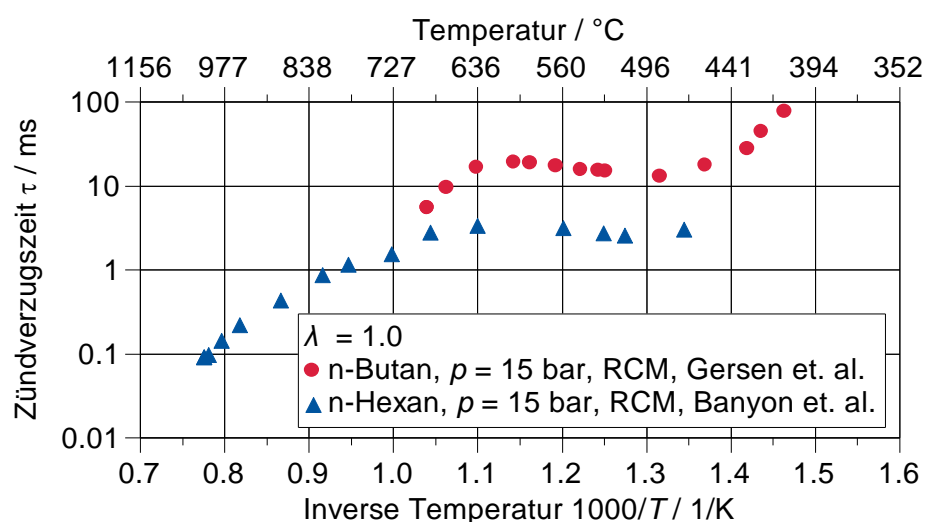


Abbildung 2-8. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Butan/Luft- und n-Hexan/Luft-Gemische bei 15 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk (RCM) [29, 30].

### Verzweigung

Die Verzweigung von Kohlenwasserstoffketten hat eine Absenkung der Reaktivität zur Folge (siehe Abbildung 2-9) [29, 31]. Bei Isomeren erschwert sich im Vergleich zum Alkan mit gleicher Kohlenstoffanzahl die zweite interne Wasserstoffumlagerung vom Alkylhydroperoxid ( $\dot{O}OQOOH \rightarrow \dots \rightarrow \text{Aldehyd} + \text{Ketonradikal} + 2\dot{O}H$ ). Dies hat eine Beeinträchtigung der kettenverzweigenden Reaktionspfade und somit eine Zunahme der Zündverzugszeiten zur Folge [36–39].

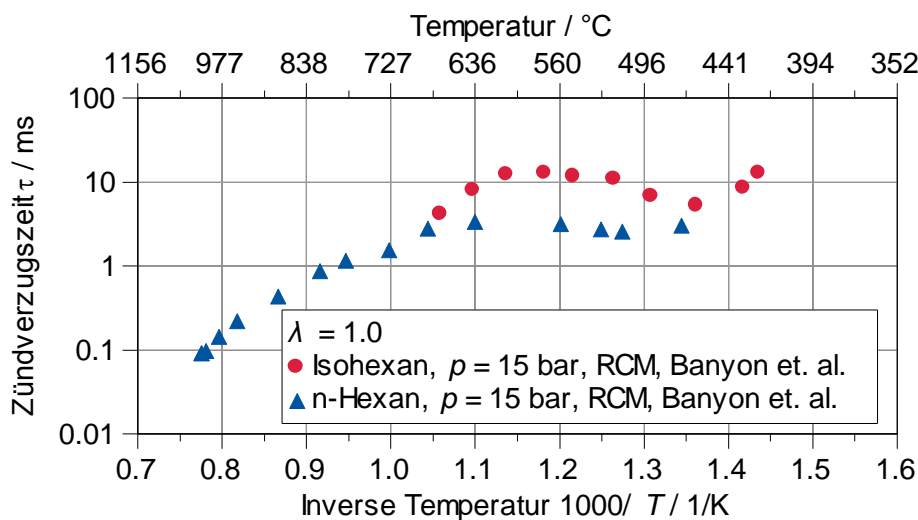


Abbildung 2-9. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan/Luft- und Isohexan/Luft-Gemische bei 15 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk [29].

### Doppelbindung

Prinzipiell üben Doppelbindungen eine schwächende Wirkung auf benachbarte Kohlenstoffwasserstoffbindungen aus [40]. Die Wasserstoffatome dieser Paarungen lassen sich im Vergleich zum gesättigten Alkan leichter aus der Bindung lösen. Im Nieder- und Intermediärtemperaturbereich führt dies aber zur Bildung stabilerer Alkyl-Radikale [40], wodurch sich letztlich eine verringerte Reaktivität des Kraftstoffes ergibt [40–43]. Im Zustand höherer Gastemperaturen wiederum führen die schwächeren Kohlenwasserstoffverbindungen insgesamt zu einer erhöhten Reaktivität des Moleküls. Folglich werden die Zündverzugszeiten im Hochtemperaturbereich abgesenkt [44, 45]. In Abbildung 2-10 wird dieser Sachverhalt anhand des  $C_6$ -Alkans und –Alkens verdeutlicht. Es ist zu sehen, dass die Punkte von n-Hexan im Hochtemperaturbereich auf die Werte von n-Hexan zulaufen. Der Einfluss der Druckunterschiede der dargestellten Daten auf die Zündverzugszeiten ist für diese qualitative Betrachtung zu vernachlässigen, wie anhand der blauen Symbole zu erkennen ist.

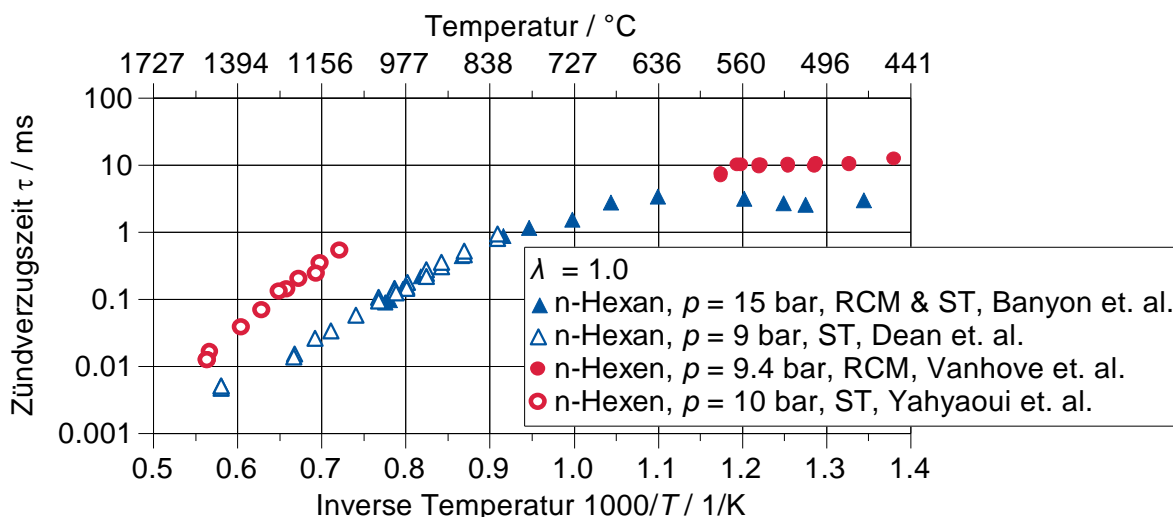


Abbildung 2-10. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan/Luft- und n-Hexen/Luft-Gemische bei 15 bar bzw. 9.4 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk und 9 bar Kompressionsenddruck gemessen im Stoßwellenrohr [29, 41, 44, 45].

### Gesättigte Ringe

Bei Kohlenwasserstoffringen mit Einfachbindungen verringert sich die Reaktionsrate der internen Wasserstoffumlagerung im Nieder- und Intermediärtemperaturbereich. Die Folge ist analog zur Isomerisierung eine Erhöhung der Zündverzugszeiten in diesen Temperaturregimen (siehe Abbildung 2-11).

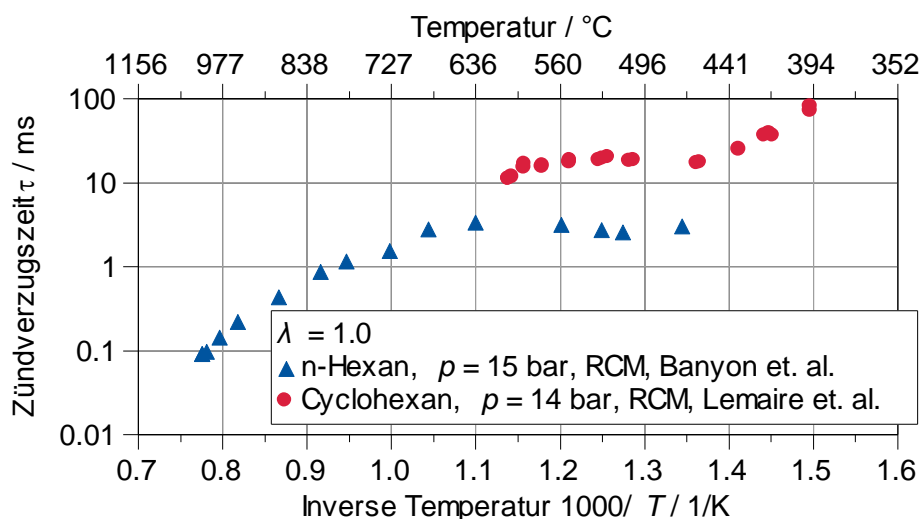


Abbildung 2-11. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan/Luft- und Cyclohexan/Luftäquivalent-Gemische bei 15 bar bzw. 14 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk [29, 46].

## Aromaten

Im Fall von ungesättigten Kohlenwasserstoffringen kommen zwei wesentliche Effekte zusammen. Zum einen bewirken die Doppelbindungen wie oben diskutiert eine Stabilisierung von Alkylradikalen nach erfolgter externer Wasserstoffabspaltung, zum anderen behindert die steife Ringstruktur die interne Wasserstoffumlagerung [47–49]. In Summe führen beide Effekte zu einer deutlichen Zunahme der Zündverzugszeiten, besonders im Nieder- und Intermediärtemperaturbereich (siehe Abbildung 2-12) [34, 48, 50, 51].

Die Druckunterschiede der dargestellten Daten heben die geringere Reaktivität von Toluol zusätzlich hervor. Wären die Messungen mit Toluol ebenfalls bei 40 bar durchgeführt worden, wären die Zündverzugszeiten sogar noch länger.

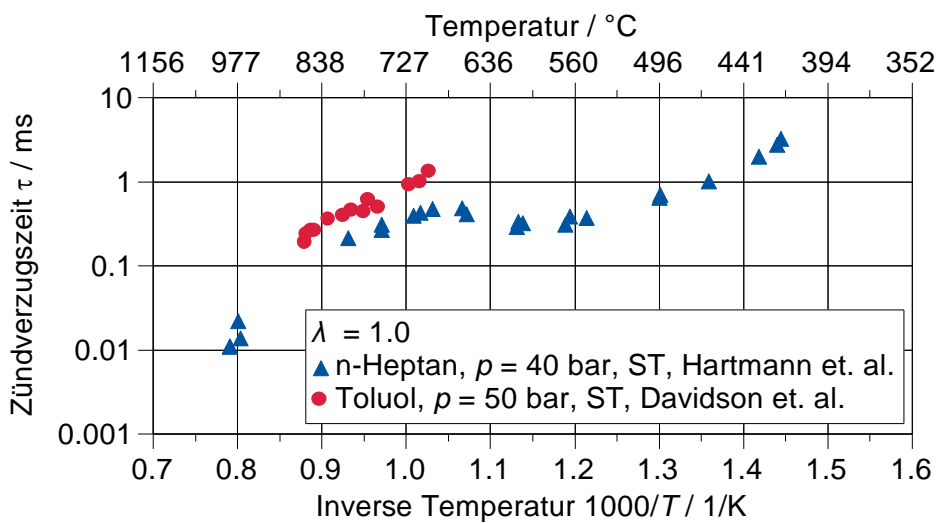


Abbildung 2-12. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Heptan/Luft- und Toluol/Luft-Gemische bei 40 bar bzw. 50 bar Kompressionsenddruck gemessen im Stoßwellenrohr [52, 53].

## Alkohole

In Anwesenheit einer Hydroxy-Gruppe (OH-Gruppe) erhöht sich die Wahrscheinlichkeit der initialen Wasserstoffabspaltung vom primären Kohlenstoffatom, da die Kohlenwasserstoffbindungen an diesem Atom durch die Wirkung der Hydroxy-Gruppe geschwächt sind [25]. Der weitere Reaktionspfad dieses Alkylradikals führt größtenteils nicht zur Bildung eines Alkylperoxy-Radikals und unterbindet somit konsekutive kettenverzweigende Reaktionen mit der Folge höherer Zündverzugszeiten im Nieder- und Intermediärtemperaturbereich (siehe Abbildung 2-13) [54–56]. Bei hohen Temperaturen hingegen führt die schwächende Wirkung der Hydroxy-Gruppe zu einer erhöhten Reaktivität, also kürzeren Zündverzugszeiten.

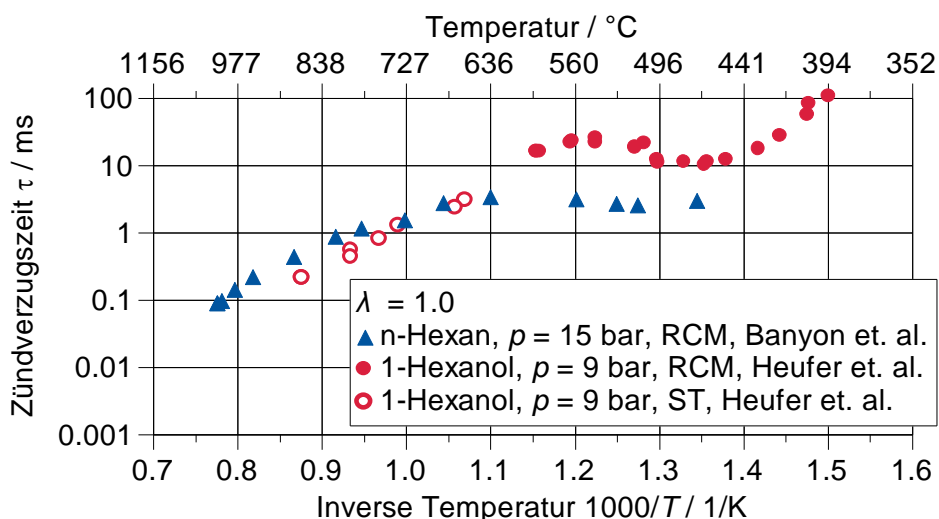


Abbildung 2-13. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan/Luft- und Hexanol/Luft-Gemische bei 15 bar bzw. 9 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk und im Stoßwellenrohr [29, 57].

## 2.2 Reaktionskinetiksimulation

Reaktionsmechanismen stellen den vollständigen Satz an Elementarreaktionen dar, der zur zeitlichen Auflösung der Reaktionskinetik der Kohlenwasserstoffoxidation notwendig ist. Dazu zählen in der praktischen Anwendung sowohl Polynome zur Beschreibung der thermodynamischen Reinstoffeigenschaften, also der spezifischen Wärmekapazität  $c_p^0$ , der Enthalpie  $H^0$  und der Entropie  $S^0$  als auch Parameter des Arrheniusansatzes zur Beschreibung der Geschwindigkeitskonstanten der Elementarreaktionen. Exemplarisch ist eine Reaktionsgleichung zwischen den Edukten  $A$  und  $B$  zu den Produkten  $C$  und  $D$  in Gleichung (2.2) dargestellt.



Darin ist die Stoffmenge der Reaktionspartner gekennzeichnet mit  $\nu$ . Ausgehend von dieser Reaktionsgleichung lässt sich die zeitliche Änderung der Konzentration  $[A]$  infolge der Vorwärtsreaktion berechnen zu

$$\left( \frac{d[A]}{dt} \right)_f = -\dot{\nu}_A k_f [A]^{\dot{\nu}_A} [B]^{\dot{\nu}_B} = \nu_A \omega_f \quad (2.3)$$

wobei  $\omega_f$  die Reaktionsgeschwindigkeit der Vorwärtsreaktion ist.

Analog lässt sich dieser Zusammenhang für die Rückwärtsreaktion aufstellen:

$$\left(\frac{d[A]}{dt}\right)_b = v_A k_b [C]^{v_C} [D]^{v_D} = v_A \omega_b \quad (2.4)$$

Definitionsgemäß ist die Reaktionsgeschwindigkeit der Gesamtreaktion  $\omega$  die Differenz zwischen den Geschwindigkeiten von Vorwärts- und Rückwärtsreaktion:

$$\omega_r = k_f [A]^{v_A} [B]^{v_B} - k_b [C]^{v_C} [D]^{v_D} \quad (2.5)$$

Zusammen mit diesem Satz an Gesetzmäßigkeiten und dem Arrhenius-Ansatz aus (2.9) lässt sich die Reaktionskinetik von Kohlenwasserstoffoxidation vollständig auflösen.

### 2.3 Numerische Strömungssimulation

Die Strömung eines kompressiblen, Newton'schen Fluides wird beschrieben durch Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Impuls zuzüglich der thermischen Zustandsgleichung. In der bis heute bekannten und verwendeten Form trägt die Impulsgleichung nach Navier und Stokes seinen Namen Navier-Stokes-Gleichung. Zur numerischen Lösung dieses Gleichungssystems werden die Differentialgleichungen üblicherweise mittels der Finite-Volumen-Methode diskretisiert.

In der Kontinuitätsgleichung (2.6) kommt die Erhaltung der Masse zum Ausdruck. Sie besagt, dass die Differenz der eingehenden und ausgehenden Massenströme eines Kontrollvolumens der Zunahme an Masse in diesem Volumen entspricht. Unter Verwendung der Einstein'schen Summenkonvention gilt für die Erhaltung der Masse, dass stets

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (2.6)$$

sein muss. Darin sind die Gasdichte  $\rho$ , die Zeit  $t$ , die Geschwindigkeitskomponenten  $u_i$  in Indexschreibweise und die Raumkoordinaten  $x_i$  in Indexschreibweise aufgeführt. Die Einstein'sche Summenkonvention ist eine vereinfachte Indexnotation, welche besagt, dass über solche Indizes summiert werden muss, die zweimal in einem Term auftreten. Diese Schreibweise erlaubt es zugunsten der besseren Leserlichkeit das Summenzeichen auszulassen.

Die Impulserhaltungsgleichung ist in gleicher Schreibweise in (2.7) zu sehen. Sie stellt den wesentlichen Kern der Bewegungsgleichung kompressibler Newton'scher Fluide dar.

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho g_i \quad (2.7)$$

Darin sind unter anderem der Spannungstensor  $\sigma_{ij}$  und die Komponenten der Gravitationsbeschleunigung  $g_i$  enthalten.

Der Druck- und Gravitationsterm auf der rechten Seite stellen die Volumenkräfte dar und der Spannungstensor beinhaltet die Kräfte infolge der Reibung an den Grenzen des Kontrollvolumens. Aus der Anwendung des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik auf das hier zugrunde gelegte Kontrollvolumen lässt sich die Energieerhaltungsgleichung in (2.8) ableiten.

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\lambda_i}{c_p} \frac{\partial h}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial p}{\partial t} + u_i \frac{\partial p}{\partial x_i} + \dot{\omega}_h \quad (2.8)$$

Darin sind als neue Größen die spezifische Enthalpie  $h$ , die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_i$  und ein Energiequellterm  $\dot{\omega}_h$  aufgeführt.

Die Komplexität einer Fluidströmung wird bereits durch diese Differentialgleichungen angedeutet. Noch deutlicher wird diese Charakteristik anhand der Darstellung des Energiespektrums einer turbulenten Strömung, wie sie schematisch in Abbildung 2-14 zu sehen ist.

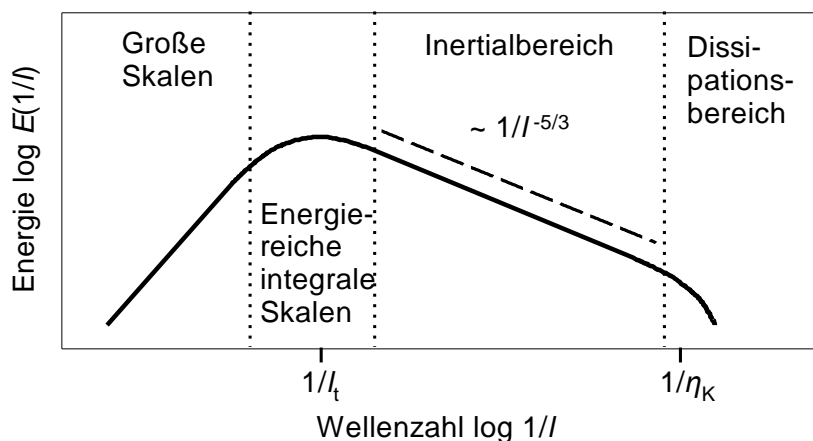


Abbildung 2-14. Schematische Darstellung des Energiespektrums einer turbulenten Strömung mit der üblichen Einteilung der turbulenten Skalen [58], entnommen aus [59].

Die energiereichen Wirbel mit einer integralen turbulenten Länge  $l_t$  entnehmen Ihre Energie aus der Hauptströmung und zerfallen anschließend durch Reibung in kleinere und energieärmere Strukturen bis hin zu den kleinsten Wirbeln mit der Kolmogorov-Länge  $\eta_K$ . Diese Energiekaskade erstreckt sich über mehrere Größenordnungen der Wirbelgrößen im Inertialbereich. Eine Auflösung des gesamten Turbulenzspektrums in Strömungssimulationen setzt also eine räumliche Diskretisierung bis hin zur Kolmogorov-Länge voraus, was für die Mehrheit praktischer Anwendungen nach heutigem Stand der Technik nicht durchführbar ist. Aus diesem Grund führt man sogenannte Turbulenzmodelle ein, welche ein breites Spektrum der Wellenzahlen modellieren, sodass diese nicht mehr räumlich aufgelöst werden müssen. Die beiden am häufigsten eingesetzten Varianten der Navier-Stokes-Gleichung sind dabei die sogenannte Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichung (engl. RANS – Reynolds-averaged Navier-Stokes equation) und die gefilterte Gleichung im Rahmen der Grobstruktursimulation (engl. LES – Large eddy simulation).

### 2.3.1 Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen

Eine Möglichkeit, die chaotische Natur einer turbulenten Strömung auf ein numerisch einfacher handhabbares Maß zu reduzieren ist die zeitliche Mittelung der turbulenten Fluktuationen. Dieses Verfahren ist 1984 von Reynolds in [60] erstmals vorgestellt worden und beruht auf der Idee, die Erhaltungsgrößen in einen zeitlichen Mittelwert und eine statistische Fluktuation aufzuteilen, sodass der zeitlichen Mittelwert der Fluktuationen verschwindet. Schematisch ist diese Trennung in Abbildung 2-15 dargestellt.

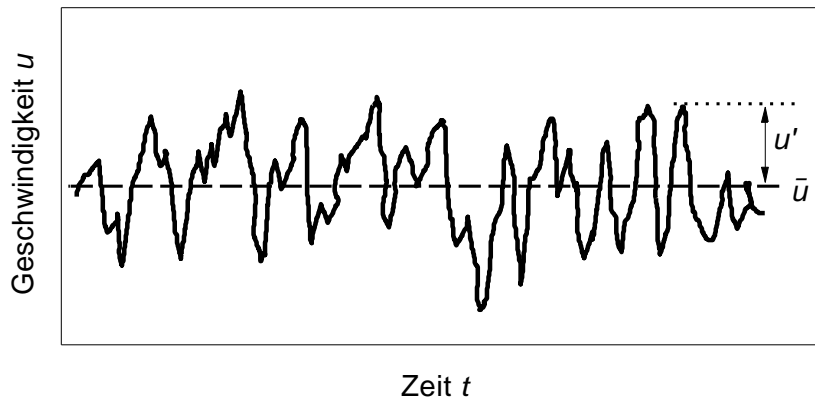


Abbildung 2-15. Schematische Darstellung der Aufteilung der Strömungsgeschwindigkeit in zeitlichen Mittelwert und zeitliche Schwankungsbreite.

Der Verlauf der Strömungsgeschwindigkeit in Abbildung 2-15 ist beispielhaft zur Veranschaulichung der Mittelung gewählt. Für eine zunächst beliebige Größe ist die Aufteilung in Gleichung (2.9) gegeben.

$$\varphi(x,t) = \bar{\varphi}(x,t) + \varphi'(x,t) \quad \text{mit } \varphi \in \{u_i; p; \dots\} \quad (2.9)$$

Mit der Mittelungsvorschrift für  $\bar{\varphi}(x,t)$  gemäß Favre [61] werden dabei Dichteänderungen berücksichtigt (Gleichung (2.10)).

$$\bar{\varphi} = \frac{\bar{\rho}\varphi}{\bar{\rho}} \quad (2.10)$$

Unter Berücksichtigung dieser Vorschrift folgt aus der Mittelung der Navier-Stokes-Gleichung nach dem Vorbild von Reynolds die Gleichung (2.11).

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \tilde{\mu} \left( \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial\tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) - \bar{\rho}\overline{u_i' u_j'} \right) - \frac{\partial\bar{p}}{\partial x_i} + \bar{\rho}g_i \quad (2.11)$$

Wie oben beschrieben fallen in Gleichung (2.11) Mittelwerte der statistischen Fluktuationen weg, da diese im Mittel den Wert 0 besitzen. Ein Term in Gleichung (2.11) beinhaltet allerdings weiterhin Schwankungsgrößen.



Der Ausdruck  $\overline{u_i' u_j'}$  ist die Korrelation der statistischen Schwankungen und lässt sich nicht durch die zeitliche Mittelung eliminieren. Diese Korrelation wird auch als Reynolds'scher Spannungstensor bezeichnet und lässt sich mit Hilfe des Ansatzes von Boussinesq in Zusammenhang setzen mit den örtlichen Gradienten der mittleren Strömungsgeschwindigkeit (Gleichung (2.12)).

$$-\overline{\rho u_i' u_j'} = \mu_t \left( \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left( \bar{\rho} k + \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_i} \right) \quad (2.12)$$

Nach diesem Modell führen die turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen zu einem erhöhten Impulsaustausch zwischen den Teilchen einer Strömung was sich effektiv in einer erhöhten Viskosität äußert. Diese erhöhte Viskosität wird nach Boussinesq auch als turbulente Viskosität  $\mu_t$  bezeichnet. Weiterhin ist in diesem Ansatz die turbulente kinetische Energie  $k$  zu finden. Diese lässt sich veranschaulichen als integrale Energie aller turbulenten Längenskalen zwischen den energiereichsten Wirbeln bis hin zur Kolmogorov-Länge aus Abbildung 2-14. Zur Berechnung der turbulenten Viskosität gibt es eine Vielzahl an Turbulenzmodellen. Ein wichtiges Unterscheidungsmerkmal dieser Modelle ist dabei die Anzahl der Transportgleichungen, die in solchen Modellen eingeführt werden. Im Rahmen dieser Arbeit kommen ausschließlich sogenannte Zweigleichungsmodelle zum Einsatz, also Modelle mit zwei Differentialgleichungen zur Beschreibung des Transportes turbulenter Größen.

### RNG $k$ - $\varepsilon$ Turbulenzmodell

Das RNG  $k$ - $\varepsilon$  Turbulenzmodell besitzt als turbulente Erhaltungsgrößen die bereits eingeführte turbulente kinetische Energie  $k$  und die turbulente Dissipation  $\varepsilon$ . Der Zusammenhang zwischen diesen statistischen Eigenschaften einer turbulenten Strömung und der turbulente Viskosität ist wie folgt:

$$\mu_t = C_\mu \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.13)$$

Das RNG  $k$ - $\varepsilon$  Turbulenzmodell (**R**enormalization **g**roup) basiert ursprünglich auf dem Standard  $k$ - $\varepsilon$  Modell, welches von Launder und Jones in [62] vorgestellt wurde und später von Launder und Sharma in [63] mit der heute bekannten Standardparametrisierung veröffentlicht wurde. Eine Weiterentwicklung des Standard  $k$ - $\varepsilon$  Modells ist das RNG  $k$ - $\varepsilon$  Turbulenzmodell von Yakhot et al. [64].

Die Verwendung von  $k$  und  $\varepsilon$  hat Ihren Vorteil für vollturbulente, also freie Strömungen in Abwesenheit von festen Oberflächen. In der Nähe solcher Objekte, bilden sich Grenzschichtströmungen aus, deren Turbulenzniveau mit  $k$ - $\varepsilon$  Turbulenzmodellen überschätzt wird.

Für Anwendungen, in welchen eben solche Grenzschichtströmungen eine Auflösung erfordern, eignen sich Turbulenzmodelle, die sich Anstelle der turbulenten Dissipation  $\varepsilon$  eher der turbulenten Frequenz  $\omega$  bedienen.

### ***k*- $\omega$ Turbulenzmodell**

Zur Veranschaulichung der *k*- $\omega$  Modelle wird hier das *k*- $\omega$  Modell nach Wilcox [65] beschrieben. In diesem Turbulenzmodell wird die turbulente Viskosität über

$$\mu_t = \bar{\rho} \frac{k}{\omega} \quad (2.14)$$

beschrieben. Wie für alle Turbulenzmodelle gilt auch für das *k*- $\omega$  Modell nach Wilcox, dass es bestimmte Stärken und Schwächen hat, weshalb es sich nur für bestimmte technische Anwendungen eignet. Im Gegensatz zum *k*- $\varepsilon$  Modell zeichnet sich das *k*- $\omega$  Modell durch eine hohe Ergebnisgüte im wandnahen Bereich aus, liefert allerdings weniger akkurate Vorhersagen in freien turbulenten Strömungen [66]. Eine zielführende Vereinigung der Stärken beider Modelle nahm Menter vor, woraus das *k*- $\omega$  SST-Modell hervorging [67]. In diesem Modell werden mittels einer Gewichtungsfunktion die Entfernung der Strömung von einer festen Oberfläche und der damit einhergehende Einfluss auf den Turbulenzgrad berücksichtigt. Daher kommt im Rahmen dieser Arbeit das *k*- $\omega$  SST-Modell zum Einsatz. Auf eine genaue Darstellung der Gleichungen wird hier verzichtet. Die einzelnen Differentialgleichungen und Hilfsfunktionen können aus [67] entnommen werden.

### **2.3.2 Einspritzmodellierung**

Die numerische Simulation der Einspritzung einer flüssigen Phase in den mit Gas gefüllten Brennraum vollzieht sich nach aktuellem Stand der Technik grundlegend anhand einer Lagrange'schen Beschreibung der Bewegung, sogenannter Parcels [68]. Ein Parcel besteht dabei aus einer großen Anzahl an physikalischen Tropfen mit identischer Ausdehnung, Masse, Impuls, Temperatur und Stoffzusammensetzung. Das statistische Grundgerüst für die Annahme, dass solch ein Parcel die tatsächlichen Tropfen hinreichend genau abbildet, entstammt der sogenannten Monte-Carlo Methode [68], einem statistischen Verfahren zur numerischen Abschätzung der Lösung eines Problems, dessen exakte Lösung zu aufwendig oder nicht möglich ist. Ein Parcel stellt somit einen virtuellen, statistisch repräsentativen Tropfen dar.

Die Bewegung solch eines Parcels wird dabei wesentlich durch dessen Interaktion mit dem Gas und dessen Strömung im Zylinder beeinflusst. Um diese Interaktion simulieren zu können müssen Modelle zur Beschreibung des Strömungswiderstandes, der turbulenten Dispersion, des Strahlaufbruchs, der Verdampfung, der Kollision und der Tropfen-Wand Interaktion

herangezogen werden. Im Folgenden werden diese Modelle in aller Kürze beschrieben. Für eine genauere Ausführung der Modelle und deren Hintergründe wird entsprechend auf Literatur verwiesen.

Nachdem ein Parcel in der Simulation mit einem Impulsvektor und einem definierten thermodynamischen Zustand im Brennraum infolge der Einspritzung platziert wird, tritt er in Interaktion mit dem umgebenden Gas. Dem Strömungswiderstand und der turbulenten Dispersion, die von der Zylinderinnenströmung auf ein Parcel ausgeübt werden, liegt das TAB-Modell (Taylor Analogy Breakup) von O'Rourke und Amsden [69] zugrunde. In diesem Modell wird ein Tropfen als Feder-Masse System approximiert, um die Bewegungsgleichungen eines Lagrange'schen Parcels lösen zu können. Infolge der Scher- und Trägheitskräfte, die auf den Tropfen im Zylinder wirken, entstehen Instabilitäten an der Oberfläche des Tropfens, die irgendwann zum Aufbruch eines Tropfens in mehrere kleinere Tropfen führen. Diese Aufbruchmechanismen werden mit Hilfe des Kelvin-Helmholtz-Rayleigh-Taylor Modells (KHRT) berücksichtigt [70–74]. Weiterhin werden Stoff- und Energietransportmechanismen zwischen flüssiger und gasförmiger Phase an der Oberfläche des Tropfens infolge von Verdampfung und Diffusion durch Einsatz des Frossling-Modells [75] beschrieben.

Kollidiert ein Tropfen mit einer festen Oberfläche an den Grenzen des Brennraumes, kann es zur verschiedenen Interaktionen des Tropfens mit der Wand kommen, wie zum Beispiel Abprallen oder Zerplatzen [68]. Dazu kommen verschiedene Modelle in der Simulation zum Einsatz, welche zum einen die Interaktion des Tropfens mit der Wand berücksichtigen [76, 77] und den Zustand des daraus entstehenden flüssigen Wandfilmes einbeziehen [76].

## 2.4 Selbstzündung im ottomotorischen Betrieb

Die steigende Leistungsdichte moderner Ottomotoren führt heute bereits in den Grenzbereich der kontrollierten Verbrennung. Irreguläre Verbrennungsphänomene sind die Folge dieser Entwicklung und bergen ein signifikantes Schadenspotenzial. Dementsprechend ist es für eine weitere Wirkungsgradoptimierung von Interesse diese Phänomene zu prognostizieren und dadurch das Schadensrisiko zu minimieren [78].

Ottomotoren zeigen in deren Betrieb unterschiedliche Arten von abnormalen Verbrennungsphänomenen. Diese können in deren Erscheinungsform zwar Ähnlichkeiten aufweisen, liegen jedoch nicht zwangsläufig derselben Entstehungsursache zugrunde. Im Folgenden wird ein Überblick der verschiedenen Formen an Irregularitäten gegeben um dementsprechend eine Abgrenzung vornehmen zu können. Speziell die Vorentflammung und die Glühzündung spielen in diesem Zusammenhang eine wesentliche Rolle da durch deren sporadisches Auftreten, begleitet von hohen Druckgradienten, ein signifikant hohes Schadensrisiko ausgeht.

## Klopfen

Die klopfende Verbrennung stellt die bekannteste Form der abnormalen Verbrennung im Ottomotor dar. Bei hohen Lasten tritt nach regulärer Zündeinleitung mittels Funkenentladung im noch unverbrannten Endgas infolge thermodynamisch kritischer Zustände Selbstzündung auf. Abhängig vom thermodynamischen Zustand kann die Reaktion als Detonation in Kombination mit einer starken Druckwelle bzw. Stoßwelle ablaufen. Das eingeschlossene Gas stellt hierbei ein schwingungsfähiges System dar dessen charakteristische Schwingung im Druckverlauf der Verbrennung in Abbildung 2-16 ersichtlich wird. Neben der hohen mechanischen Belastung infolge der Druckwelle führt Klopfen ebenfalls zur hohen thermischen Beanspruchung der Brennraumgeometrie [79].

Heutige Motoren werden mit einem Klopfsensor ausgestattet. Dieser detektiert vom Klopfen hervorgerufene Körperschallschwingung. Basierend auf diesem Signal kann die Klopfregelung des Motorsteuergerätes eingreifen und über eine Zündzeitpunktverschiebung das Schadenspotenzial auf Kosten des thermischen Wirkungsgrades reduzieren [80].

## Vorentflammung

Die Vorentflammung ist ein Selbstzündungsphänomen infolge thermodynamisch kritischer Zustände, welches in Ottomotoren stochastisch und nicht voraussagbar vornehmlich im Low-End-Torque Bereich auftritt und ebenfalls als Low-Speed Pre-Ignition (LSPI) bezeichnet wird. Durch die hohe Leistungsdichte und den damit einhergehenden kritischen Brennraumbedingungen hochaufgeladener Ottomotoren sind Vorentflammungen überwiegend in Turbomotoren anzutreffen. Kennzeichnend für ein solches Phänomen ist, dass die Verbrennung deutlich vor der regulär zu erwartenden Verbrennung stattfindet und dementsprechend von einem signifikant hohen Druckmaximum begleitet wird. Bei sehr früher Selbstzündung, teils vor Einleitung des regulären Zündfunken, wird der Druckverlauf von einer hohen Schwingungsamplitude, gleich Abbildung 2-16, infolge des Überganges in eine klopfende Verbrennung (Mega-Knock, Super-Knock), überlagert [11, 81–84].

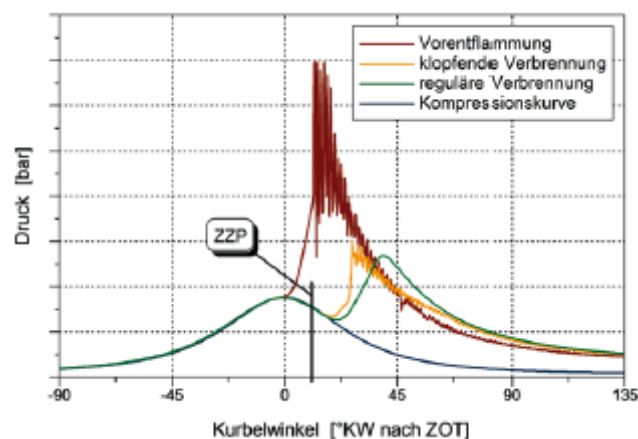


Abbildung 2-16. Zylinderdruckverläufe abnormaler Verbrennungen [85].

Eine weitere Eigenschaft dieser Art der abnormalen Verbrennung ist das Auftreten in intermittierenden Serien. Nach Eintritt der 1. Vorentflammung (initiale Vorentflammung) kann es unter gewissen Umständen zu einem selbsterhaltenden Mechanismus kommen, welche einer Reihe von Vorentflammungen auslöst. Reguläre Verbrennungszyklen wechseln hierbei mit Vorentflammungszyklen ab, wobei Länge der Serien (1 – >5) als auch Anzahl der regulären Zyklen zwischen zwei Vorentflammungen (0 – >5) eine deutliche Variation aufweisen [81]. Abbildung 2-17 zeigt exemplarisch eine intermittierende Vorentflammungsserie. In [86, 87] konnte auf Basis optischer Untersuchungen nachgewiesen werden, dass Partikel einen signifikanten Einfluss auf die Entstehung einer fortlaufenden Vorentflammung haben.

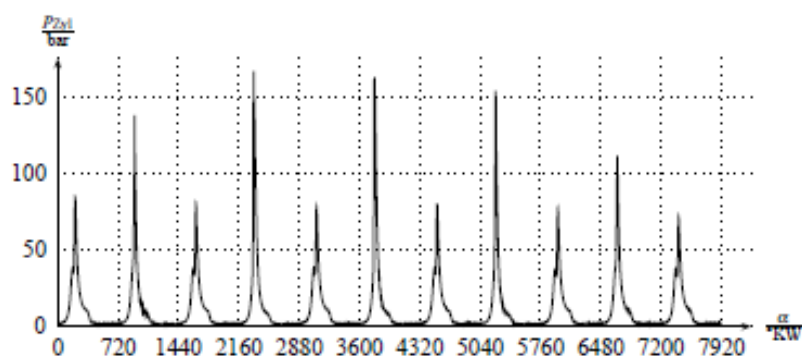


Abbildung 2-17. Zylinderdruckverläufe einer intermittierenden Vorentflammungsserie [86].

Trotz der hohen Forschungsaktivität konnte aufgrund der Komplexität des Entstehungsmechanismus einer Vorentflammung bislang keine umfassende Erklärung der Ursache einer initialen bzw. stochastischen Vorentflammung gefunden werden. Im Laufe der letzten Jahre wurde eine Vielzahl an möglichen Gründen für das Auftreten dieser identifiziert. Es hat sich gezeigt, dass das Entstehen einer Vorentflammung eine Vielzahl an möglichen Quellen unterliegt. Abbildung 2-18 gibt einen Überblick möglicher Einflussparameter auf das Entstehen einer Vorentflammung, wobei je nach Auslegung des Aggregates die Auswirkung der einzelnen Parameter einer unterschiedlichen Reihung unterliegt.

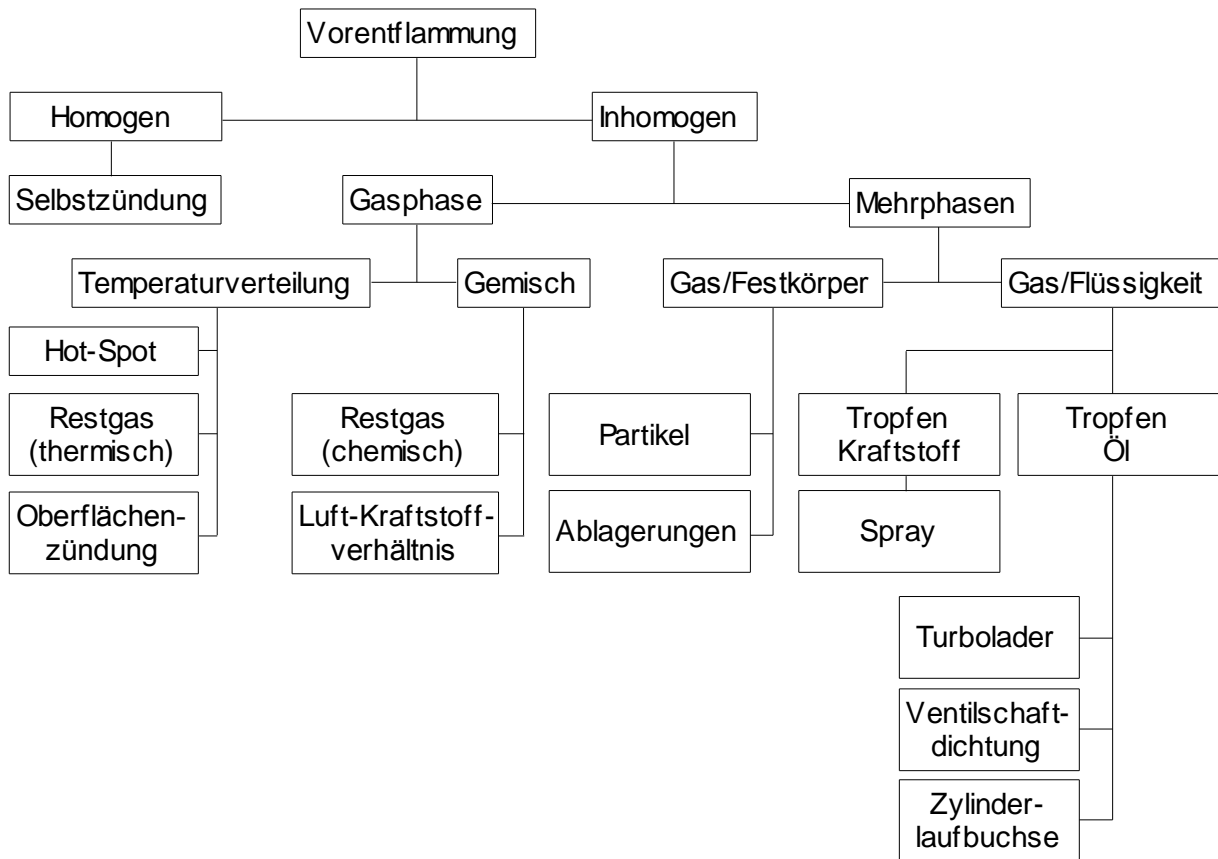


Abbildung 2-18. Motorische Quellen für Vorentflammung nach Dahnz et al. [88].

Neben potenziellen Zündquellen wie etwa Ablagerungen bzw. Partikel [86, 87] ist das Öl bzw. dessen Additive ein mittlerweile unbestrittener Einflussparameter für das Auftreten von Vorentflammungen. Eine Vielzahl an Untersuchungen hat mittlerweile nachgewiesen, dass die Kraftstoff-Öl-Interaktion infolge der Benetzung der Zylinderwand eine wesentliche Rolle spielt [11, 86, 89–93].

Motorparameter wie etwa die Kühlmitteltemperatur, Ladungsbewegungsniveau sowie Spraytargeting bzw. Einspritzstrategie liegen hierbei unter anderem in unmittelbarem Zusammenhang mit der Spraypenetration und der Interaktion des Kraftstofftropfens und der Zylinderwand und zeigen dementsprechend signifikante Auswirkung auf die Vorentflammungshäufigkeit. Aber auch die konstruktive Auslegung des Kolbenspaltes bzw. des Kolbens zeigt nach [11, 94] signifikanten Einfluss auf die LSPI Häufigkeit da die Annahme zugrunde liegt, dass es im Kolbenspalt zur Akkumulation eines Kraftstoff-Öl-Reservoirs kommt, welches bei ausreichender Menge zu einer Loslösung in den Brennraum führt [81, 86, 95].

Zusätzlich erwähnt [86] auf Basis simulativer Betrachtungen das reaktive intermediäre chemische Spezies ein akkumulatives Verhalten bei einer unvollständigen Verbrennung eine Kraftstoff-Luft-Gemisches im Kolbenspalt aufweisen können, welche bei motorrelevanten Temperaturen zu einer Selbstzündung führen können.

Abseits der soeben beschriebenen möglichen Ursachen einer initialen LSPI haben die Kraftstoffe selbst einen signifikanten Einfluss auf die Selbstzündungsneigung im Motorbetrieb. Grundsätzlich ist der chemische Zündverzug der Kraftstoffe im relevanten Temperaturbereich des Motorbetriebes nicht hinreichend kurz um als alleinige Ursache der Vorentflammung herangezogen zu werden [86]. Trotz dieser Tatsache führen verschiedenen Kraftstoffzusammensetzungen zu deutlichen Unterschieden in der Vorentflammungswahrscheinlichkeit unter konstanten Betriebsbedingungen. Es zeigt sich, dass unter anderem die Volatilität des Kraftstoffes eine wesentliche Rolle bei dessen Vorentflammungsneigung spielt [9, 11, 96, 97].

### **Glühzündung**

Die Entflammung des Luft-Kraftstoff-Gemisches im Motor vor Einsetzen des Zündfunken wurde in zahlreichen älteren Veröffentlichungen anhand von Einzylinder-Aggregaten mit im Vergleich zu modernen Ottomotoren hohen Hub/Bohrungs-Verhältnissen zwischen 1.4 und 1.65 und geringen Kompressionsverhältnissen zwischen 4 und 7 untersucht [98–101]. Aus allen Arbeiten geht hervor, dass das Phänomen der oberflächeninduzierten Vorentflammung in weiten Teilen des Last-Drehzahlkennfeldes sehr komplexe Zusammenhänge mit Motorbetriebsparametern, aber auch physikalischen Kraftstoffeigenschaften aufweist. Im Folgenden werden wesentliche gemeinsame Erkenntnisse aus diesen Arbeiten aufgelistet und im Anschluss werden einige Besonderheiten diskutiert. Die Vorentflammungsresistenz eines Luft-Kraftstoff-Gemisches

- zeigt kaum eine Abhängigkeit vom Zeitpunkt der Fremdzündung,
- zeigt kaum eine Abhängigkeit von Öl- und Kühlmitteltemperatur,
- steigt mit zunehmender Motordrehzahl und steigendem Ladungsbewegungsniveau im Zylinder,
- steigt mit abnehmender Last bzw. abnehmendem Saugrohrdruck,
- hängt von Position der heißen Oberfläche im Brennraum ab und davon wie weit die Oberfläche in den Brennraum ragt,
- sinkt mit zunehmendem Kompressionsverhältnis,
- weist ein Minimum bei relativen Luft-Kraftstoff-Verhältnissen um 0.9 auf und
- lässt sich nur teilweise in Zusammenhang bringen mit dessen Oktanzahl.

Serruys untersucht in [98] den Einfluss verschiedener Motorbetriebsparameter auf oberflächeninduzierte Vorentflammung anhand von drei Versuchsträgern, wobei sich diese durch unterschiedliche Einlasskanal- und Brennraumgeometrien und dem daraus hervorgehenden

Turbulenzniveau der Zylinderinnenströmung unterscheiden. Vorentflammungen werden an der Oberfläche eines elektrisch beheizten Glühstiftes verursacht.

Es wird berichtet, dass der Drehzahleinfluss auf die Glühzündungsneigung besonders stark ausgeprägt ist, bei einer Zylinderkopfgeometrie mit hohem Turbulenzniveau und bei der Geometrie mit geringem Turbulenzniveau kaum noch nachzuweisen ist. Außerdem senkt ein hohes Turbulenzniveau die Differenz zwischen der Oberflächentemperatur bei Einsetzen erster Vorentflammungen und der Oberflächentemperatur bei welcher ein regelmäßiges Vorentflammen beobachtet wird. Das Ausmaß der zyklischen Schwankungen der oberflächeninduzierten Zündung wird gewissermaßen reduziert. Bezüglich der Oktanzahl eines Kraftstoffes wird ein deutlich positiver Einfluss über ein großes Spektrum von 21 bis 75 verzeichnet. Spencer präsentiert in [99] Ergebnisse experimenteller Untersuchungen mit unterschiedlichen Kraftstoffen an zwei Aggregaten, einem Einzylindermotor mit Drallbrennverfahren und einem CFR-Prüfmotor, wie er zur Bestimmung von Oktanzahlen verwendet wird. In beiden Aggregaten werden verschiedene Drehzahlen berücksichtigt und es zeigt sich, dass das Ranking der Vorentflammungsneigung der Kraftstoffe teilweise von der Drehzahl abhängt.

So wird bei einer Drehzahl von 1000 1/min bzw. 500 1/min folgendes Ranking aufgezeichnet:

- 500 1/min: 1. Isopropanol, 2. Isooktan/Benzen/Toluol, 3. Methanol
- 1000 1/min: 1. Isopropanol, 2. Isooktan, 3. Benzen, 4. Toluol, 5. Methanol

Ein ähnliches Resultat wird im CFR-Motor mit Benzen, Isopropanol und Toluol erzielt. Ein nachweisbarer Zusammenhang zwischen der ROZ und der Vorentflammungsneigung eines Kraftstoffes kann in diesen Arbeiten nicht gefunden werden.

Downs und Pignéguy [100] nehmen ebenfalls experimentelle Untersuchungen an zwei Aggregaten vor. Einem Ricardo E.6 Einzylindermotor mit variablen Verdichtungsverhältnis und einem elektrisch beheizten Draht zur Einleitung der Vorentflammungen und einem aufgeladenen 24-Zylinder Napier-Flugmotor. Bei diesem Aggregat werden die Vorentflammungen an der Oberfläche eines luftgekühlten Glühstiftes im Brennraum eingeleitet. Die Temperatur dieser Zündquelle wird durch den zur Kühlung bereitgestellten Luftmassenstrom reguliert. Bei den Glühdrahtexperimenten wird die zur Einleitung einer Vorentflammung notwendige elektrische Leistung zur Berechnung einer Vorentflammungskennzahl herangezogen, beim luftgekühlten Glühstift wird der Kühlluftmassenstrom herangezogen.

Im E.6 wird bei 2500 1/min und Saugvollast mit 54 °C Einlasslufttemperatur eine maximale Glühzündungsresistenz mit Isooktan erzielt, gefolgt von Toluol, Isopropanol, Ethanol, Methyläthylketon (2-Butanon), Cyclohexan und Methanol. Beim Flugmotor allerdings erweist sich Toluol bei einer Drehzahl von 3000 1/min, moderater Aufladung und 80 °C Einlasslufttemperatur als vorentflammungsresistenter als Isooktan.



In [101] präsentieren Downs und Theobald weitere Forschungsergebnisse basierend auf Messungen im Ricardo E.6 Motor. Es wird eine große Diskrepanz zwischen der Vorentflammungsresistenz der untersuchten Kraftstoffe und der zugrunde liegenden Oktanzahl berichtet. Eine detailliertere Auswertung des Einflusses einzelner Kraftstoffe zeigt, dass Toluol (C7-Aromat) und Xylole (C8-Aromaten) im Gegensatz zu Benzol (C6-Aromat) eine Erhöhung der Vorentflammungsresistenz gegenüber einem Referenzbenzin bewirken. Daneben führen alle C8-Isoparaffine außer Isooktan zu einer Absenkung der Vorentflammungsresistenz.

Kalghatgi und Bradley führen in [102] auf Basis von theoretischen und numerischen Vorarbeiten von Zeldovich [103–105] und He und Clavin [106] eine theoretische Analyse des Einflusses der laminaren Flammendicke auf die Oberflächenzündneigung eines Kraftstoffes in Ottomotoren durch.

Dabei wird die kritische Anhäufung von thermischer Energie in der Grenzschicht an einer heißen Wand mit der Folge einer Zündung reduziert auf folgende Betrachtung: wenn ein zur Zündung ausreichender Wärmestrom das Gas nahe einer heißen Oberfläche aufheizt, entsteht eine Flamme mit einer räumlichen Ausdehnung  $r_0$  größer oder gleich der laminaren Flammendicke  $\delta_l$ .

$$\frac{r_0}{\delta_l} = e^{\left(\frac{\beta}{2}\left(1 - \frac{1}{Le}\right)\right)} \quad \text{mit} \quad \beta = -\frac{E_A}{RT_b^2}(T_b - T_u) \quad (2.15)$$

Es wird vereinfachend angenommen, dass unter dieser Bedingung eine Entflammung des Luft-Kraftstoff-Gemisches auf Basis eines laminaren Flammenwachstums beginnt. Ausgehend von diesem Modell diskutieren die Autoren den qualitativen Einfluss verschiedener Motorbetriebsparameter auf die Auftrittswahrscheinlichkeit einer Oberflächenzündung. Ein Ergebnis dieser Untersuchung ist, dass Ethanol mit steigendem Ladedruck zunehmend resistenter gegenüber Vorentflammung ist, wohingegen die Vorentflammungsresistenz von Isooktan abnimmt. Abschließend werden in dieser Arbeit die Ergebnisse von Downs, Pignéguy und Theobald [100, 101] aufgegriffen und mit der laminaren Flammengeschwindigkeit korreliert. Es zeigt sich, dass der Kehrwert der laminaren Flammengeschwindigkeit, welcher proportional zur laminaren Flammendicke ist, mit einem Bestimmtheitsmaß  $R^2$  von 83 % mit der Vorentflammungskennzahl aus den Literaturdaten korreliert. Eine Korrelation mit der MOZ oder ROZ kann nicht gefunden werden.

Neuere Arbeiten [107–109, 7, 110, 111] untersuchen das Phänomen der oberflächeninduzierten Vorentflammung auf Basis von Motoren mit Hub/Bohrungs-Verhältnissen zwischen 0.94 und 1.16 und Kompressionsverhältnissen von 8.2 bis 11.5 wobei die Versuchsträger teilweise über Kanaleinspritzung oder Direkteinspritzung verfügen.

Auch für diese Arbeiten sind im Folgenden wesentliche gemeinsame Erkenntnisse aufgeführt.

### Die Vorentflammungsresistenz eines Luft-Kraftstoff-Gemisches

- steigt mit zunehmender Motordrehzahl und steigendem Ladungsbewegungsniveau im Zylinder,
- steigt mit abnehmender Last bzw. abnehmendem Saugrohrdruck,
- sinkt mit zunehmendem Kompressionsverhältnis,
- weist ein Minimum bei relativen Luft-Kraftstoff-Verhältnissen um 0.9 auf,
- steigt mit zunehmender externer gekühlter Abgasrückführung,
- sinkt mit zunehmender interner Abgasrückführung,
- lässt sich nur teilweise in Zusammenhang bringen mit dessen Oktanzahl.

Neben experimentellen Untersuchungen zur gezielten Einleitung einer Glühzündung anstelle einer Funkenzündung an einem Vierzylinder-Serienmotor nimmt Boulouchos in [108] numerische Untersuchungen vor. Darin wird auf Basis von Daten in [112] und [113] eine Lösung der Differentialgleichung von Frank-Kamenetzki für die kritische dimensionslose Zündbedingung  $\delta_{FK,krit}$  nach

$$\delta_{FK,krit} = (-0.667 \cdot \Theta + 1.5)^2 \quad (2.16)$$

zugrunde gelegt, um Oberflächentemperaturen zur Einleitung einer Glühzündung zu berechnen. Unter der Annahme, dass die Glühzündung am Heizdraht an Stellen geringsten Wärmeübergangs initiiert werden und unter der vereinfachenden Annahme, dass Isooktan als Kraftstoffsurrogat für Benzin herangezogen werden kann weisen die berechneten Oberflächentemperaturen eine gute Übereinstimmung mit gemessenen Oberflächentemperaturen auf.

In [109] stellen Ernst et al. fest, dass Kraftstoffe mit hohem Ethanolgehalt von 22 % vol., wie sie auf dem brasilianischen Markt zu finden sind, eine hohe Anfälligkeit für Glühzündung aufweisen, vorzugsweise an der Mittelelektrode der Zündkerze.

Sasaki et al. nehmen in [7] ebenfalls experimentelle Untersuchungen an einem Vierzylinder-Saugmotor vor, wobei dieser mit einem Kompressionsverhältnis von 15 und einer Einlasslufttemperatur von 5 °C betrieben wird um thermodynamische Zustände im Zylinder zu reproduzieren, wie sie in aufgeladenen Motoren zu finden sind. Bei 4400 1/min und 72 % Last werden mit einem relativen Luft-Kraftstoff-Verhältnis von 0.85 verschiedene Misch- und Reinkraftstoffe hinsichtlich ihrer Vorentflammungsneigung bewertet. Als Zündquelle kommt eine mit einem Thermoelement bestückte Zündkerze mit künstlich abgesenkter Wärmeableitung zum Einsatz, die zunächst durch Frühverstellung der Funkenzündung aufgeheizt wird bis von einer Ionenstromsonde Vorentflammungen registriert werden.

Das Ergebnis ist eine Korrelation der ROZ mit aufgezeichneten Glühzündungstemperaturen von 65 %  $R^2$  und einer Korrelation der MOZ mit den Glühzündungstemperaturen von 92 % mit insgesamt acht Reinkraftstoffen. Dabei wird beobachtet, dass n-Hexen eine sehr geringe Glühzündungsresistenz besitzt und olefinhaltige Kraftstoffe generell eher zu Glühzündung neigen. Toluol weist eine der höchsten Resistenzen auf, gefolgt von Isooktan, Isohexan und Cyclohexan.

Basierend auf demselben Versuchsträger und der gleichen Messmethodik erweitern Sasaki und Nakata in [110] die Anzahl der untersuchten Kraftstoffe. Mit insgesamt 17 Kraftstoffen verändert sich das Bestimmtheitsmaß der Korrelation mit der MOZ auf 81 % und das der ROZ auf 39 %. Es wird also grundsätzlich die Aussage bestätigt, dass die MOZ einen engen Zusammenhang zur oberflächeninduzierten Vorentflammung der untersuchten Kraftstoffe aufzeigt. Dabei zeigt Isooktan eine höhere Vorentflammungsresistenz als PRF90 (Mischung aus 90 % vol. Isooktan und 10 % vol. n-Heptan) gefolgt von Ethanol.

Die Autoren erweitern die Untersuchungen um einen Betriebspunkt bei 1600 1/min, um die Vorentflammungsneigung bei niedriger Drehzahl zu adressieren. Unter diesen Bedingungen zeigt die MOZ keinen Zusammenhang mehr zur oberflächeninduzierten Vorentflammung ( $R^2 < 1$  %) wohingegen die ROZ mit einem Bestimmtheitsmaß von über 96 % anhand von acht Kraftstoffen einen deutlichen Zusammenhang zu den gemessenen Vorentflammungsneigungen vorlegt. Die Autoren argumentieren, dass die unterschiedlich hohen Oberflächentemperaturniveaus (ausgelöst durch die unterschiedlichen Drehzahlen 4400 1/min und 1600 1/min) wiederum unterschiedliche Regime der Reaktionskinetik der Kraftstoffe anregen. Gleichzeitig wird anhand von Berechnungen der Zündverzugszeiten der Kraftstoffe aufgezeigt, dass die Versuchsbedingungen während der Bestimmung der MOZ und der ROZ ebenfalls unterschiedlichen Temperaturbereichen der Reaktionskinetik der Kraftstoffe zuzuordnen sind. Je nachdem, ob ein betrachteter Betriebspunkt aus reaktionskinetischer Sicht, den ROZ bzw. MOZ Bedingungen nahe kommt, lässt sich eine bessere oder schlechtere Korrelation zwischen diesen Kennzahlen und der Vorentflammungsneigung eines Kraftstoffes nachweisen.

Günther [107] untersucht in einem Einzylindermotor mit seriennahen Motorspezifikationen bei einer Drehzahl von 1500 1/min, 2000 mbar Ladedruck, 25 °C Einlasslufttemperatur, stöchiometrischem Luft-Kraftstoff-Verhältnis unterschiedliche Kraftstoffe und Motorbetriebsparameter hinsichtlich oberflächeninduzierter Vorentflammung. Dabei kommt ein elektrisch beheizter Glühstift zum Einsatz, welcher seitlich zwischen Einlass- und Auslassseite in das Brennraumdach eingebaut wird. Die Vorentflammungsneigung der Kraftstoffe wird über eine Glühstifttemperatur charakterisiert, welche eine Vorentflammungshäufigkeit von 5 % verursacht. Die Untersuchungen kommen zum Ergebnis, dass oberhalb eines Ethanolgehaltes von 20 % vol. jede weitere Zugabe von Ethanol (E85 und E100/Ethanol) die Vorentflam-

mungsneigung eines Kraftstoffgemisches negativ beeinflusst. Weiterhin werden biogene Kraftstoffe untersucht wobei der Kraftstoff 2-Methylfuran vorentflammungsresistenter ist 2-Butanol, gefolgt von Ethanol und Isooktan. Auch in dieser Arbeit wird keine nennenswerte Korrelation zwischen den gemessenen kritischen Glühstifttemperaturen und der MOZ oder der ROZ beobachtet.

Yu et al. [111] untersuchen in einem Einzylindermotor mit seriennahen Motorspezifikationen bei einer Drehzahl von 2000 1/min, moderater Aufladung, 40 °C Einlasslufttemperatur, stöchiometrischem Luft-Kraftstoff-Verhältnis und 35° KW n.  $OT_{\text{Zündung}}$  Verbrennungsschwerpunkt-lage 6 verschiedene Kraftstoffe hinsichtlich oberflächeninduzierter Vorentflammung. Dabei kommt ein elektrisch beheizter Glühstift zum Einsatz, welcher in einen seitlich zwischen den Einlassventilen angeordneten Injektorschacht eingebaut wird. Analog zu den Untersuchungen von Günther wird die Vorentflammungsneigung der Kraftstoffe über eine Glühstifttemperatur charakterisiert, welche eine Vorentflammungshäufigkeit von 20 % verursacht.

Martin und Luef haben in [16] einen CFR-Motor mit einem Glühstift, wie in [107] ausgestattet und untersuchen darin die oberflächeninduzierte Vorentflammungsneigung einiger Biokraftstoffe. Das Messverfahren orientiert sich dabei an den Spezifikationen des Verfahrens zur Bestimmung der Motor Oktanzahl MOZ [114]. Aus diesen Untersuchungen folgt, dass Isooktan die höchste Vorentflammungsresistenz unter den untersuchten Kraftstoffen zeigt, gefolgt von 2-Butanol, 1-Butanol, Ethanol, 1-Propanol und Methanol. Weiterhin werden Mischungen der Biokraftstoffe mit EN228 ROZ95 Benzin als Grundkraftstoff ohne Ethanolanteil untersucht. Daraus geht hervor, dass eine Zumischung von 20 % vol. Ethanol zum Grundkraftstoff eine nur geringfügige Auswirkung Erhöhung der Vorentflammungsresistenz bewirkt. Eine Anhebung des Ethanol-Anteiles auf 50 % vol. und mehr hat eine deutliche Abnahme der Vorentflammungsresistenz zur Folge. Bei Methanol führen bereits 30 % vol. und mehr zu einer Abnahme der Vorentflammungsresistenz.

### 3 Auswahl der Kraftstoffe

In diesem Projekt wurde eine umfassende Kraftstoffmatrix herangezogen, um den Einfluss einzelner Stoffgruppen detailliert analysieren zu können. Tabelle 1 gibt einen Überblick der verwendeten Kraftstoffe. Darin sind sowohl reale Mischkraftstoffe als auch 3-Komponenten-Kraftstoffen (CFD Surrogate) enthalten.

Die vorliegende Matrix beinhaltet Gemische aus verschiedenen reinen Kohlenwasserstoffen, welche folgende Stoffgruppen repräsentieren:

- iso-Paraffine (Komponente: Isohexan),
- Olefine (Komponente: n-Hexen),
- Cycloalkane (Komponente: Cyclohexan),
- Aromaten (Komponente: Toluol),
- Alkohole (Komponente: Ethanol bzw. Methanol),
- Ether (Komponente: ETBE).

Diese Komponenten wurden zu 20 % bzw. die Alkohole ebenfalls zu 40 % molar beige-mischt. Als Grundkraftstoffe waren ein marktübliches, EN228 konformes Benzin ohne Ethanol-Anteil (KK03) sowie ein PRF95 (Primary Reference Fuel – 95 % vol. Isooktan (PRF100), 5 % vol. n-Heptan (PRF0)) (KK02) vorgesehen. Das ethanolfreie Benzin war Basis der Darstellung von realen Mischkraftstoffen wohingegen der PRF95 aufgrund der geringen Komponentenanzahl als Grundkraftstoff der simulativen Untersuchung diente. Zusätzlich beinhaltet die Kraftstoffmatrix drei weitere der EN228 entsprechende Marktkraftstoffe (KK20-22), welche Aufschluss über den Einfluss unterschiedlicher Grundkraftstoffzusammensetzung geben. Der Kraftstoff KK20 entspricht hierbei mit einem Aromaten-Anteil von 35 % vol. dem nach EN228 maximal zulässigen Wert wohingegen KK21 mit 18 % vol. Olefin-Gehalt den maximal zulässigen Olefin-Anteil widerspiegelt.

KK22 ist ein handelsüblichen E10 Kraftstoff. Als Referenzkraftstoff des Projektes diente ein EN228 konformes, marktübliches Benzin mit 5 % vol. Ethanol-Anteil (KK01).

### 3 Auswahl der Kraftstoffe

Tabelle 1. Liste der untersuchten Kraftstoffe und ausgewählte Stoffeigenschaften.

Name	Anteil Grundkraftstoff	Anteil n-Heptan	Anteil Isooktan	ROZ	MOZ	Sensitivität
-	% molar (vol.)	% molar (vol.)	% molar (vol.)			
E5 EN228 - KK01				97.3	86.1	11.2
PRF95 - KK02		5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95	95	0.0
E0 EN228 Blendstock - KK03	100.0 (100.0)			95.1	85.3	9.8
Isohexan 19.9 % mol. (16.6 % vol.) - KK04		1.4 (1.3)	78.7 (82.1)	94.9	93.9	1.0
Toluol 20.0 % mol. (14.0 % vol.) - KK06		8.4 (8.1)	71.6 (77.9)	95.1	93.1	2.0
Cyclohexan 19.6 % mol. (13.8 % vol.) - KK07		3.7 (3.6)	76.7 (82.6)	95.3	92.4	2.9
Isohexan 19.8 % mol. (17.2 % vol.) - KK08	18.8 (15.8)	1.0 (1.1)	60.4 (65.9)	95.1	91.9	3.2
n-Hexen 19.1 % mol. (15.5 % vol.) - KK09		2.8 (2.6)	78.1 (81.9)	94.8	90.9	3.9
Toluol 20.0 % mol. (17.1 % vol.) - KK10	75.8 (77.9)	4.2 (5.0)		95.3	84.3	11.0
Cyclohexan 19.5 % mol. (14.5 % vol.) - KK11	22.9 (20.1)	2.2 (2.2)	55.4 (63.2)	95.2	89.6	5.6
Ethanol 19.4 % mol. (7.9 % vol.) - KK12		9.9 (10.2)	70.0 (81.9)	95.6	93.3	2.3
Methanol 19.4 % mol. (5.9 % vol.) ETBE 19.4 % mol. (20.2 % vol.) - KK13		14.7 (16.2)	46.5 (57.7)	95.3	90.6	4.7
ETBE 19.2 % mol. (16.9 % vol.) - KK14		12.4 (11.5)	68.4 (71.6)	95.5	92.6	2.9
Ethanol 19.8 % mol. (10.1 % vol.) - KK15	76.8 (85.5)	3.4 (4.4)		95.2	84.3	10.9
Methanol 19.9 % mol. (7.3 % vol.) - KK16	77.5 (89.3)	2.6 (3.4)		95.3	83.9	11.4
ETBE 19.5 % mol. (20.7 % vol.) - KK17	73.4 (71.4)	7.1 (7.9)		95.4	86	9.4
Ethanol 39.1 % mol. (22.4 % vol.) - KK18	53.7 (67.1)	7.3 (10.5)		95.6	84.2	11.2
Methanol 39.4 % mol. (16.9 % vol.) - KK19	55.0 (74.3)	5.6 (8.7)		94.9	83.2	11.7
E5 EN228, Aromaten 35 % vol. - KK20				95.4	84	11.4
E5 EN228, Olefine 18 % vol. - KK21				95.3	85	10.3
E10 EN228 - KK22				97	85.9	11.1
Isohexan 20.0 % mol. (20.6 % vol.) - KK25	80.0 (79.4)			92.9	84.1	8.8
n-Hexen 20.0 % mol. (20.1 % vol.) - KK26	80.0 (79.9)			92	80.6	11.4
Toluol 20.0 % mol. (17.3 % vol.) - KK27	80.0 (82.7)			97.8	86.6	11.2
Cyclohexan 20.0 % mol. (17.5 % vol.) - KK28	80.0 (82.5)			93.5	83	10.5
Ethanol 20.0 % mol. (10.3 % vol.) - KK29	80.0 (89.7)			98	86.4	11.6
Methanol 20.0 % mol. (7.3 % vol.) - KK30	80.0 (92.7)			97.1	85.6	11.5
Ethanol 40.0 % mol. (23.4 % vol.) - KK31	60.0 (76.6)			100	87.5	12.9
Methanol 40.0 % mol. (17.5 % vol.) - KK32	60.0 (82.5)			99.1	86	13.1
E5 EN228 Blendstock 2 - KK33	100.0 (100.0)			95.6	85.6	10.0
Toluol 14.0 % mol. (12.1 % vol.) Cyclohexan 17.4 % mol. (15.3 % vol.) - KK34	68.6 (72.7)			94.9	83.4	11.5
Isooktan 20.0 % mol. (24.1 % vol.) - KK35	80.0 (75.9)			96.8	87.5	9.3

Ein wesentlicher Aspekt der Kraftstoffauswahl ist die Unterscheidung zwischen Match Blends (KK04-19) und Splash Blends (KK25-32):

Match Blends sind Kraftstoffmischungen, die durch Zugabe klopfresistenter (hier: Isooktan mit einer ROZ von 100) Kraftstoffkomponenten bzw. bei zu hoher ROZ des Basiskraftstoffes durch Komponenten geringer Klopfresistenz (hier: n-Heptan mit einer ROZ von 0) an eine definierte ROZ angepasst werden. Zu Projektbeginn wurde eine Ziel-ROZ von 95 definiert. Auf Basis dieses Vorgehens weist die Kraftstoffliste eine Vielzahl an Kraftstoffe hohen Isooktan/n-Heptan-Gehaltes auf. Bei einem Splash Blend wird die Komponente ohne zusätzliche Maßnahmen dem Grundkraftstoff beigefügt. Dementsprechend kann es zu einer signifikanten Änderung der ROZ kommen. Die Komponentenbeimischung der in Tabelle 1 enthaltenen Splash Blends erfolgte immer in jeweils gleichen Stoffmengenanteilen. Im Vorgängerprojekt M1059 [15] wurde diesbezüglich beobachtet, dass sich einzelne Kraftstoffkomponenten hinsichtlich ihrer chemischen Reaktivität sehr ähnlich verhielten, wenn diese zu gleichen Stoffmengenanteilen beigemischt wurden. Diesen Sachverhalt galt es in der Gestaltung der Kraftstoffmatrix zu berücksichtigen.

Neben deutlichen Differenzen betreffend der Kraftstoffkennzahlen ROZ und MOZ weist die untersuchte Kraftstoffmatrix ebenfalls einen hohen Streubereich der Sensitivität S (ROZ – MOZ) auf.

Im Laufe der Untersuchungen hat sich herausgestellt, dass bestimmte Kraftstoffkomponenten bei den potenziellen Prüfverfahren vom realen Motorbetrieb abweichende Selbstzündungstendenzen zeigen. Dementsprechend wurden zu einem späteren Zeitpunkt des Projektes zusätzliche Kraftstoffe definiert (KK33-35) um das „Worst-Case-Szenario“ der Prüfverfahren zu analysieren. Bei den erwähnten Kraftstoffkomponenten handelt es sich um die Kohlenwasserstoffe Isooktan und Cyclohexan. Kraftstoff KK34 ist in diesem Zusammenhang ein zusätzlicher Match Blend hohen Cyclohexan-Gehaltes, wohingegen KK35 einen Isooktan Splash Blend darstellt. Aus Gründen der limitierten Kraftstoffmengen war eine neuerliche Mischung auf dem ursprünglichen Blendstock KK03 nicht möglich und ein zusätzlicher Blendstock 2 (KK33) wurde herangezogen.

Im Folgenden wird detailliert auf die Methodik der Kraftstoffzusammensetzung der Match/Splash Blends bzw. CFD Surrogate eingegangen. Hierzu ist exemplarisch in Abbildung 3-1 der Splash Blend KK27 und der Match Blend KK10 dargestellt. Beiden Kraftstoffen wurde 20 % mol. Toluol beigemischt um den Einfluss dieses aromatischen Kohlenwasserstoffes analysieren zu können.

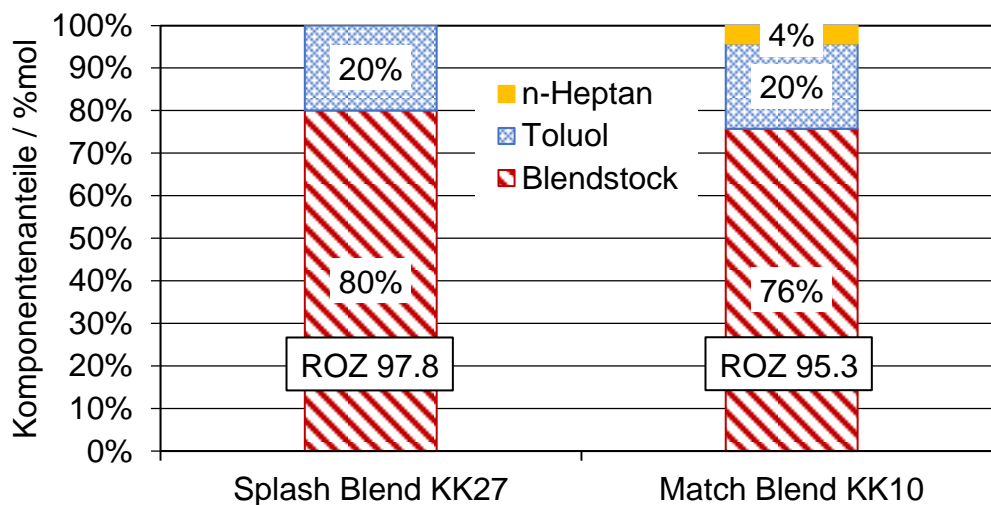


Abbildung 3-1. Molare Zusammensetzung der Kraftstoffe KK27 und KK10.

Anhand des Splash Blends KK27 ist die hohe Klopfestigkeit von Toluol zu sehen. Durch den aromatischen Kohlenwasserstoff wird die ROZ von 95.2 auf 97.8 angehoben. Dementsprechend ist im Fall des Match Blends KK10 die Zugabe von n-Heptan notwendig um die Probe auf eine ROZ von 95 zu reduzieren. Ein Anteil von lediglich 4 % mol. n-Heptan (gelb) ist bereits ausreichend um die ROZ zu „matchen“.

Demgegenüber ist in Abbildung 3-2 beispielhaft eine Kraftstoffmischung zu sehen, dessen zu analysierende Komponente (Isohexan) eine deutliche Reduktion des Basis ROZ hervorruft. Um eine ROZ von 95 zu erzielen ist bei der Isohexan-Mischung ein signifikanter Anteil Isook-

### 3 Auswahl der Kraftstoffe

tan (60 % mol.) beizumischen. Der geringe n-Heptan-Gehalt (1 % mol) resultiert aus der „Feinabstimmung“ der ROZ.

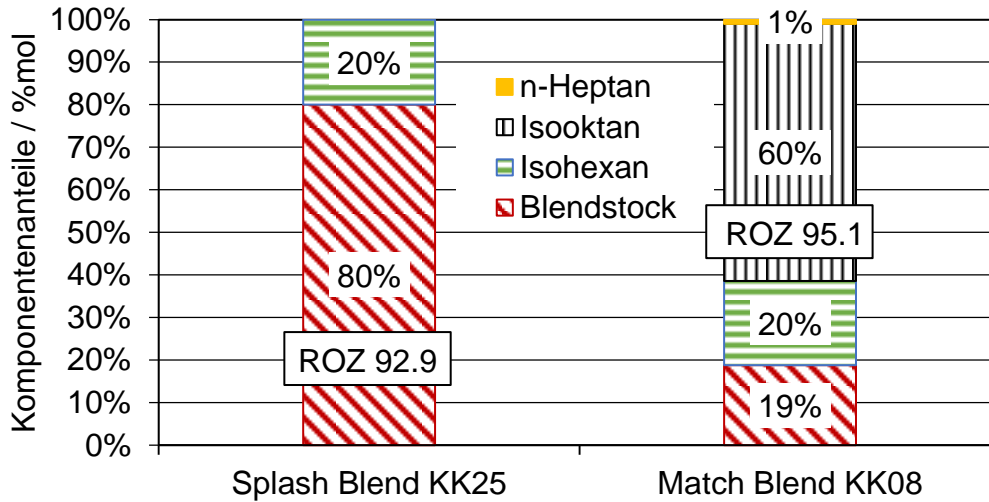


Abbildung 3-2. Molare Zusammensetzung der Kraftstoffe KK25 und KK08.

In Abbildung 3-3 ist die Kraftstoffzusammensetzung des Toluol bzw. des Isohexan CFD Surrogates ersichtlich.

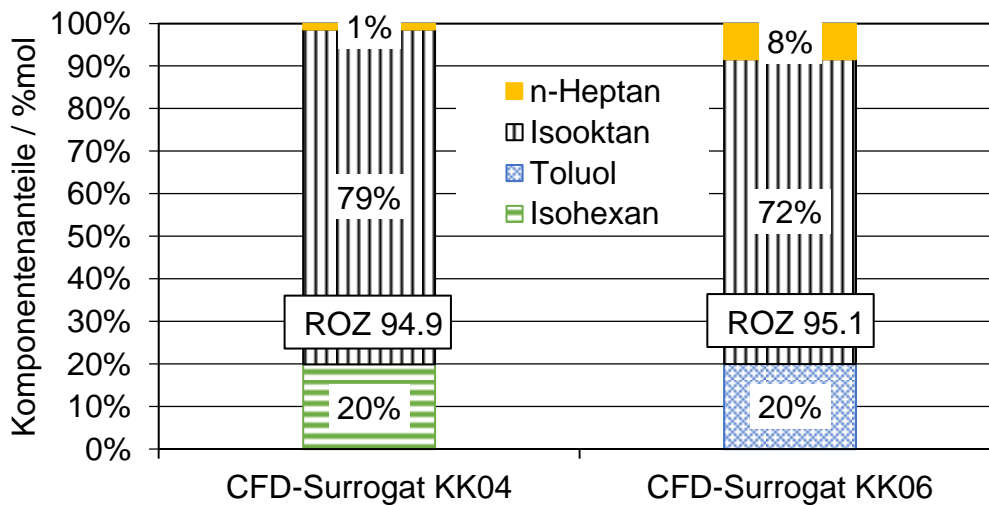


Abbildung 3-3. Molare Zusammensetzung der Kraftstoffe KK25 und KK08.

Wie bereits zuvor erwähnt führt die Zugabe von Toluol zu einer gesteigerten Klopfestigkeit des Kraftstoffes. Im Fall des ROZ95 CFD Surrogates KK06 (Toluol) ist es somit notwendig das Isooktan/n-Heptan-Verhältnis zugunsten des n-Heptan-Anteiles anzupassen. Betrachtet man im Vergleich dazu KK04 (Isohexan) so ist zu erkennen, dass aufgrund der hohen Klopfneigung von Isohexan das Isooktan/n-Heptan Verhältnis zugunsten Isooktans angepasst werden muss.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass die CFD Surrogate als auch die Match Blends einen signifikant hohen Isooktan-/n-Heptan-Anteil besitzen. Der Einfluss dieser hohen paraffinischen Anteile wird in Kapitel 5 detailliert analysiert.



## 4 Methodik

Es wurden zahlreiche Versuchsträger für experimentelle und numerische Arbeiten genutzt, um die Projektziele zu erfüllen. Beginnend mit Grundlagenuntersuchungen der Reaktionskinetik, wurden die wesentlichen motorischen Arbeiten an einem seriennahen Einzylinder-Forschungsmotor, dem CFR-Prüfmotor und einem Dreizylinder-Serienmotor vorgenommen.

### 4.1 Untersuchungen zur Reaktionskinetik am Einhubtriebwerk

Ein Teil des Projektes sah vor, das komplexe Zündverhalten der Kraftstoffe grundlegend zu untersuchen um ein tiefes Verständnis für maßgebliche Zündregime abzuleiten, welche als Treiber für Vorentflammung zu identifizieren sind. Die Zündwilligkeit der Luft-Kraftstoff-Gemische wurde unter Ausschluss etwaiger motorischer Quereinflüsse quantitativ beschrieben und diente ebenfalls zum Abgleich von kinetischen Modellen, welche numerische Untersuchungen der Vorentflammung ermöglichten. Die Untersuchungen wurden von der Juniorprofessur für physikalisch-chemische Grundlagen der Verbrennung (PCFC) der RWTH Aachen University an dem in Abbildung 4-1 und Abbildung 4-2 dargestellten Einhubtriebwerk [115] durchgeführt.

Diese Einrichtung wird im Wesentlichen zur Messung von Zündverzugszeiten verschiedener Kraftstoffe genutzt. Dazu wird zunächst der zu untersuchende Kraftstoff in einem externen Tank mit Luft aufbereitet, wo dieser eine ausreichend lange Zeit bei niedriger Temperatur und geringem Druck verweilt und sich homogen mit der Luft vermischen kann. Nachdem sich eine gleichmäßige Kraftstoffverteilung eingestellt hat, beginnt das eigentliche Experiment. Das Gemisch wird in die Reaktionskammer befördert und dort mit Hilfe eines schnell laufenden Kolbens innerhalb von 15 – 20 ms auf hohen Druck und hohe Temperatur komprimiert (sogenannte Kompressionsendtemperatur und -druck). Infolge dieser Druck- und Temperaturerhöhung kommt es im Gasgemisch zu Reaktionen und schließlich zur Zündung, gekennzeichnet durch einen schnellen Druckanstieg (Abbildung 4-3).

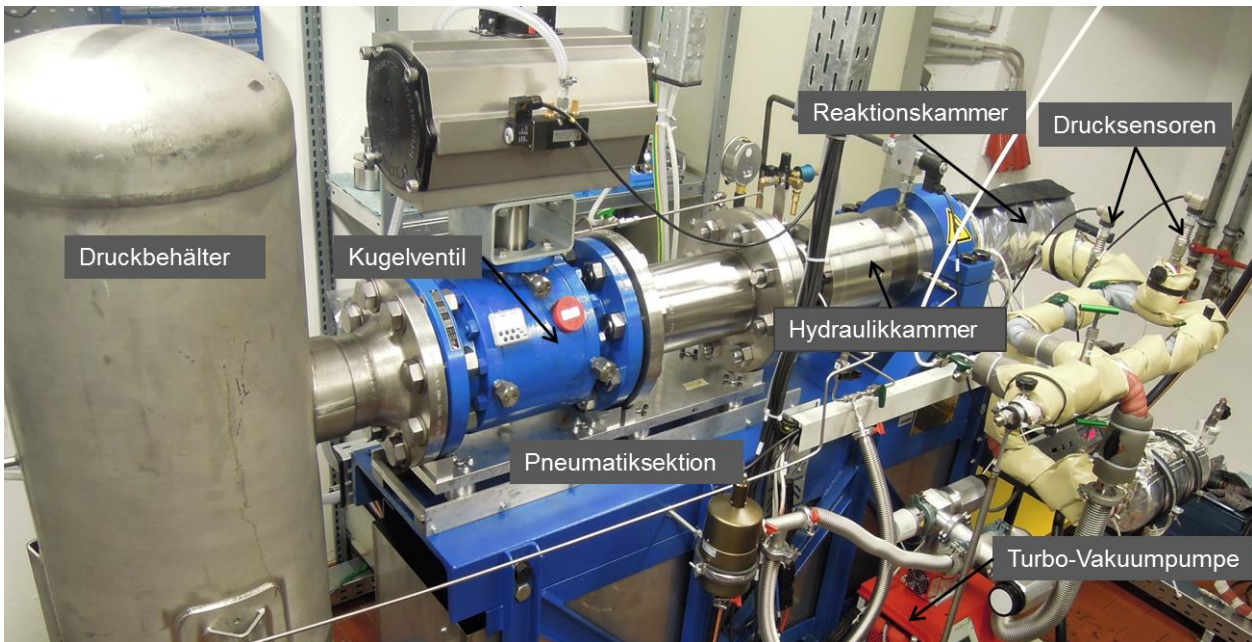


Abbildung 4-1. Einhubtriebwerk des PCFC der RWTH Aachen (engl. RCM = Rapid Compression Machine).

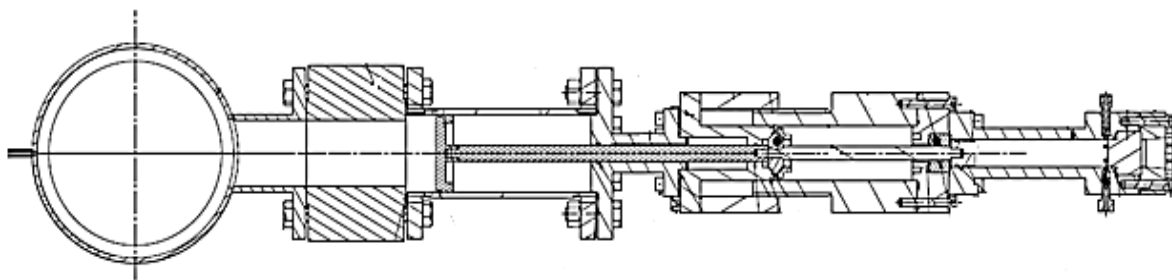


Abbildung 4-2. Einhubtriebwerk des PCFC der RWTH Aachen in Schnittdarstellung.

Die schnelle Bewegung des Kolbens wird durch eine rasche Druckbeaufschlagung der Kolbenshubstange erzielt. Das Betriebsgas wird durch ein sehr hohes Druckgefälle aus dem Druckbehälter in die Pneumatiksektion getrieben, wo es auf den Kolbentrieb trifft. Der Kolben wird sehr stark beschleunigt. Um ein Aufprallen des Kolbens in den Sitz im oberen Totpunkt zu verhindern, wird der Kolbentrieb durch eine entgegengesetzt arbeitende Hydraulik verzögert.

Im Einhubtriebwerk lässt sich der Kolben in einem Zeitfenster von 10 ms bis 30 ms aus dem Stillstand in seine Endlage befördern, bei einer möglichen Hubverstellung zwischen 150 mm und 250 mm. Außerdem ist ein maximaler Kompressionsenddruck von 120 bar und ein maximales geometrisches Kompressionsverhältnis von 31 realisierbar. Nach Erreichen des Kompressionsendzustandes vergeht eine kurze Zeitdauer, bis es zur Zündung kommt. Infolge der homogenen Gemischverhältnisse resultiert diese Zündung in sehr steilen Druckanstiegen und hohen Spitzendrücken. Die Zeitdauer zwischen Kompressionsende und Zündung ist als Zündverzugszeit definiert. In Abbildung 4-3 ist beispielhaft eine gemessene Druckkurve einer solchen Zündverzugszeitmessung dargestellt.

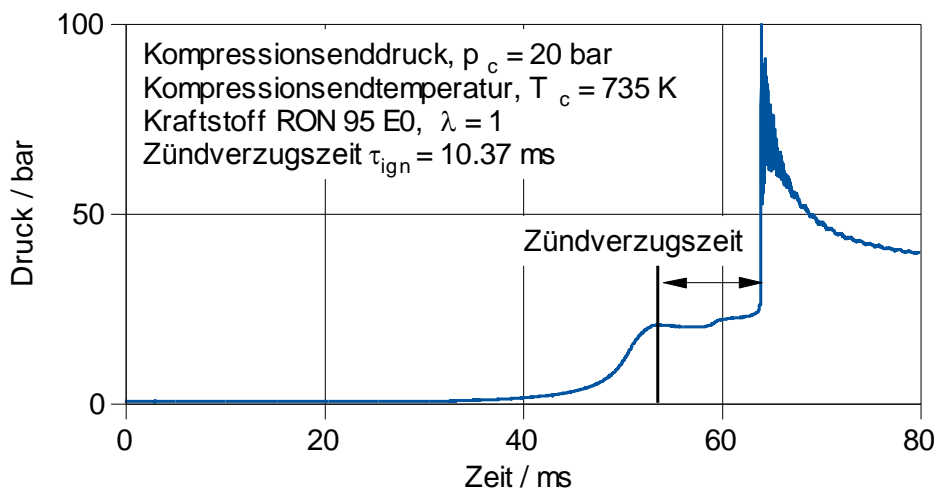


Abbildung 4-3. Zylinderdruckverlauf gemessen im Einhubtriebwerk des PCFC (RWTH Aachen University).

Es ist zu erkennen, wie nach Erreichen des Kompressionsenddruckes die Zündverzugszeit verstreicht bis ein deutlicher Druckanstieg detektiert wird. Weiterhin wird klar, dass die Kompressionszeit des Kolbens zwar sehr kurz ist, aber in Relation zur Zündverzugszeit nicht vernachlässigt werden kann. Ideal wäre ein Start des Experiments bei Kompressionsendzustand, damit erst bei solchen Drücken und Temperaturen die Reaktionen des Gasgemisches beginnen. Somit liefert dieser Versuch den direkten Zusammenhang zwischen einer initialen Gemischtemperatur und der daraus hervorgehenden Zündverzugszeit. In der Realität laufen aber während der Kompression bereits Vorreaktionen ab, da beim Durchlaufen der Polytropen bereits reaktionsrelevante Temperaturniveaus passiert werden. Diese Effekte wurden jedoch in der weiteren Auswertung und Modellbildung miteingebunden.

Simulationen der homogen-vorgemischten Zündung von Luft-Kraftstoff-Gemischen wurden in einem nulldimensionalen Reaktor mit dem Chemielöser *CANTERA* durchgeführt. Der Verlauf der Kompression sowie der Effekt von Wärmeverlusten wurden unter Annahme eines adiabaten Kerns im Reaktor berücksichtigt anhand einer effektiven Volumenänderung [116].

## 4.2 Untersuchungen am AFIDA (Advanced Fuel Ignition Delay Analyzer)

Zur weiterführenden Betrachtung der Kraftstoffe wurden diese an einer beheizten Konstantvolumenbrennkammer hinsichtlich ihres Selbstzündverhaltens untersucht. Abbildung 4-4 zeigt eine Schemazeichnung der verwendeten Konstantvolumenbrennkammer.

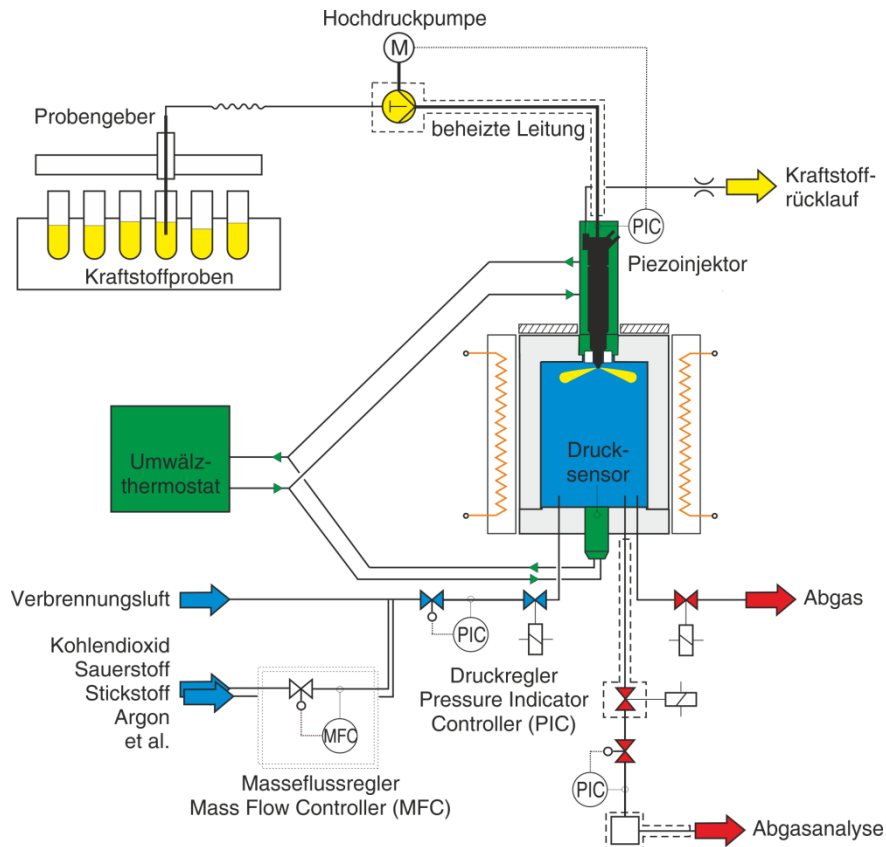


Abbildung 4-4. Schematischer Aufbau der Konstantvolumenbrennkammer (AFIDA).

Die Probe wird mit Hilfe einer modifizierten HPLC (High Performance Liquid Chromatography) Pumpe auf 1000 bar verdichtet und über einen Piezoinjektor in die beheizte und unter Druck stehende Brennkammer eingespritzt. Ottokraftstoffe entzünden sich aufgrund der gewählten Randbedingungen (700 °C Brennkammerinnentemperatur, 40 bar Brennkammerdruck) spontan. Eine externe Zündquelle in Form einer Zündkerze wird nicht benötigt. Ursprünglich entwickelt um den Zündverzug von Dieselmotoren zu untersuchen stellt sich im Grundzustand des Versuchsträgers je nach Luftbedarf des Kraftstoffes etwa ein mittleres rel. Luft-Kraftstoff-Verhältnis von 4 ein. Da der Inhalt der Brennkammer zum Zeitpunkt der Zündung nicht homogen vorliegt, vollzieht sich die Zündung bei lokalen rel. Luft-Kraftstoff-Verhältnissen deutlich unterhalb des mittleren Wertes der Kammer.

Da die Ansteuerdauer des Injektors ein konstanter Betriebsparameter im AFIDA ist, lässt sich ein definiertes mittleres Luft-Kraftstoff-Verhältnis nicht über die Kraftstoffmassen einstellen. Dies lässt sich nur vornehmen, indem das Sauerstoffverhältnis der in die Kammer geführten Luft variiert wird.

Im Falle eines stöchiometrischen Verhältnisses zwischen Sauerstoff und Kraftstoff bedeutet dies eine deutliche Absenkung des Sauerstoffpartialdruckes, also eine Verdünnung der Kammerluft. Diese Verdünnung hat eine erhebliche Anhebung des Brennverzuges um meh-

rere Größenordnungen zur Folge. Um diese langen Zündverzüge zu vermeiden wurde daher ein Betrieb der Kammer mit Grundeinstellungen präferiert.

In Abbildung 4-5 ist eine Darstellung der Kammerdruckverläufe für verschiedene AFIDA-Experimente zu sehen. Zur Auswertung der während der Einspritzung und Verbrennung der Kraftstoffe gemessenen Druckverläufe werden feste Druckschwellen im Druckverlauf herangezogen. Der dargestellte Relativdruck ist dabei die Differenz zwischen dem Kammerdruck vor Beginn der Injektoransteuerung (Zeitpunkt 0 ms) und dem gemessenen Druckverlauf. Es ist zu erkennen, dass zu Beginn der Messung eine Druckabsenkung infolge der Verdampfungskühlung in der Kammer zu verzeichnen ist. Nach einer gewissen Zeit steigt anschließend der Druck infolge von chemischer Wärmefreisetzung wieder an. Erreicht der Brennkammerdruck die Druckschwelle von 1.5 bar, wird dieser Punkt als Einsetzen der Zündung festgehalten. Der zugehörige Zeitpunkt wird als Zündverzugszeit dokumentiert.

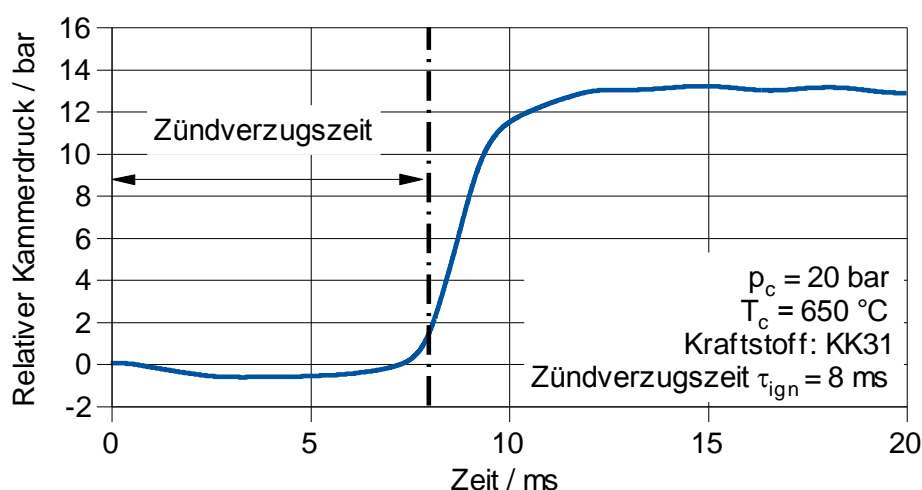


Abbildung 4-5. Exemplarischer Kammerdruckverlauf gemessen im AFIDA mit KK31 bei einem Kammerdruck bzw. einer Kammertemperatur bei Start der Einspritzung von 20 bar bzw. 650 °C.

Eine gute Vergleichbarkeit der Kraftstoffe untereinander ergibt sich, wenn der Zünd- und Verbrennungsprozess aller Substanzen einstufig erfolgt. Dies ist bei hohen Brennkammerinnentemperaturen ab ca. 650 °C der Fall. Brennkammerdrücke ab etwa 30 bar sorgen für ausreichend kurze Zündverzugszeiten im Bereich von 3 bis 6 Millisekunden.

Ein entscheidender Unterschied zwischen den Zündverzugszeiten aus diesem Verfahren und den Zündverzugszeiten aus dem Einhubtriebwerk ist der Einfluss der Gemischbildung. Während im Einhubtriebwerk ein vollständig homogenisiertes Luft-Kraftstoff-Gemisch nach Ablauf eines chemischen Zündverzuges umgesetzt wird, ist der Zündverzug in der AFIDA eine Überlagerung aus chemischem und physikalischem Zündverzug. Der physikalische Zündverzug ist dabei die Gemischbildungszeit die verstreicht, bis lokal eine zündfähige Mischung aus Kraftstoff und Sauerstoff vorliegt.

### 4.3 Untersuchungen am seriennahen Einzylinder-Motor

Neben den grundlegenden Betrachtungen im Einhubtriebwerk, wurde die ottomotorische Vorentflammung im Einzylinder-Forschungsmotor des Lehrstuhls für Verbrennungskraftmaschinen (VKA) der RWTH Aachen University thermodynamisch untersucht. Hierbei wurden zwei spezielle Formen der vorzeitigen Zündung betrachtet.

Die oberflächeninduzierte Vorentflammung (folgend **Glühzündung** genannt) ist eine Selbstzündung des Luft-Kraftstoff-Gemisches an einer heißen Oberfläche im Brennraum mit einer daraus hervorgehenden propagierenden Flamme. Die Vorentflammung aufgrund von thermodynamisch kritischen Zuständen in der reinen Gasphase (folgend **Gasphasenzündung** genannt) stellt ein lokales Überschreiten der Zündverzugszeit des Luft-Kraftstoff-Gemisches dar. Idealerweise findet diese Art der Selbstzündung unter Ausschluss von Öltropfen und in ausreichender Entfernung von heißen Oberflächen statt. Beide Phänomene wurden unter statistisch reproduzierbaren Betriebsrandbedingungen motorisch untersucht. Für die Glühzündung wurde dazu ein Glühstift, wie aus der dieselmotorischen Anwendung bekannt, seitlich in den Brennraum eingebracht und, instrumentiert mit einem Thermoelement, zur Erzeugung einer definierten heißen Oberfläche genutzt. Die Gasphasenzündung wurde hingegen ohne Glühstift sondern zufolge hoher Ladelufttemperaturen und -drücke herbeigeführt.

#### 4.3.1 Experimentelle Untersuchungen

Einige Spezifikationen des Versuchsträgers sind in Tabelle 2 aufgeführt. Der Einzylinder-Motor war nach dem aktuellen Stand der Technik ausgestattet. Ein Nockenwellensteller war auf Einlass- und Auslassseite verbaut. Der Kraftstoff wurde dem Motor über ein Common-Rail Einspritzsystem zugeführt. Der Raildruck wurde von einer mit Vordruck beaufschlagten Hochdruckpumpe aufgebracht.

Zusätzlich waren Trennbleche in den Einlasskanal eingesetzt, welche in Kombination mit einer vorgeschalteten Tumblewalze zur Generierung einer entsprechend tumbleförmigen Ladungsbewegung im Brennraum führte. Der Aufbau des Einzylinder-Forschungsmotors ist in Abbildung 4-6 ersichtlich. Darin geht die Anordnung der Zündkerze, des Injektors sowie des Glühstiftes im Brennraum hervor.

Tabelle 2. Technische Daten des Versuchsträgers.

Bohrung / mm	75
Hub / mm	90.5
Zylinderanzahl	1
Hubvolumen / cm <sup>3</sup>	400
Hub/Bohrungsverhältnis / 1	1.2
Ventile pro Zylinder	4
Maximaler Mitteldruck / bar	>30 (indiziert)
Verdichtungsverhältnis / 1	10.93
Zugelassener maximaler Zylinderspitzen- druck einzelner Verbrennungszyklen / bar	170
Einspritzinjektor	Mehrlochmagnetventil (HDEV) Bosch
Max. Kraftstoffdruck / bar	250
Verstellbereich Einlass öffnet / ° KW n. OT	- 15 bis 40
Eventlänge der Einlassventilöffnung zwischen 1 mm Ventilhub / ° KW	186
Maximaler Einlassventilhub / mm	9
Verstellbereich Auslass schließt / ° KW v. OT	- 50 bis 5
Eventlänge der Auslassventilöffnung zwischen 1 mm Ventilhub / ° KW	186
Maximaler Auslassventilhub / mm	9

Die Position des Glühstiftes wurde so gewählt, dass sich dessen gesamte Oberfläche in ausreichender Distanz zu den Sprühstrahlen des Injektors befand. Dadurch wurde eine direkte Benetzung der Glühstiftoberfläche mit flüssigem Kraftstoff vermieden. Prinzipbedingt wurde der Einzylinder-Motor mit einer externen Ladegruppe versorgt. Die Aufladung war dreistufig mit mechanischen Rootsverdichtern und Zwischenkühlung ausgeführt. Die Ansauglufttemperatur im Einlasskanal wurde über eine zusätzlich nachgeschaltete Ladeluftkonditionierung realisiert. Der erforderliche Abgasgegendruck wurde betriebspunktabhängig über eine Wastegateklappe im Abgassystem geregelt.

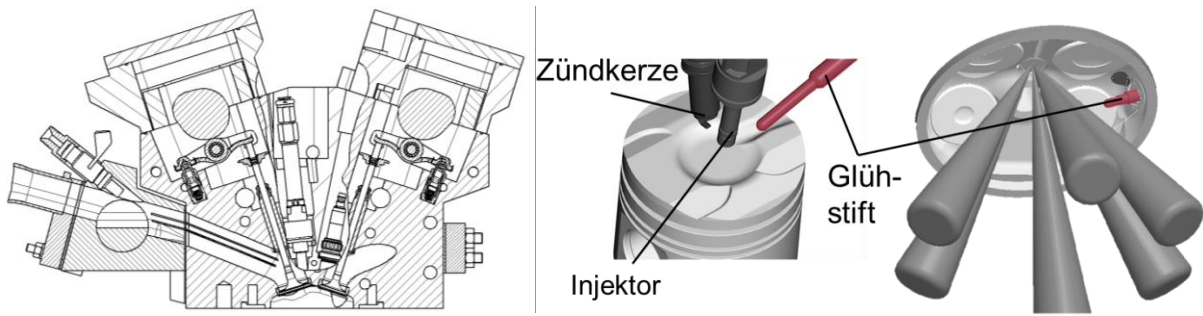


Abbildung 4-6. Schnittdarstellung des Zylinderkopfes mit Ventildeckel und Tumble-System (links), Kolben mit Zündkerze, Glühstift und Injektor (mittig), Brennraumdach mit Spraykeulen und Glühstift (rechts).

Für optische Untersuchungen des Verbrennungseigenleuchtens war der Zylinderkopf mit endoskopischen Zugängen ausgestattet. Für die Experimente zur Glühzündung wurden die betrachteten Kraftstoffe mittels Glühstift an einer definierten Position im Brennraum zur Selbstzündung gebracht. Ein Thermoelement, welches in der keramischen Spitze des Glühstiftes verbaut war, überwachte die Glühstifttemperatur. Die Versuchsparameter sind in Tabelle 3 abgebildet.

Tabelle 3. Versuchsrandbedingungen der Glühzündungsmessungen.

Drehzahl / 1/min	1500
Ladedruck / mbar	1500
Abgasgegendruck / mbar	1500
Abgasverbrennungsluftverhältnis $\lambda$ / 1	1
Einlasssteuerzeit bezogen auf 1 mm Ventilhub / ° KW vLWOT	-10
Auslasssteuerzeit bezogen auf 1 mm Ventilhub / ° KW vLWOT	10
Kraftstoffdruck / bar	200
Ansteuerbeginn des Injektors / ° KW vZOT	300
Einlasskanaltemperatur / °C	30
50 % Umsatzschwerpunkt / ° KW nZOT	44-45
Abschaltlimit Zylinderdruck / bar	200

In Kombination mit der zugrunde gelegten Verbrennungsschwerpunktlage und der Einbaulage des Glühstiftes ergab sich eine Glühstifttemperatur von ca. 670 °C ohne externe Zufuhr elektrischen Stromes. Ausgehend von dieser Minimaltemperatur wurde der Glühstift zunächst bestromt bis eine Glühstifttemperatur erreicht war, welche eine kritische Vorentflammungshäufigkeit beobachten ließ. Dieser Punkt wurde als Maximaltemperatur definiert, ohne ein deutliches Ausfallrisiko des Einzylinders in Kauf nehmen zu müssen. Die Messprozedur ausgehend von dieser maximalen Glühstifttemperatur und die daraus gewonnenen Vorentflammungsdaten sind in Abbildung 4-7 illustriert.



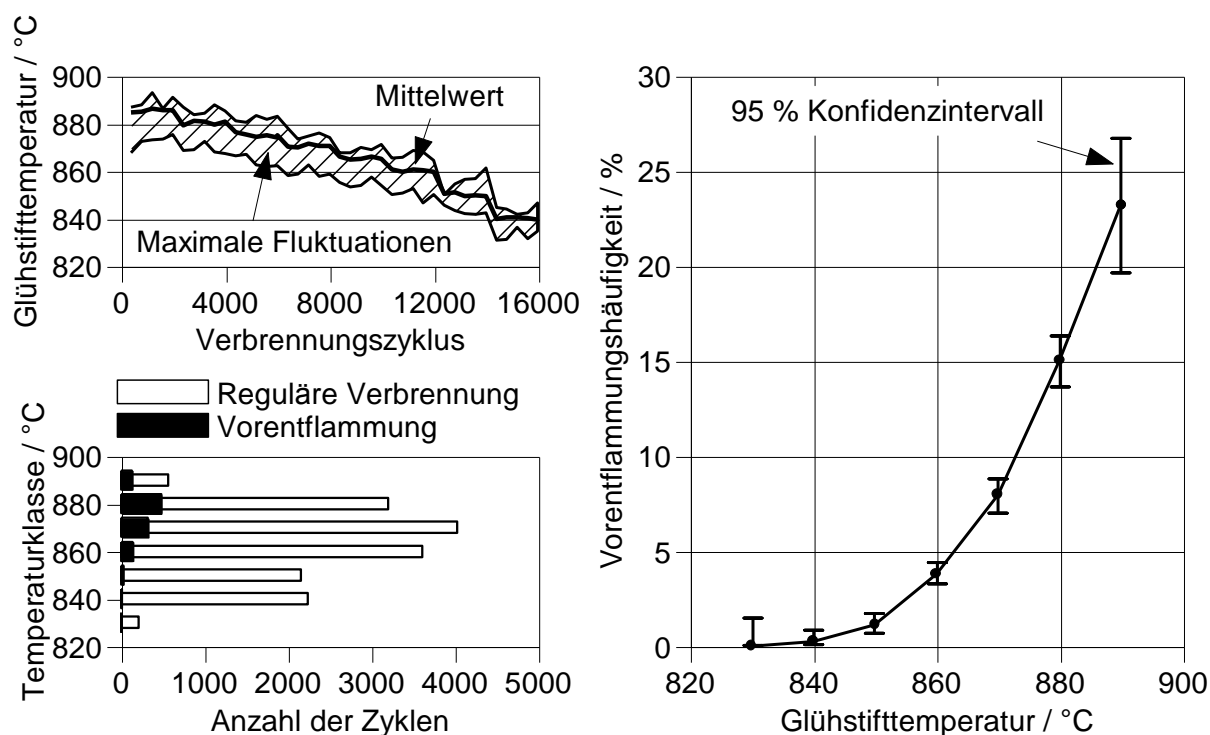


Abbildung 4-7. Temperaturschwankungen im Glühstift und statistische Verteilung der Glühstifttemperaturmessung in Temperaturklassen von 10 °C Breite.

Nach Einstellen der stationären Betriebsrandbedingungen wurden 2000 Zyklen mit jeweils verschiedenen Glühstifttemperaturniveaus messtechnisch erfasst. Dabei ließ sich die Glühstifttemperatur besonders bei zunehmender Vorentflammungshäufigkeit nur in einem Temperaturbereich von max.  $\pm 10$  °C regeln, da die Temperatur des Glühstiftes neben der externen Stromzufuhr auch von der abwechselnd heißen und kalten Umgebung im Brennraum abhängig war. Diese Temperaturschwankungen konnten nicht in Gänze durch die Temperaturregelung der Glühstiftsteuerung kompensiert werden. Dies hat zur Folge, dass einzelne Vorentflammungsevents einer vom Mittelwert abweichenden Glühstifttemperatur entspringen. Im oberen linken Bild in Abbildung 4-7 wird dieser Sachverhalt dargestellt. Darin sind die mittleren Glühstifttemperaturen und deren maximale Schwankungsbreite dargestellt, wie sie in jedem Experiment über 2000 Zyklen gemessen wurden. Diese Schwankungsbreite erfordert eine statistische Bewertung der Vorentflammungen, weswegen die Glühstifttemperaturen in einzelne Klassen mit einer Temperaturbreite von 10 °C zusammengefasst werden. Die untere linke Darstellung in Abbildung 4-7 ist die klassierte Temperaturverteilung für die Messungen aus dem oberen linken Diagramm der Abbildung 4-7. Überführt man die Verteilung der Vorentflammungen im Balkendiagramm in Abbildung 4-7, in eine Häufigkeitsverteilung, ergibt sich die Kurve auf der rechten Seite in der gleichen Abbildung. Das 95 %-Konfidenzniveau der resultierenden Vorentflammungshäufigkeit ist durch die Fehlerbalken gekennzeichnet. Dieses Intervall gibt an, in welchem Bereich die gemessenen Daten mit 95 prozentiger Wahrscheinlichkeit liegen.

Je enger dieser Bereich eingegrenzt werden kann, desto höher ist die Relevanz der Ergebnisse. Es wird deutlich, dass das 95 %-Konfidenzintervall im Bereich von Häufigkeiten zwischen 2-10 % eine hohe statistische Sicherheit aufweist.

Die Identifizierung von Vorentflammungen erfolgt über eine Analyse des Heizverlaufs der Verbrennung. Mit Hilfe des Heizverlaufes kann folgend beurteilt werden, ob ein früher Verbrennungsfortschritt durch eine Fremdzündung mittels Zündkerze initiiert worden ist, oder auf eine Vorentflammung zurückgeführt werden muss. Die Vorgehensweise der experimentellen Untersuchung zur Gasphasenzündung ist ähnlich zu jener der Glühzündungsuntersuchung. Die Unterschiede in der Methodik sind lediglich eine höhere Ladelufttemperatur sowie eine Ladedruckvariation anstelle des Glühstiftes zur Darstellung hinreichend kritischer Randbedingungen. Das Messfenster beträgt hierbei 1000 Verbrennungszyklen pro Ladedruckniveau. Tabelle 4 zeigt die diesbezüglichen Betriebsparameter.

Tabelle 4. Versuchsrandbedingungen der Messungen zur Gasphasenzündung.

Drehzahl / 1/min	1500
Ladedruck / mbar	variabel
Abgasgegendruck / mbar	entspricht Ladedruck
Abgasverbrennungsluftverhältnis $\lambda$ / 1	1
Einlasssteuerzeit bezogen auf 1 mm Ventilhub / ° KW vLWOT	-10
Auslasssteuerzeit bezogen auf 1 mm Ventilhub / ° KW vLWOT	10
Kraftstoffdruck / bar	200
Ansteuerbeginn des Injektors / ° KW vZOT	300
Einlasskanaltemperatur / °C	100
50 % Umsatzschwerpunkt / ° KW nZOT	44-45
Abschaltlimit Zylinderdruck / bar	200

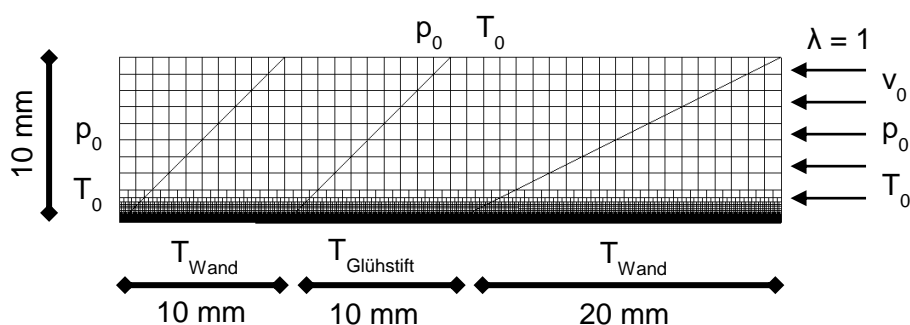
Um die Messergebnisse vom Einzylinder-Motor mit physikalischen Stoffeigenschaften und CFR-Kennzahlen in Zusammenhang zu bringen, ist es sinnvoll die Vorentflammungscharakteristik der Kraftstoffe aus den Einzylinder-Experimenten zunächst auf eine Kennzahl zu reduzieren. Dazu wird diejenige Glühstifttemperatur bzw. derjenige Ladedruck gewählt, bei welcher/welchem gerade eine Vorentflammungshäufigkeit von 2 % zu beobachten ist. Die entsprechende Glühstifttemperatur wird im weiteren Verlauf mit  $T_{2\%VEH}$  bzw. der entsprechende Ladedruck mit  $p_{2\%VEH}$  abgekürzt.

### 4.3.2 Numerische Untersuchungen

Ziel der Strömungssimulationen war das Aufzeigen der Wirkmechanismen im Motor, die zum Auftreten von Vorentflammung führen. Dazu galt es die genauen Umstände im Zylinder zu erfassen, welche zur Zündung des Luft-Kraftstoff-gemisches am heißen Glühstift bzw. in der Gasphase führten. Somit war sowohl die Strömung als solche, wie auch die Reaktionskinetik dieser Strömung einzubeziehen.

#### 2D Strömungssimulationen einer reaktiven Grenzschichtströmung

Ein Teil der numerischen Strömungssimulationen konzentrierte sich auf die qualitative Bewertung des Einflusses der Strömungsgeschwindigkeit auf die Entflammbarkeit des Luft-Kraftstoff-Gemisches an einer heißen Oberfläche. Dazu wurden transiente RANS-Simulationen unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen in der Gasphase durchgeführt. Das Gas wurde dabei unter verschiedenen stationären thermodynamischen Randbedingungen senkrecht zu einer heißen Oberfläche strömend initialisiert wie in Abbildung 4-8 zu sehen ist.



Kraftstoff	$v_0 / \text{m/s}$	$T_0 / ^\circ\text{C}$	$p_0 / \text{bar}$
KK2 – PRF95	5, 10, 20	450, 480	35
Isooktan	5, 10, 20	450	35
Ethanol	5, 10, 20	450	35

Abbildung 4-8. Rechennetz und Randbedingungen der 2D-CFD Simulationen.

Die Randbedingungen wurden so gewählt, dass Gastemperatur und -druck ( $T_0$  und  $p_0$ ) den Zustand im Zylinder während der Glühzündungsexperimente im Einzylinder-Motor hinreichend abbilden. Unter diesem Gesichtspunkt wurde auf Basis verschiedener Strömungsgeschwindigkeiten  $v_0$  zwischen 5 und 20 m/s eine Variation der Oberflächentemperatur  $T_{\text{Glühstift}}$  vorgenommen. Die Zündverzugszeiten, welche innerhalb dieser Variationen resultierten, gaben Aufschluss über die Neigung zur Oberflächenzündung.

Für diese Untersuchung wurde eine reduzierte Kraftstoffauswahl nach der Tabelle in Abbildung 4-8 gewählt.

Der chemische Reaktionsmechanismus, welcher hier zum Einsatz kam wurde aus [117] entnommen. Ein Vorteil dieses Reaktionsmechanismus ist sein für diese Untersuchungen ausgewogener Umfang an verwendeten Reaktionsspezies von 203. Dies erlaubte zum einen hinreichend kurze Simulationszeiten, welche bei der hohen Anzahl an Simulationen notwendig war um den Rechenaufwand auf ein sinnvolles Maß zu reduzieren. Zum anderen ließen sich mit diesem Mechanismus die drei Kraftstoffe in Abbildung 4-8 gleichermaßen gut modellieren. Die Verwendung eines gemeinsamen Reaktionsmodells war für einen verlässlichen Vergleich der Ergebnisse wichtig. Weiterhin war das Rechengitter aus Abbildung 4-8 hinreichend fein strukturiert um eine räumliche Auflösung der Strömungs- und Geschwindigkeitsgrenzschicht sicherzustellen.

### 3D Strömungssimulationen der Zylinderinnenströmung

Einen detaillierteren Einblick in die Entstehung von Glühzündungen unter motorischen Bedingungen bieten numerischen Strömungssimulationen der Zylinderinnenströmung. Für diese Simulationen wurde zunächst für jeden analysierten Kraftstoff eine Teilzyklussimulation von 270° KW bis 750° KW nZOT durchgeführt, inklusive Ausschleiben, Saughub mit Kraftstoffdirekteinspritzung, Kompression und Expansion bis 30° KW nZOT. Die Simulation bot anschließend die Initialbedingungen für eine Variation der Glühstifttemperatur auf einem Kurbelwinkelfenster von -40° KW nZOT bis zum Zündwinkel der Fremdzündung. Für diese Variation wurde die dreidimensionale Simulation mit einem Chemielöser gekoppelt.

Die Randbedingungen für die Simulationen wurden von einem 1D Ladungswechselmodell abgeleitet und in *GT-Power* implementiert. Das Ladungswechselmodell wurde entsprechend des Einzylinder-Forschungsmotors aufgebaut und anhand von Messdaten des zugeführten Luftmassenstromes, Kraftstoffverbrauches, der indizierten Drücke im Zylinder und dem Einlass- und Auslasskanal, Lade- und Gegendruck, Ladelufttemperatur und Ventilsteuerzeiten abgeglichen.

Basierend auf diesem Ladungswechselmodell ließ sich die zeitlich aufgelöste Informationen von Druck und Temperatur der Strömung am Einlass- und Auslassrand des CFD-Modells ableiten, welches in Abbildung 4-9 dargestellt ist.

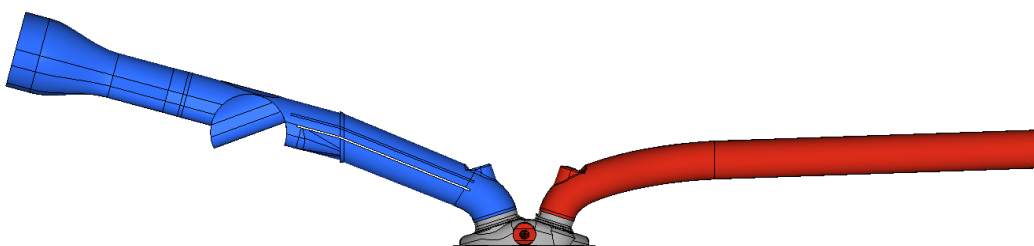


Abbildung 4-9. 3D-CFD Zylindermodell. Einlass links und Auslass rechts im Bild.

Die dreidimensionale Simulation der Gasströmung im Zylinder wurde mit dem kommerziellen CFD code *Converge CFD* Version 2.3 durchgeführt. Beide Phasen, gasförmig und flüssig, wurden als ideal angenommen, wobei physikalische Stoffeigenschaften als Funktionen der Temperatur modelliert wurden. Die Strömung wurde auf Basis einer Finite-Volumen-Diskretisierung der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen berechnet, wobei die turbulenten Geschwindigkeitsfluktuationen mit Hilfe des *k- $\omega$  shear stress* Models abgebildet wurden. Die Kraftstoffdirekteinspritzung wurde auf Basis einer Parcel-Diskretisierung der flüssigen Kraftstofftropfen simuliert, wobei die Bewegung der Tropfen mit der Lagrange'schen Betrachtungsweise abgebildet wurde.

Der Strahlaufbruch wurde modelliert unter Einbeziehung von Rayleigh-Taylor- und Kelvin-Helmholtz-Instabilitäten. Beide Phänomene sind implementiert im Kelvin-Helmholtz-Rayleigh-Taylor-Model [71, 118]. Das Kuhnke Model wurde herangezogen um Tropfen-Wand Interaktion zu berücksichtigen [77].

#### 4.4 Untersuchungen am CFR-Motor

Grundlage einer möglichen industriellen Akzeptanz neuer Kennzahlen stellt die weiterführende Verwendung des genormten CFR-Prüfmotors dar. Demzufolge fand die Kennzahlbestimmung auf dem CFR-Prüfmotor des Institutes für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik (IFA) der TU Wien statt. Im FVV Vorhaben M1078 „Downsizingkraftstoff“ wurde bereits auf die Notwendigkeit der Modifikation des ROZ bzw. MOZ Prüfverfahrens zur Abbildung eines modernen Brennverfahrens eingegangen. Grundvoraussetzung für die Optimierung des CFR-Aggregates war die Möglichkeit zwischen den Betriebsbedingungen der genormten Verfahren laut [114, 119] und neu entwickelter Verfahren mit möglichst geringem Aufwand zu wechseln. Folgende wesentliche Adaptionen wurden in [16] vorgenommen:

- Direkteinspritzender (DE) Injektor mit 60 bar Systemdruck unter Beibehaltung der Möglichkeit des Vergaserbetriebes nach [114, 119]
- Modernes Zündsystem (Zündspule)
- Glühstift inkl. Temperaturüberwachung mittels Thermoelement. Einbauposition anstelle des normgerechten Pick-Up-Sensors zur Klopfstärkendetektion.
- Hochdruckindiziermesstechnik zur Klopfbewertung des zu prüfenden Kraftstoffes.

In Abbildung 4-10 sind in Rot die wesentlichen Änderungen am Zylinderkopf anhand einer Schnittdarstellung des Motors zu erkennen. Für einen genaueren Einblick in die Optimierungsmaßnahmen des modifizierten CFR-Motors sei auf [16] verwiesen.

Auf Basis des modifizierten Aggregates wurden die folgenden drei Kennzahlen in [16] entwickelt:

- CPI (Compression Pre-Ignition Kennzahl)
- HSPI (Hot Surface Pre-Ignition Kennzahl)
- DION bzw. DOZ (Direct Injection Octane Number bzw. Direkteinspritzende Oktanzahl)

Die CPI und HSPI dienen der Charakterisierung des Vorentflammungsverhaltens eines Kraftstoffes. Hierbei soll die CPI Selbstzündungen zufolge einer kritischen Gasphase im Brennraum abbilden und die HSPI die oberflächeninduzierten Vorentflammung. Das Entwicklungsziel der DOZ hingegen ist das Klopfverhalten der Kraftstoffe in modernen Ottomotoren zu bewerten.

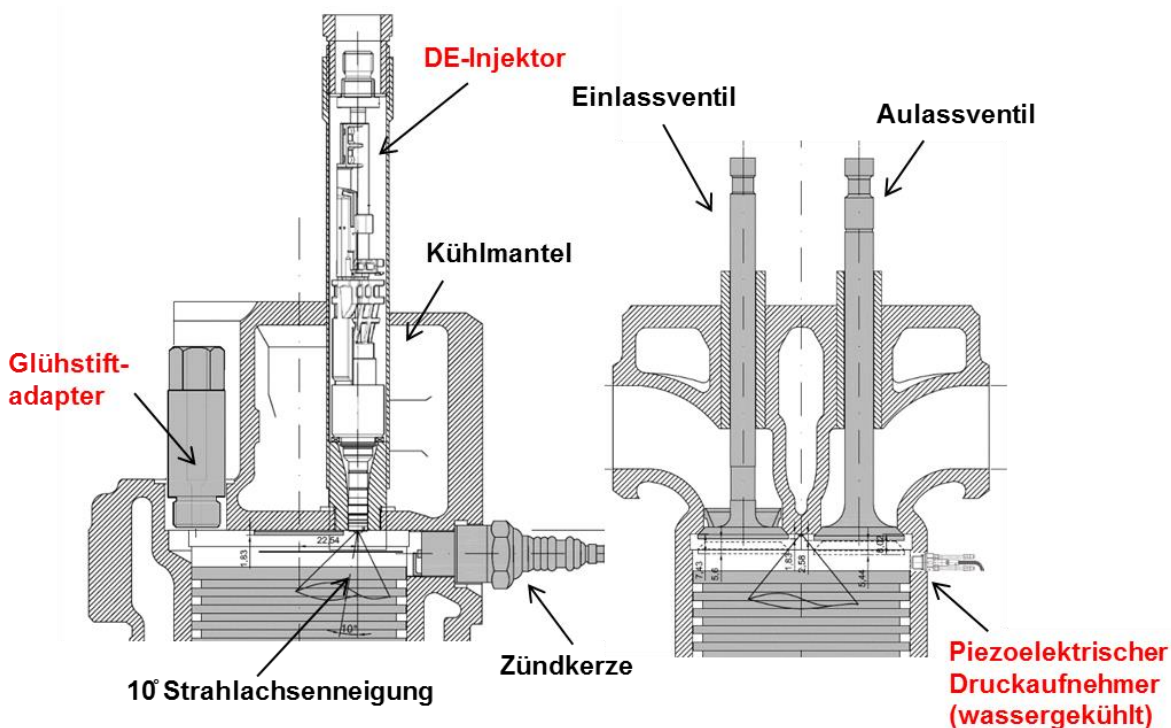


Abbildung 4-10. Schnittdarstellung des modifizierten CFR-Prüfmotors. DE-Injektor und Druckaufnehmer machten Bohrungen im Zylinderkopf notwendig. Der Glühstiftadapter ist anstatt des Pick-Up-Sensors verbaut.

Der Fokus dieses Projektes lag in der Bewertung des Vorentflammungsverhaltens eines Kraftstoffes, weshalb auf die Validierung der DOZ im vorliegenden Beitrag nicht eingegangen wird.

Bezüglich der Kennzahlen ist zu beachten, dass der Schwerpunkt des entsprechenden **Vorgängerprojektes auf Kraftstoffe hohen Alkoholanteiles** (bis zu 100 % Alkohol) lag und in diesem Projekt deren Anwendbarkeit auf reale Mischkraftstoffe übertragen werden sollte.

Im Zuge dieses Projektes hatte sich herausgestellt, dass die Anwendbarkeit der in [16] definierten Kennzahlen auf konventionellen Kraftstoffen nicht gegeben ist und dementsprechend Adaptionen notwendig wurden. Näheres dazu in Kapitel 5.3.2.

In der folgenden Tabelle 5 sind die CFR-Betriebsbedingungen aller relevanten Kraftstoffkennzahlen, inklusiver jener nach [16] definierten, im Überblick dargestellt.

Das **Messverfahren der CPI** beruht auf dem variablen Verdichtungsverhältnis des CFR-Prüfmotors unter konstanter Verbrennungsschwerpunktlage. Als Bewertungskriterium der Selbstzündungsneigung zufolge einer kritischen Gasphase wird jenes Verdichtungsverhältnis herangezogen, welches die Selbstzündung des Kraftstoffes bewirkt.

Im Unterschied dazu sieht die **Messmethodik der HSPI** eine konstante Verbrennungsschwerpunktlage unter konstantem Verdichtungsverhältnis vor. Ein bestromter Glühstift, analog der Glühstiftuntersuchung in Kapitel 4.3, führt das Luft-Kraftstoff-Gemisch in einen kritischen Selbstzündungszustand über. Die dafür notwendige maximale Glühstifttemperatur wird zur Berechnung der HSPI verwendet.

Tabelle 5. CFR-Betriebsbedingung relevanter Kraftstoffkennzahlen [16, 120, 114].

Betriebsbedingung	ROZ	MOZ	DOZ	CPI	HSPI
Gemischbildung	Vergaser	Vergaser	DE	DE	DE
Drehzahl / 1/min	600	900	900	900	900
Zündzeitpunkt (ZZP) / ° KW vZOT	13	f( $\epsilon$ )	f( $\epsilon$ )	f(MFB50%)	f(MFB50%)
50% Umsatzschwerpunkt (MFB50%) / ° KW nZOT	f(ZZP)	f(ZZP)	f(ZZP)	35	25
Ansauglufttemperatur / °C	52	38	149	200	149
Gemischtemperatur / °C	-	149	-	-	-
Abgasverbrennungs- luftverhältnis $\lambda$ / 1	variabel	variabel	1	1	1
Einspritzende / ° KW vZOT	-	-	203	203	203
Kraftstoffraildruck / bar	-	-	60	60	60
Verdichtungsverhältnis $\epsilon$ / 1	variabel	variabel	variabel	variabel	7

Im Unterschied zu [16] wurde bei der HSPI das Verdichtungsverhältnis von 8 auf 7 reduziert, da in der vorliegenden Kraftstoffmatrix einige Kraftstoffe bereits bei einer Verdichtung von 8 und einer Ansauglufttemperatur von 149 °C zu Verbrennungsanomalien neigten.

Das Messverfahren der **DOZ** basiert ähnlich der CPI auf einem variablen Verdichtungsverhältnis. In diesen Fall wird der zu prüfende Kraftstoff jedoch nicht zur Vorentflammung gebracht sondern, **analog der MOZ-Methodik ein definiertes Klopfniveau eingestellt**.

Als Referenzkraftstoff der Kennzahlen CPI, HSPI und DOZ dient der Reinstoffe 2,2,4-Trimethylpentan (Isooktan, ON100). Die detaillierte Messmethodik der einzelnen Kennzahlen ist in [16] beschrieben.

#### 4.5 Untersuchungen am Vollmotor

Mit dem Ziel der Entwicklung einer geeigneten Kennzahl zur Beschreibung des Vorentflammungsverhaltens unterschiedlicher Kraftstoffe im realen Motorbetrieb war es unumgänglich ein aktuelles Serienaggregat als Versuchsträger bereitzustellen. Um dieser Vorgabe zu entsprechen und eine Validierung durchführen zu können, war am Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik (IFA) der TU Wien ein moderner aufgeladener Dreizylinder-Ottomotor zur Verfügung gestellt. Die wesentlichen Spezifikationen des Versuchsträgers sind in nachstehender Tabelle 6 aufgelistet. Auf Basis des Vollmotors wurde unter statistisch reproduzierbaren Betriebsbedingungen das Vorentflammungsverhalten der Kraftstoffe untersucht. Die Messmethodik unterscheidet sich von jener des Einzylinder-Forschungsmotors, da als Variationsparameter die Ansauglufttemperatur unter konstantem Saugrohrdruck diente.

Tabelle 6. Technische Daten des Dreizylinder-Serienmotors.

Bohrung / mm	74
Hub / mm	77.4
Zylinderanzahl	3
Hub/Bohrungsverhältnis / 1	1.05
Hubvolumen / cm <sup>3</sup>	999
Ventile pro Zylinder	4
Verdichtungsverhältnis / 1	10.5

Tabelle 7 beschreibt die Betriebsparameter der Vorentflammungsuntersuchung. Um das Ladedruckniveau auch bei hohen Saugrohrtemperaturen darstellen zu können wurde die Abgasurboaufladung des Versuchsträgers um eine externe mechanische Aufladung erweitert.



Tabelle 7. Versuchsrandbedingungen der Vorentflammungsuntersuchung am Dreizylinder-Ottomotor.

Drehzahl / 1/min	1500
Ladedruck abs. / mbar	2000
Abgasverbrennungsluftverhältnis $\lambda$ / 1	1.00
Einlasssteuerzeit bezogen auf 1mm Ventilhub / ° KW vLWOT	10
Auslasssteuerzeit bezogen auf 1mm Ventilhub / ° KW vLWOT	10
Kraftstoffdruck / bar	120
Ansteuerbeginn des Injektors / ° KW vZOT	265
Einlasskanaltemperatur / °C	variabel
50 % Umsatzschwerpunkt (MFB50%) / ° KW nZOT	45

Das Beurteilungskriterium der Vorentflammungsneigung eines Kraftstoffes ist jene Ansauglufttemperatur, welche zu ersten Verbrennungsanomalien führte. Als Definitionskriterium einer Vorentflammung wurde in diesem Experiment der Zeitpunkt 2 % umgesetzter Gemischmasse (MFB2%) und der maximale Zylinderdruck der Verbrennung herangezogen. Der Versuchsablauf sah eine schrittweise Steigerung der Ansauglufttemperatur um 5 °C vor. Der Motor wurde bei jeder Temperaturstufe 3 Minuten (2250 Zyklen je Zylinder) unter konstanten Bedingungen betrieben. Das Experiment war abgeschlossen sobald erste Vorentflammungen innerhalb des Messfensters detektiert wurden. Da der Versuchsträger keine Glühstiftadaptation erfuhr, wurde die Validierung der Glühzündungskennzahl HSPI lediglich am Einzylinder-Forschungsmotor vorgenommen.

Jedem Prüfzyklus zur Vorentflammungsuntersuchung ging ein Ölwechsel voraus um vergleichbare Ausgangsbedingungen für die Analysen zu schaffen. Dementsprechend kann man eine Ölverdünnung durch den zuvor getesteten Kraftstoff ausschließen. Bei dem verwendeten Öl handelt es sich um ein Motoröl der Viskositätsklasse 5W30. Dieses wurde zu Projektbeginn in ausreichender Menge zur Verfügung gestellt um sicherzustellen, dass es sich um dasselbe Motoröl handelt.

## 5 Ergebnisse und Diskussion

In diesem Abschnitt werden Ergebnisse der experimentellen und numerischen Versuche vorgestellt. Diese umfassen eine detaillierte Bewertung des Zündverhaltens der zu prüfenden Kraftstoffe im Einhubtriebwerk und im AFIDA sowie die Analysen des Vorentflammungsverhaltens der Kraftstoffe am CFR-Prüfmotor bzw. Einzylinder-Forschungsmotor. Die daran anschließende Validierung der Ergebnisse des AFIDA bzw. CFR-Motors am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. Dreizylinder-Serienaggregat gibt Aufschluss über die Belastbarkeit

der potenziellen Prüfverfahren. Des Weiteren wird untersucht inwiefern sich ein Zusammenhang zwischen der Kraftstoffzusammensetzung und dessen Vorentflammungsneigung herstellen lässt.

### **5.1 Analyse und Bewertung des Selbstzündungsverhaltens der Kraftstoffe**

Zu Beginn des Projektes wurde eine breite Datenbasis aller zu untersuchenden Kraftstoffe erstellt. Diese Analysen beinhalteten die Bestimmung der normierten Kennzahlen ROZ, MOZ am normgerechten CFR-Motor sowie die Ermittlung der neuen Kennzahlen CPI und HSPI laut [16] am modifiziertem CFR-Aggregat. Zusätzlich wurde eine umfassende Bewertung der Zündverzugszeiten am Einhubtriebwerk sowie dem AFIDA durchgeführt.

#### **5.1.1 Kraftstoffbewertung auf Basis der Zündverzugszeit**

Bei den nachfolgend dargestellten Ergebnissen wird zwischen der chemischen Zündverzugszeit, gemessen am Einhubtriebwerk und einer kombinierten chemisch/physikalischen Zündverzugszeit, gemessen im AFIDA, unterschieden. Wie bereits in Kapitel 4 erwähnt liegt die Ursache der differenzierten Betrachtung in der Messmethodik der Versuchsträger.

#### **Untersuchung des chemischen Zündverzuges im Einhubtriebwerk**

Ein Teil der Ergebnisse aus den Zündverzugszeitmessungen ist in Abbildung 5-1 zu sehen. Darin ist die Einhüllende aller Kraftstoffe in Grau gekennzeichnet, für die eine ROZ von 95 gemessen wurde. Es ist festzuhalten, dass die Zündverzugszeiten der Kraftstoffe zwischen 400 und 460 °C zunächst abfallen. Dieses Verhalten ist zu erwarten, wenn man davon ausgeht, dass eine gesteigerte Gastemperatur die Oxidationsvorgänge im Luft-Kraftstoff-Gemisch erhöhen sollte. Anders stellt es sich im Temperaturintervall zwischen etwa 460 und 560 °C dar. In diesem Bereich nimmt die Zündverzugszeit entgegen der üblichen Erwartung zu, obwohl die Temperatur der Proben ebenfalls steigt. Dieser Bereich spiegelt die NTC-Charakteristik der untersuchten Kraftstoffe wider. Die reaktionskinetische Ursache dieses Verhaltens wurde bereits detailliert in Kapitel 2.1 erläutert.

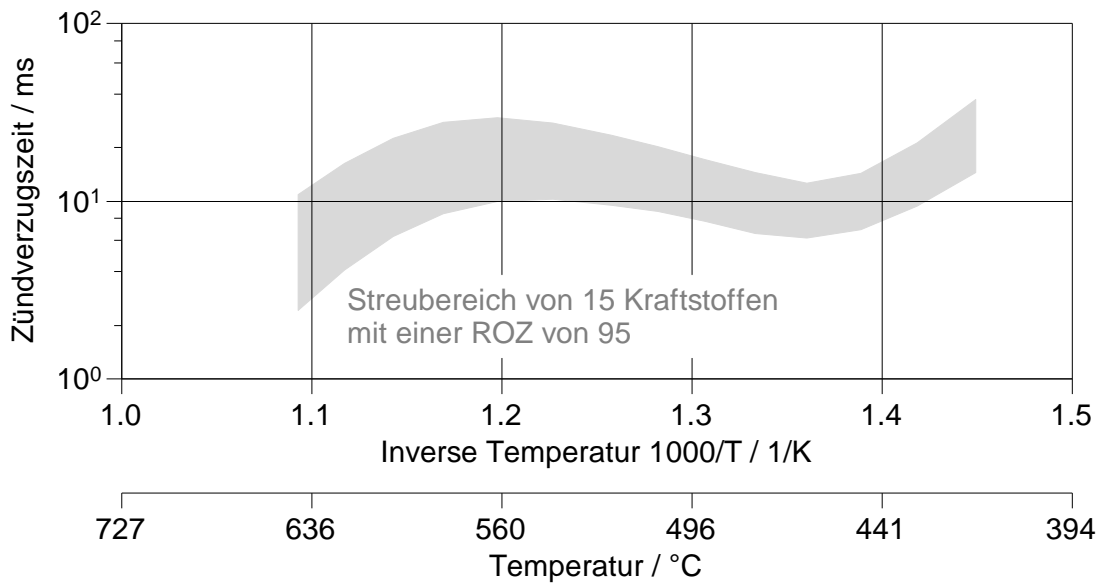


Abbildung 5-1. Zündverzugszeitmessungen aus 15 Kraftstoffen bei stöchiometrischen Luft-Kraftstoff-Verhältnis und 20 bar Kompressionsenddruck im Einhubtriebwerk.

Es ist zu erkennen, dass der Zündverzug der ROZ95 Kraftstoffe im Hochtemperaturbereich (>600 °C) eine Differenz von etwa 10 ms aufweist. Diese erheblichen Differenzen lassen bereits ein unterschiedliches Verhalten der Kraftstoffe bzgl. der oberflächeninduzierten Vor-entflammung erwarten, da diese signifikant durch die Hochtemperaturchemie der Kraftstoffe geprägt sein sollte. Dieser Sachverhalt ist nicht anhand der nahezu einheitlichen ROZ aller Kraftstoffe im grauen Streubereich zu erkennen, was die begrenzte Gültigkeit dieser Kennzahl untermalt.

Eine detaillierte Betrachtung des Zündverhaltens ist in Abbildung 5-2 exemplarisch anhand von vier analysierten Proben gegeben und soll die Relevanz der Zündverzugscharakteristik hervorheben. Bei den Kraftstoffen handelt es sich um den PRF95 Basiskraftstoff (95 % vol. Isooktan und 5 % vol. n-Heptan) (KK02) mit ausgeprägtem NTC-Verhalten sowie einem weiteren 3-Komponenten-Kraftstoff (KK09). Zusätzlich sind zwei Splash Blends aufgetragen.

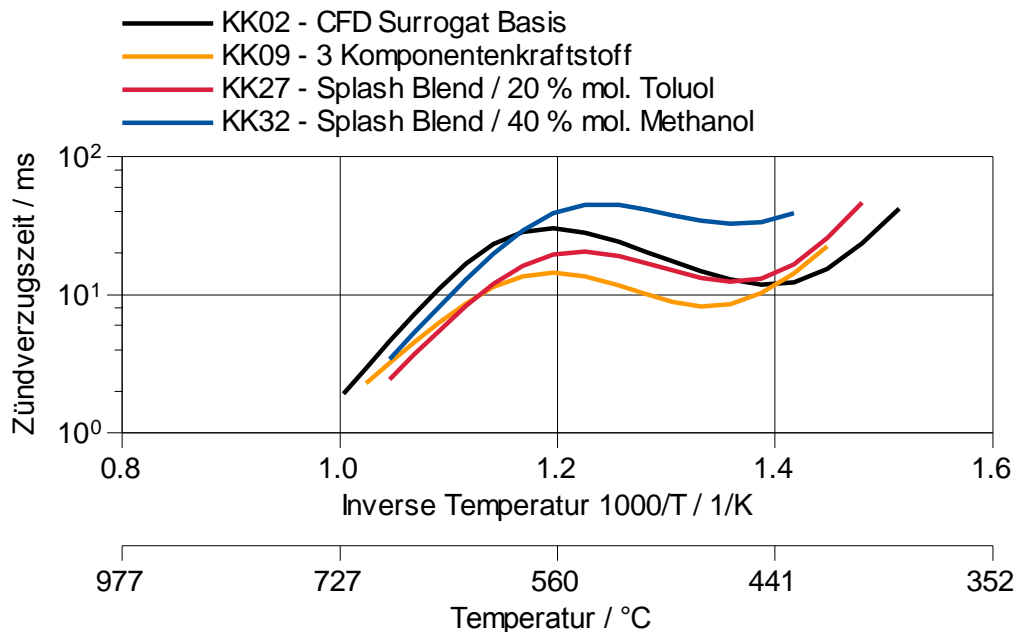


Abbildung 5-2. Zündverzugszeitmessungen ausgewählter Kraftstoffe am Einhubtriebwerk bei 20 bar Kompressionsenddruck und stöchiometrischem Luft-Kraftstoff-Verhältnis.

Vergleicht man die kraftstoffspezifischen Zündverzugszeiten im Temperaturintervall zwischen 440 und 600 °C mit jenen zwischen 600 bis 700 °C so zeigt sich zufolge der NTC-Charakteristik eine abweichende Zündreihenfolge der Kraftstoffe. Als Beispiel sei KK02 angeführt. Im Hochtemperaturbereich ab etwa 600 °C hat diese Probe im relativen Vergleich die höchste Zündverzugszeit bzw. die geringste Reaktivität. Der Kurvenverlauf liegt somit oberhalb aller anderen dargestellten Kraftstoffe. Im Niedertemperaturbereich hingegen ist eine deutlich höhere Reaktivität zu verzeichnen und ab ca. 440 °C zeigt KK02 sogar das reaktivste Zündverhalten.

Auf Basis dieser Analyse ist zu erkennen, dass speziell Kraftstoffe hohen Isooktan bzw. n-Heptan-Gehaltes eine ausgeprägte NTC-Charakteristik aufweisen und dementsprechend, je nach Betriebsbedingung, signifikant unterschiedliches Selbstzündungsverhalten zeigen. Mit dem Ziel einer komponentenunabhängigen Kraftstoffbewertung unterstreicht dieses Resultat bereits die Notwendigkeit eines Prüfverfahrens unter thermodynamisch vergleichbaren Randbedingungen zu modernen Motoren.

Abseits des Temperatureinflusses hat ebenfalls das Druckniveau eine maßgebende Auswirkung auf das Zündverhalten. In Abbildung 5-3 sind Zündverzugszeiten aus Messungen mit einem Isooktan-Luftgemisch bei unterschiedlichen Druckbedingungen dargestellt. Infolge der Druckerhöhung kommt es zu einer deutlichen Reduktion der Zündverzugszeit. Diese Tatsache soll in den weiteren Analysen nicht vernachlässigt werden.

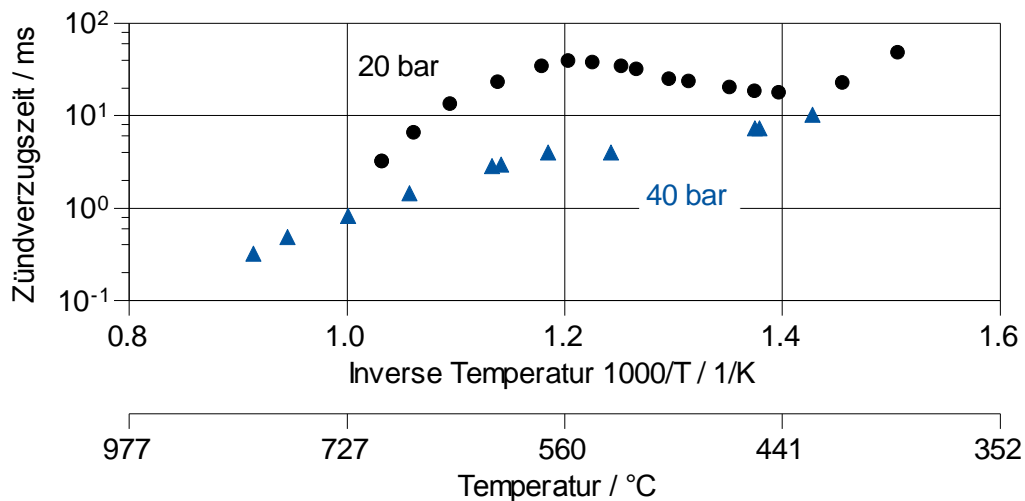


Abbildung 5-3. Einfluss des Drucks auf den chemischen Zündverzug und die NTC-Charakteristik anhand von experimentellen Daten aus [121, 122]. Dargestellt sind Zündverzugszeiten von stöchiometrischem Isooktan-Luftgemisch.

#### Untersuchung des chemischen/physikalischen Zündverzuges im AFIDA

In Abbildung 5-4 ist exemplarisch das Ergebnis einer AFIDA Zündverzugsanalyse des Kraftstoffes KK03 (E5 EN228 Blendstock) dem Resultat der RCM Messung gegenübergestellt. Es ist eine deutlich abweichende Zündverzugszeit beider Messmethoden zu erkennen. Des Weiteren zeigt sich, dass es im Fall des AFIDA bei einem Kammerdruck von 20 bar zu keinem stark ausgeprägten NTC-Verhalten kommt.

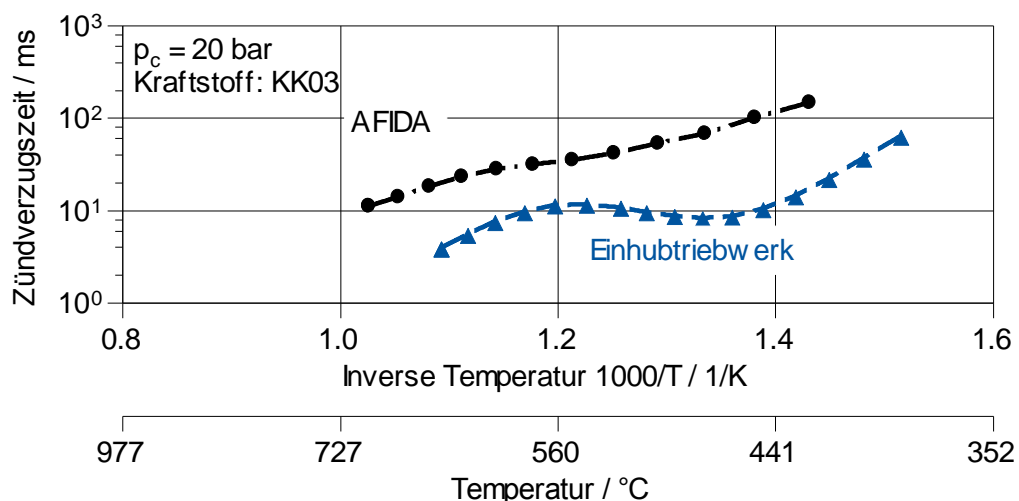


Abbildung 5-4. Exemplarischer Vergleich zwischen Zündverzugszeiten gemessen im Einhubtriebwerk und im AFIDA.

Die Ursache der signifikanten Differenz der Zündverzugszeiten liegt, wie bereits zuvor erwähnt, in der Messmethodik begründet. Da die Bewertung der Zündverzugszeit am AFIDA ab dem Einspritzbeginn stattfindet spielt der Gemischbildungsprozess und somit das Ver-

dampfungsverhalten der Kraftstoffe eine wesentliche Rolle. Um diesen Einflussfaktor besser Quantifizieren zu können wurde eine alternative Auswertemethodik analysiert, welche die Zeitspanne der Verdampfung berücksichtigt und nicht der Zündverzugszeit zurechnet.

In Abbildung 5-5 ist dies mittels eines Druckverlaufes einer AFIDA Messung dargestellt. IDT1 bedeutet in diesem Zusammenhang „ignition delay time 1“ und beschreibt die Zündverzugszeit ab Einspritzbeginn bis Eintreten der Hauptverbrennung, definiert mit einem Druckanstieg von 4 bar. IDT2 definiert den Zeitraum zwischen abgeschlossener Kraftstoffverdampfung und Beginn der Hauptverbrennung.

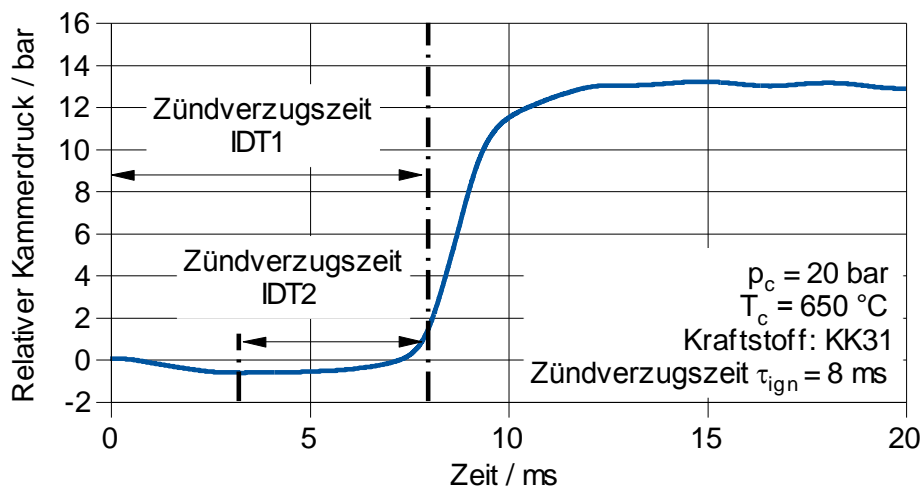


Abbildung 5-5. Exemplarische Darstellung verschiedener Definitionen der AFIDA Zündverzugszeit gemessen im AFIDA.

Vereinfachend wird angenommen, dass die Kraftstoffverdampfung abgeschlossen ist sobald der Kammerdruck sein Minimum erreicht hat. Der daran anschließende Druckanstieg repräsentiert die 1. und 2. Zündstufe der Verbrennung. Abbildung 5-6 zeigt den Einfluss der alternativen Auswertemethodik IDT2 anhand der bereits zuvor gezeigten Abbildung 5-4.

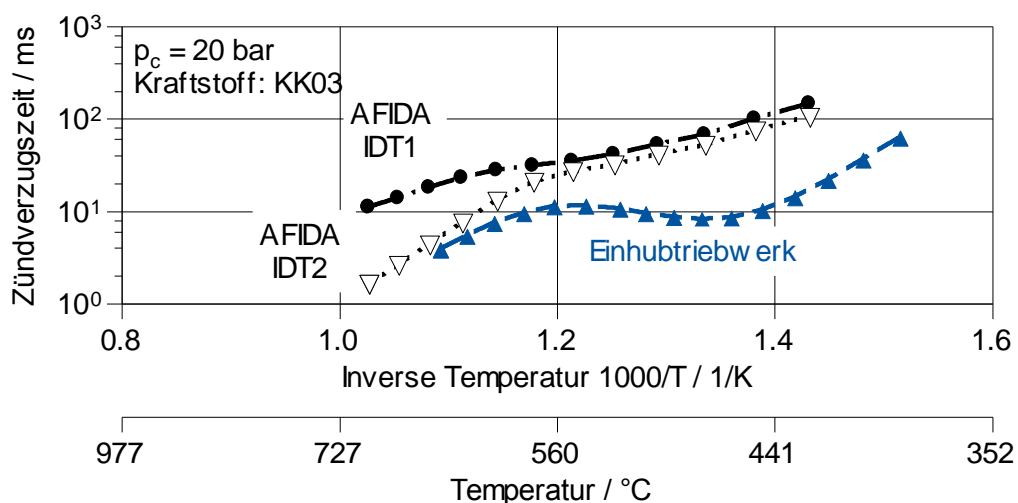


Abbildung 5-6. Einfluss einer alternativen Definition der AFIDA Zündverzugszeit (IDT2). Vergleich mit IDT1 bzw. dem Ergebnis aus dem Einhubtriebwerk.

Zufolge der um die Kraftstoffverdampfung reduzierten AFIDA Zündverzugszeit (IDT2) nähert sich diese im Bereich der Hochtemperaturoxidation den Ergebnissen der RCM Analyse deutlich an. Im reaktionskinetisch komplexeren Bereich der Zwischen- und Niedertemperaturoxidation kommt es zu keiner signifikanten Annäherung der Zündverzugszeiten beider Versuchsträger.

### 5.1.2 Kraftstoffbewertung auf Basis des CFR Prüfmotors

Abseits der Zündverzugsanalysen wurden ebenfalls umfassende Untersuchungen am CFR-Motor durchgeführt um die Kraftstoffe detailliert zu analysieren bzw. zu bewerten. Die Untersuchungen hatten die Bestimmung der normierten Kennzahlen ROZ, MOZ sowie die Ermittlung der neuen Kennzahlen CPI und HSPI beinhaltet.

In Abbildung 5-7 ist der Komponenteneinfluss auf die gemessene ROZ bzw. MOZ dargestellt. Um die Auswirkung des jeweiligen Kohlenwasserstoffes zu verdeutlichen wird auf den Basiskraftstoff KK03 (in rot) referenziert.

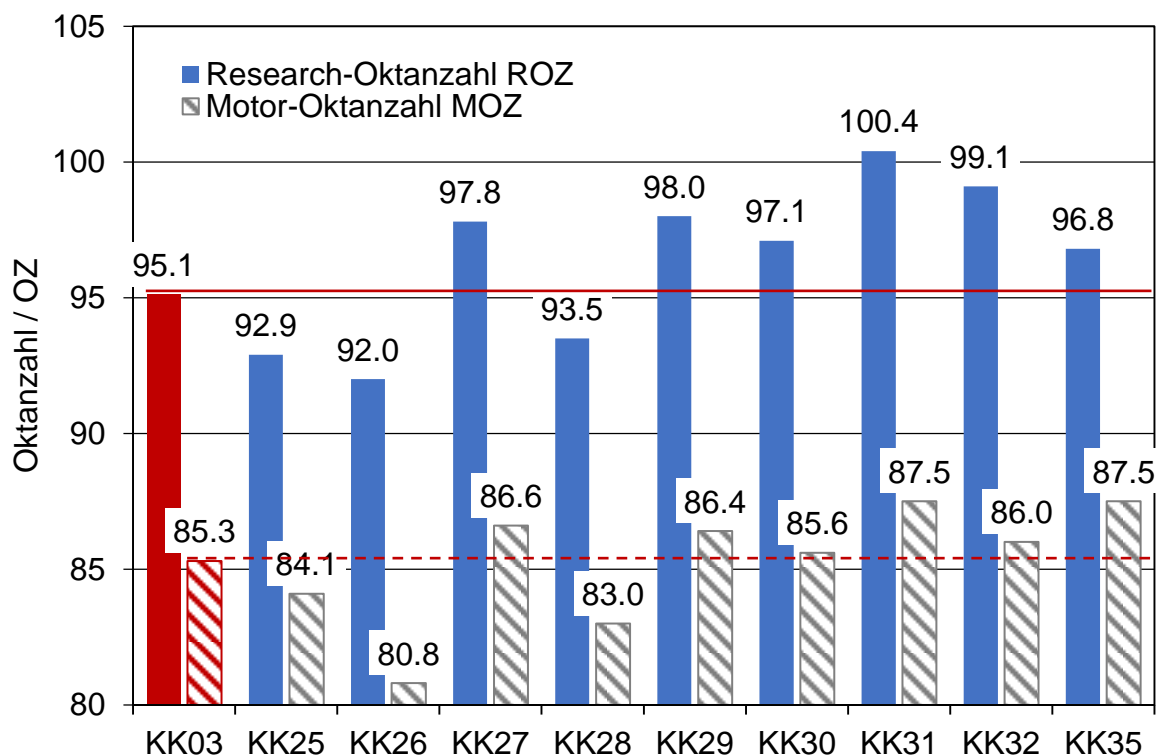


Abbildung 5-7. Ergebnis der ROZ/MOZ Analyse aller Splash Blends und deren Grundkraftstoff KK03 am normierten CFR-Prüfmotor.

Anhand der Splash Blends ist festzustellen, dass durch Zugabe von n-Hexen der Kraftstoff KK26 die geringste Klopfestigkeit aufweist wohingegen die Beimengung von Ethanol (20 % mol. bei KK29 und 40 % mol. bei KK31) zur höchsten ROZ/MOZ führt. Tabelle 1 in Kapitel 3 gibt einen Überblick der Kraftstoffbezeichnungen.

Inwieweit sich die Komponenten auf die potenziellen Vorentflammungskennzahlen CPI und HSPI auswirken ist in Abbildung 5-8 zu sehen.

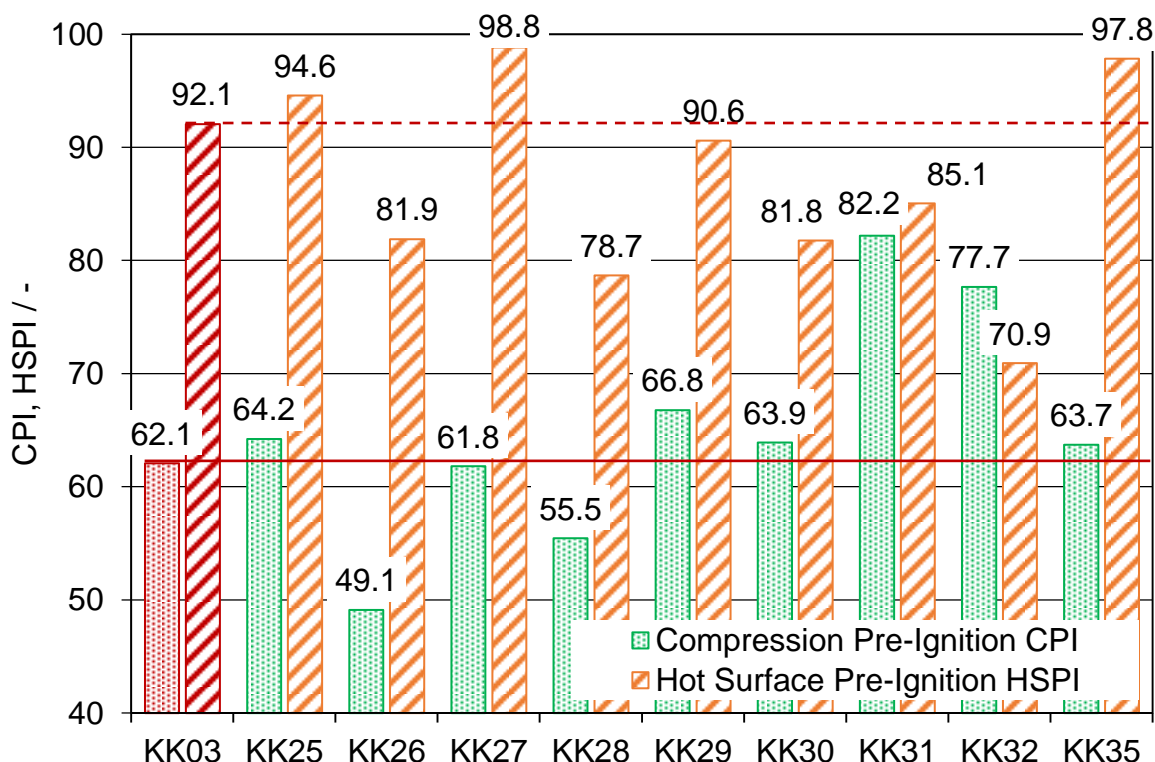


Abbildung 5-8. Ergebnis der CPI/HSPI Analyse aller Splash Blends und deren Grundkraftstoff KK03 am modifizierten CFR-Prüfmotor.

Betrachtet man zunächst die gepunkteten Balken so zeigt sich, dass auch im Fall der Gasphasenzündung (CPI) n-Hexen (KK26) die reaktivste Probe ist. Demgegenüber ist Ethanol (KK29, KK31), analog der Klopfestigkeit, jene Komponente geringster Selbstzündungsneigung infolge einer kritischen Gasphase. Anders stellt es sich bei der Glühzündung (gestreifte Balken) dar. Hierbei zeigen speziell die Oxygenate (KK29-KK32) eine reduzierte Selbstzündungsresistenz. Es ist zu beobachten, dass mit zunehmenden Ethanol- (20 % mol. in KK29, 40 % mol. in KK31) bzw. Methanol-Anteil (20 % mol. in KK30 vs. 40 % mol. in KK32) die Glühzündungsneigung steigt.

Tabelle 8 gibt auf Basis der Splash Blend Resultate eine Übersicht der Komponenteneinflüsse auf das entsprechende Prüfverfahren. Ein (+) beschreibt in diesem Zusammenhang eine positive Auswirkung der Komponente wohingegen ein (-) eine schlechtere Kraftstoffperformance erkennen lässt. Aufgrund eines in der Kraftstoffauswahl nicht berücksichtigten ETBE Splash Blends wird dessen Einfluss mittels der Match Blend Mischung bewertet.



Tabelle 8. Übersicht des Einflusses verschiedener Kraftstoffkomponenten auf die relevanten CFR-Kennzahlen

	Komponente	ROZ	MOZ	CPI	HSPI
Paraffin	Isohexan	--	-	+	+
	Isooktan	+	++	++	+
Naphthen	Cyclohexan	-	--	--	--
Olefin	n-Hexen	--	--	--	--
Aromat	Toluol	++	+	0	++
Oxygenat	Ethanol	++	+	+	-
	Methanol	++	+	+	--
	ETBE	++	+	++	-
Referenz KK03		++/-- $\Delta \geq 2$ OZ +/- $\Delta \geq 0.3$ OZ		++/-- $\Delta \geq 5$ Einheiten +/- $\Delta \geq 1$ Einheit	

Bei den dargestellten Ergebnissen ist zu unterstreichen, dass sich die Komponenteneinflüsse auf das jeweiligen Prüfverfahren und dessen Randbedingungen beziehen und deren Übertragbarkeit auf ein modernes Brennverfahren im Zuge dieser Arbeit nachzuprüfen war. Zu diesem Zweck fand die Validierung der relevanten Kennzahlen an dem Einzylinder- sowie Dreizylinder-Aggregat statt.

## 5.2 Analyse der oberflächeninduzierten Vorentflammung

In diesem Kapitel erfolgt die Ergebnisanalyse der oberflächeninduzierten Vorentflammungsuntersuchung am Einzylinder-Forschungsmotor sowie die Korrelation der Einzylinder-Resultate mit relevanten CFR-Kennzahlen bzw. kraftstoffspezifischen Eigenschaften. Methodisch wird die Analyse und Bewertung der Kraftstoffe unter Zuhilfenahme der chemischen Zündverzugszeiten der Proben vorgenommen. Hohe Hot-spot Temperaturen bis über 1000 K, wie sie bei oberflächeninduzierten Vorentflammungen zu berücksichtigen sind, waren im Rahmen der Messungen am Einhubtriebwerk jedoch außerhalb des sinnvollen Temperaturfensters. Dementsprechend werden für die Diskussion der motorischen Vorentflammungen an einer heißen Oberfläche, simulierte Zündverzugszeiten der Reinstoffe bzw. des PRF95 herangezogen.

### 5.2.1 Bewertung am Einzylinder-Forschungsmotor

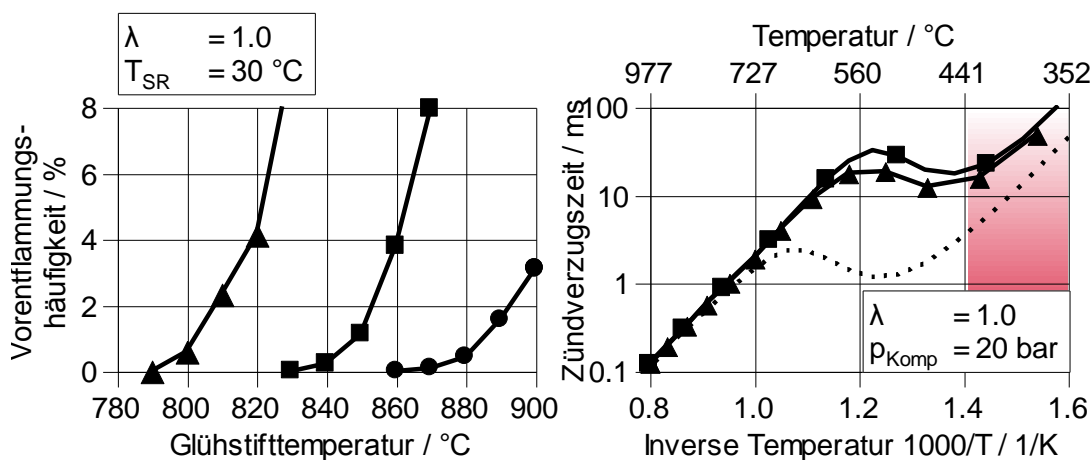
Im Folgenden wird der Einfluss einzelner Kraftstoffkomponenten auf das Glühzündungsverhalten der Mischungen diskutiert.

Da die Kraftstoffe größtenteils Mischungen aus einer ausgewählten Komponente mit dem Grundkraftstoff E0 ROZ95 (KK03) bzw. Isooktan/n-Heptan darstellen, erfolgt zunächst eine Betrachtung der Grundkraftstoffe KK02 (PRF95) und KK03. Als Hilfsmittel zur Beurteilung der mittleren Gastemperaturen im Zylinder wurden Ergebnisse aus eindimensionalen Ladungswechselsimulationen herangezogen. Diese Temperaturen erlaubt zusammen mit den Glühstifttemperaturen eine genauere Eingrenzung der wirksamen reaktionskinetischen Temperaturregime.

**Grundkraftstoffe**

Ein Vergleich der Kraftstoffe KK02 (PRF95) und KK03 (E0 Grundkraftstoff) ist in Abbildung 5-9 zu sehen. Um den Einfluss des in KK02 enthaltenen n-Heptans deutlich zu machen, ist zusätzlich Isooktan dargestellt. Zur Einbeziehung der Reaktionskinetik von Isooktan und n-Heptan sind simulierte Zündverzugszeiten beider Reinstoffe abgebildet.

Der Temperaturbereich der mittleren Gemischtemperatur im Zylinder nahe dem Kompressionsende ist rotfarben unterlegt. Zwischen diesem und dem Temperaturbereich der Glühstifttemperaturen des Einzylinder-Versuches im linken Diagramm (ca. 0.9 – 1.4 inverser Temperatur) ist eine Selbstzündung/Vorentflammung zu erwarten. Zusätzlich ist ebenfalls die ROZ sowie der beigemengte Isooktan- bzw. n-Heptan-Gehalt angeführt.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
■		100 % Isooktan	0	100	100
.....		100 % n-Heptan	100	0	0

Abbildung 5-9. Glühzündungshäufigkeit der Grundkraftstoffe. Die Zündverzugszeiten stammen aus Simulationen mit dem Reaktionsmechanismus nach [123].

Es ist zu erkennen, dass KK03 bei deutlich höheren Glühstifttemperaturen betrieben werden kann, als Isooktan und PRF95. Gerade der Unterschied zwischen PRF95 und reinem Isook-

tan ist in Anbetracht der sehr ähnlichen Stoffzusammensetzung bemerkenswert. Der Zusatz von lediglich 5 % vol. n-Heptan zu Isooktan bewirkt eine Absenkung der Glühstifttemperatur bei 2 % Vorentflammungshäufigkeit ( $T_{2\%VEH}$ ) um ca. 43 °C. Betrachtet man die signifikanten Unterschiede in den Zündverzugszeiten dieser beiden Kraftstoffe im inversen Temperaturbereich zwischen 1.0 und 1.6 lässt sich bereits eine höhere Reaktivität von n-Heptan festhalten. Es ist anzunehmen, dass nicht ausschließlich der Hochtemperaturbereich der Oxidation ausschlaggebend für die Glühzündungsneigung ist sondern der Intermediär- bzw. Nieder-temperaturbereich eine wesentliche Rolle spielt.

### Numerischer Betrachtung der Oberflächzündung

Eine genauere Untersuchung dieses Sachverhaltes lässt sich anhand von numerischen Strömungssimulationen der Zylinderinnenströmung des Einzylinder-Forschungsmotors vornehmen. Dazu wurden Simulationen mit zeitlich und örtlich konstanten Temperaturen auf der Glühstiftoberfläche durchgeführt. Diese Glühstiftoberflächentemperaturen wurden solange variiert, bis in der Simulation eine lokale Zündung des Luft-Kraftstoff-Gemisches in unmittelbarer Umgebung der Glühstiftspitze erfolgte. Dazu ist in Abbildung 5-10 (a) die mittlere Brennraumtemperatur für drei verschiedene Simulationen mit Isooktan aufgeführt.

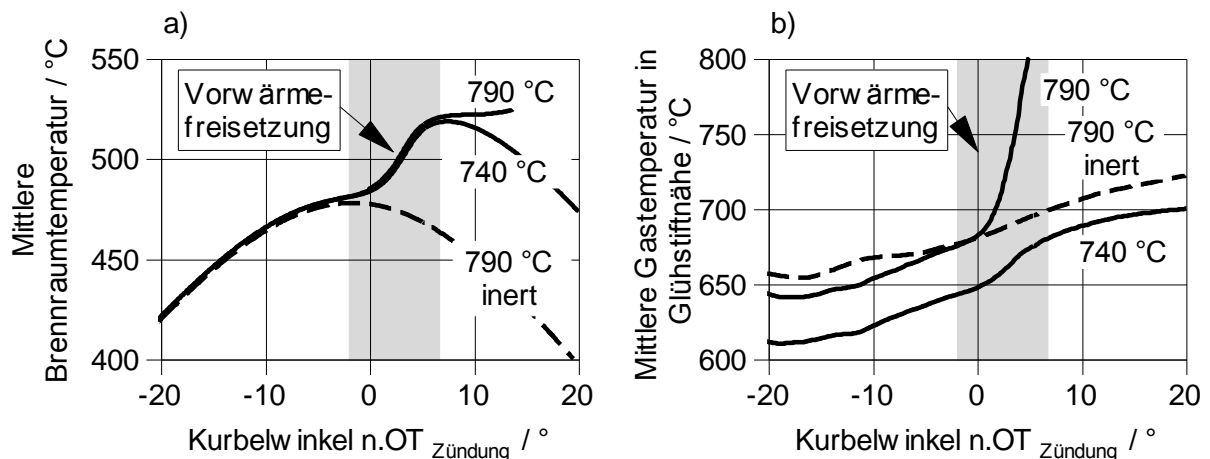


Abbildung 5-10. Mittlere Brennraumtemperatur (a) und Gastemperatur in unmittelbarer Umgebung zum Glühstift (b) aus CFD-Simulationen zur Glühzündung. Simulation mit Isooktan und zwei verschiedenen Glühstiftoberflächentemperaturen (740 °C und 790 °C).

In Abbildung 5-10 sind Ergebnisse folgender drei Simulationen aufgeführt:

- Simulation mit einer niedrigen Glühstifttemperatur (740 °C)
- Simulation mit einer erhöhten Glühstifttemperatur (790 °C)
- Simulation mit einer erhöhten Glühstifttemperatur (790 °C) unter Ausschluss chemischer Reaktionen (inert)

Letztere Simulation enthält zwar durchaus ein stöchiometrisches Luft-Isoktan-Gemisch, allerdings wird die chemische Reaktionsfähigkeit des Gases unterdrückt.

Es ist zunächst zu erkennen, dass die Gastemperatur in Glühstiftnähe wesentlich höher ist, als die Gastemperatur im Zylindermittel, da die heiße Glühstiftoberfläche Wärme an das unmittelbar umgebende Gas überträgt und dieses somit aufheizt. Die Wärme aus dem Glühstift ist nicht die einzige Wärmequelle, welche zu einer Temperaturerhöhung im Gas führt. In Abbildung 5-10 ist zu erkennen, dass unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen eine gewisse Vorwärmefreisetzung im Brennraum zwischen 0 und etwa  $7^\circ$  KW nZOT stattfindet. Der Begriff der Vorwärmefreisetzung wird hier verwendet, da eindeutig exotherme Wärmefreisetzung aus chemischen Reaktionen zu verzeichnen ist, ein vollständiger Umsatz des Luft-Kraftstoff-Gemisches allerdings zunächst ausbleibt. Diese Vorwärmefreisetzung wird sowohl bei einer Glühstiftoberflächentemperatur von  $790^\circ\text{C}$  als auch bei  $740^\circ\text{C}$  berechnet und ist auch in den Experimenten im Einzylinder-Forschungsmotor zu beobachten. An dieser Stelle sei erwähnt, dass die Vorwärmefreisetzung kein Indikator für eine vollständige Selbstzündung des Gasgemisches ist. Dies geht aus der Simulation mit  $740^\circ\text{C}$  Oberflächentemperatur hervor, in welcher eine deutliche Absenkung der mittleren Brennraumtemperatur nach erfolgter Vorwärmefreisetzung deutlich wird.

Anders stellt es sich im Fall einer Oberflächentemperatur von  $790^\circ\text{C}$  dar, wo die Gastemperatur an der Oberfläche des Glühstiftes in Folge einer Selbstzündung unmittelbar nach Zünd-OT rapide ansteigt (Abbildung 5-10 (b)). Aus Abbildung 5-10 (b) geht außerdem hervor, dass die Gastemperatur am Glühstift schneller ansteigt, wenn Vorwärmefreisetzung vorliegt, auch wenn keine Selbstzündung stattfindet (siehe Kurve mit  $740^\circ\text{C}$ ). Dieser Temperaturanstieg rührt aus dem Anstieg der mittleren Brennraumtemperatur und bewirkt eine gesteigerte Reaktivität des Gemisches am Glühstift. Diese Beobachtung unterstreicht, dass die mittlere Brennraumtemperatur durchaus einen Einfluss auf das Niveau der Gastemperatur in der Nähe der Glühstiftoberfläche hat und somit auch die Glühzündungssensitivität eines Kraftstoffes beeinflusst.

In Abbildung 5-11 ist dazu ein Vergleich zwischen Ergebnissen aus numerischen und experimentellen Untersuchungen mit Isoktan und PRF95 zu sehen.

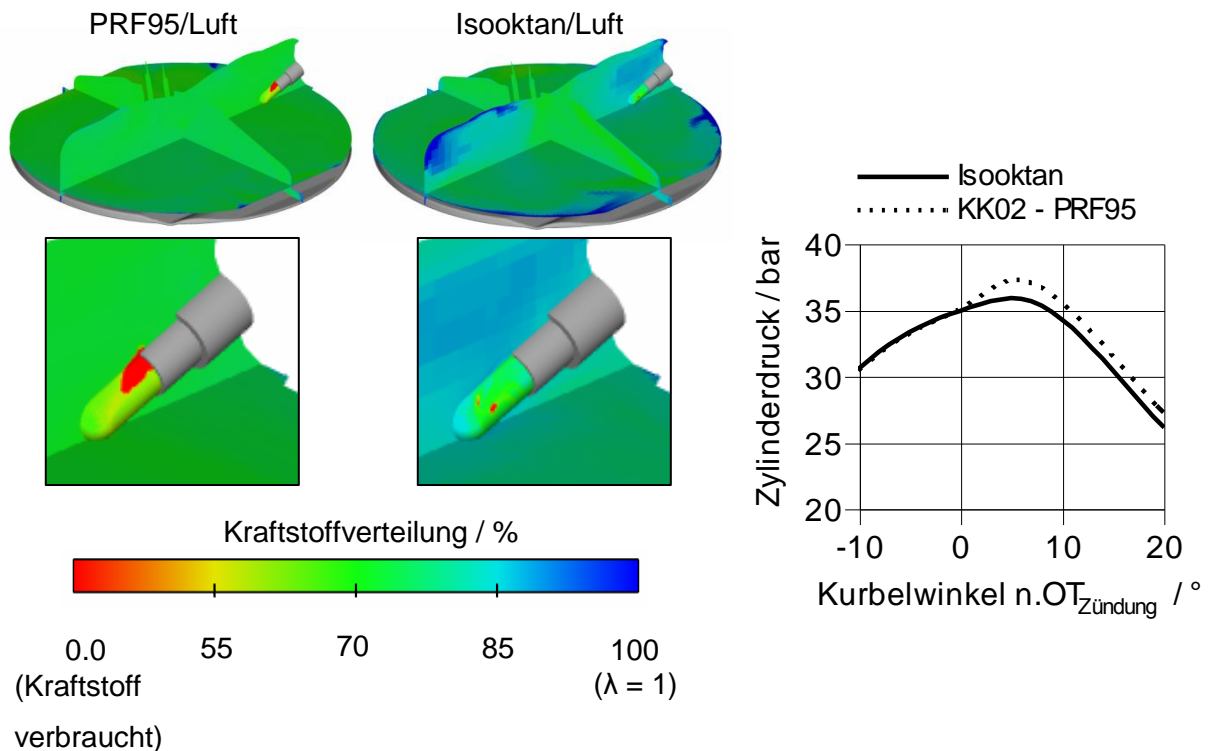


Abbildung 5-11. Vergleich zwischen CFD-Simulation und indizierten Zylinderdruckverläufen für Glühzündungsexperimente mit stöchiometrischen Isooktan- und PRF95-Luft-Gemischen. Kraftstoffverteilung im Brennraum bei  $8^\circ$  KW n.OT<sub>Zündung</sub> (links) und mittlere indizierte Druckverläufe aus experimentellen Untersuchungen am Einzylinder-Forschungsmotor (rechts).

Auf der linken Seite von Abbildung 5-11 ist die Kraftstoffverteilung bei  $8^\circ$  KW n.OT<sub>Zündung</sub> im Zylinder des Einzylinder-Forschungsmotors in verschiedenen Schnitten durch den Brennraum zu sehen. Es ist nur derjenige Kraftstoff dargestellt, welcher unbeteiligt an chemischen Reaktionen ist. Im Fall von PRF95 ist im Vergleich zu Isooktan ein größerer Anteil des Brennraumvolumens von einer Teiloxidation des Kraftstoffes betroffen. Korrespondierend dazu ist auf der rechten Seite von Abbildung 5-11 anhand des mittleren indizierten Druckverlaufes bei PRF95 ein höheres Maß an Wärmefreisetzung im Motor zu verzeichnen. Dieser Effekt führt zu einer höheren chemischen Sensitivität des PRF95-Luft-Gemisches.

Die erhöhte Zündungsneigung geht ebenfalls aus den vergrößerten Darstellungen der Glühstiftoberfläche in Abbildung 5-11 hervor. Die deutliche Rotfärbung der Glühstiftoberfläche zeugt von einem hohen Maß an vollständigem Kraftstoffumsatz, also einem Durchzünden der Gasphase mit PRF95.

Die Vorwärmefreisetzung ist Ausdruck des ausgeprägten NTC-Verhaltens beider Kraftstoffe. Solche Kraftstoffe weisen, wie in Kapitel 2.1 erklärt, bei mittleren Temperaturen in Abhängigkeit des Druckes eine zweistufige Zündung auf.

Die freigesetzte Wärme im Zylindervolumen vor der eigentlichen Glühzündung an der Glühstiftoberfläche ist ein Resultat der ersten Zündstufe.

In Abbildung 5-12 sind Druckverläufe aus Simulationen im Einzylinder-Forschungsmotor und Experimenten im Einhubtriebwerk mit PRF95 dargestellt.

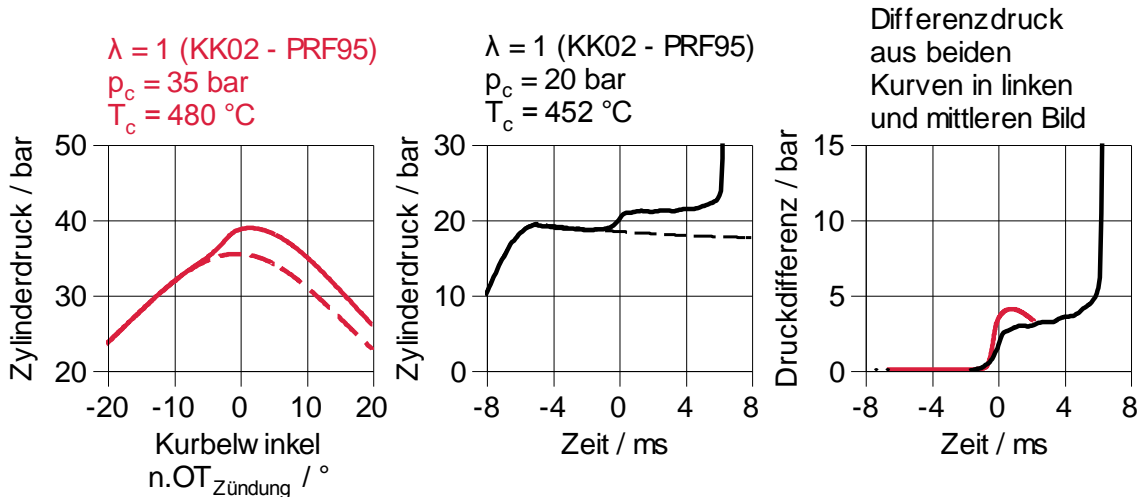


Abbildung 5-12. Zylinderdruck für gefeuerten und geschleppte Simulation im Einzylinder-Forschungsmotor (links), Druckverläufe aus experimentellen Untersuchungen im Einhubtriebwerk mit PRF95-Luft-Gemisch und PRF95-Stickstoff-Gemisch (Mitte) und Differenzdruckverläufe aus linkem und mittlerem Bild (rechts).

Das linke Diagramm beinhaltet den Zylinderdruckverlauf des Einzylinder-Forschungsmotors unter Berücksichtigung chemischer Reaktionen (durchgezogene rote Linie, links) sowie unter Ausschluss chemischer Reaktionen (gestrichelte rote Linie, links). Das Diagramm auf der rechten Seite zeigt den Differenzdruckverlauf beider Zylinderdruckverläufe und gibt dementsprechend nur den aus der Wärmefreisetzung hervorgehenden Druckverlauf an (rote Linie, rechts). Das mittlere Diagramm beinhaltet den Druckverlauf eines Experimentes am Einhubtriebwerk mit einem PRF95-Luft-Gemisch (schwarze, durchgezogene Linie, Mitte) und einem PRF95-Stickstoff-Gemisch (schwarze, gestrichelte Linie, Mitte). Die Differenz dieser beiden Verläufe ist ebenfalls im rechten Diagramm enthalten (schwarze, durchgezogene Linie, rechts). Aus der Summe der Druckverläufe in Abbildung 5-12 rechts ist zu sehen, dass unter vergleichbaren thermodynamischen Randbedingungen, die Wärmefreisetzung der ersten Stufe der Zündung im Einzylinder-Forschungsmotor zu einem ähnlich hohen Druckanstieg führt, wie im Einhubtriebwerk. Damit ist hinreichend genau nachgewiesen, dass die Wärmefreisetzung im motorischen Betrieb tatsächlich auf die erste Stufe der Zündung zurückzuführen ist. Insgesamt hebt diese Analyse der CFD- und Einhubtriebwerk-Untersuchungen die Bedeutung der ersten Zündstufe, oder allgemeiner der Niedertemperaturchemie der Kraftstoffe hervor.

Mit dem Ziel den Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit an der heißen Glühstiftoberfläche genauer zu verstehen wurden weitere Strömungssimulationen vorgenommen. Die folgenden Simulationen basieren, wie in Kapitel 4.3.2 beschrieben, auf einem zweidimensionalen Ansatz und dienen dazu den qualitativen Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit auf die Glühzündungsneigung unterschiedlicher Kraftstoffe aufzuzeigen. Der Ablauf solch einer Zündung ist in Abbildung 5-13 dargestellt.

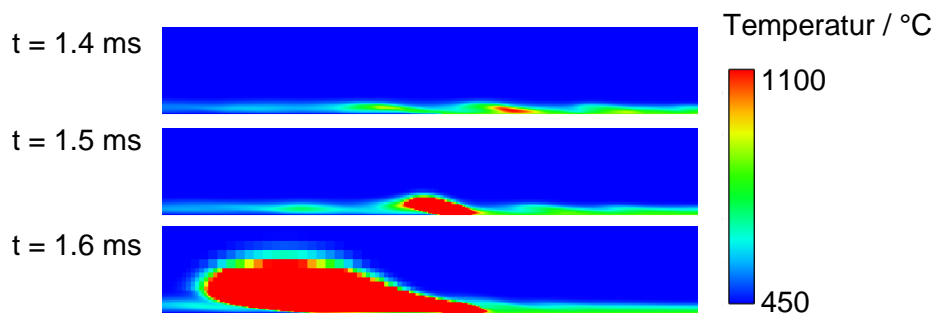


Abbildung 5-13. Ablauf einer Oberflächenzündung in einer 2D-Strömungssimulation. Dargestellt ist die Temperaturverteilung nahe der heißen Wandoberfläche.

Es ist zunächst zu erkennen, dass die Gastemperatur in der Nähe der heißen Wandoberfläche deutlich höher ist, als die Gastemperatur in ausreichend weiter Entfernung von der Wand. Diese Aufheizung führt nach 1.4 ms zu einer lokal starken Wärmefreisetzung infolge chemischer Reaktionen und folglich zu Gastemperaturen oberhalb von 1100 °C. Dieser Hot-spot wird in den darauffolgenden 0.2 ms zwar mit der Strömung abtransportiert, breitet sich allerdings deutlich aus und kennzeichnet bei spätestens 1.6 ms den Beginn einer propagierenden Flamme. Der daraus ermittelte Zündzeitpunkt ist für verschiedene Wandtemperaturen und Strömungsgeschwindigkeiten in Abbildung 5-14 für drei ausgewählte Kraftstoffe dargestellt.

Die Oberflächentemperatur wurde in den einzelnen Simulationen schrittweise herabgesetzt, bis ein Zündzeitpunkt oberhalb von 10 m/s nach Beginn der Simulation eintrat. Die Zeitdauer entspricht bezogen auf die motorischen Glühzündungsexperimente bei 1500 1/min, einem Kurbelwinkelintervall von 90° KW. Diese Dauer ist zum Zwecke der Analyse als Grenzdauer zu betrachten, oberhalb welcher ein Zünden des Luft-Kraftstoff-Gemisches nicht mehr als relevant betrachtet wird.

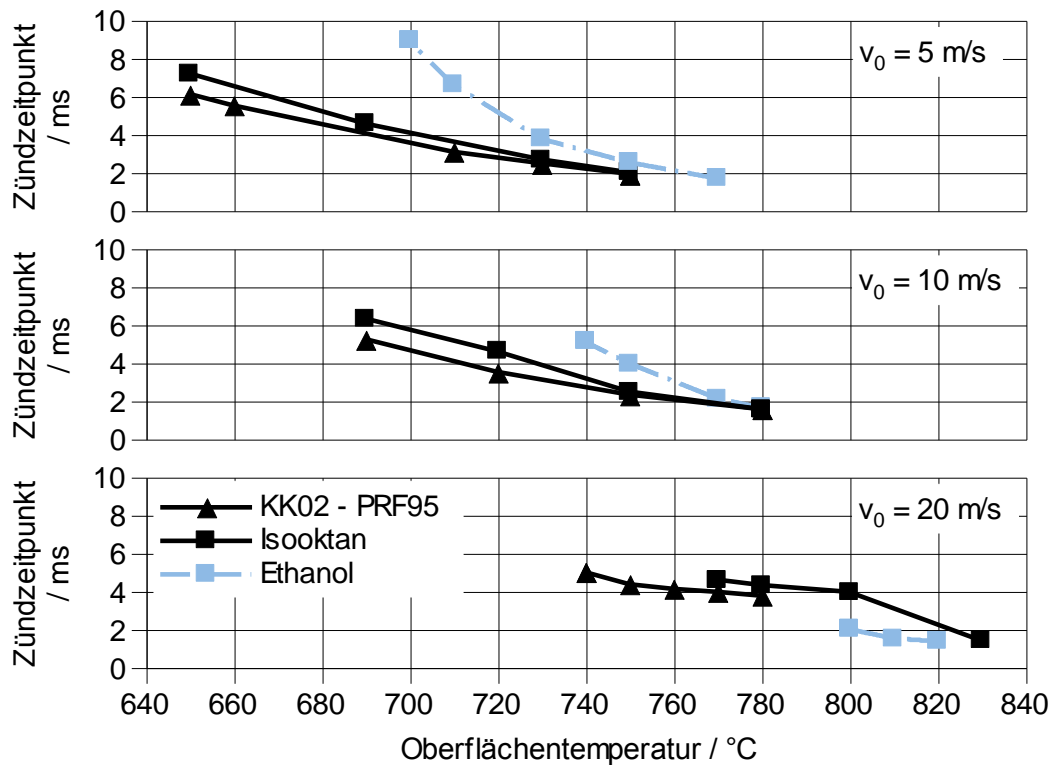


Abbildung 5-14. Numerische Untersuchung zur Variation der Oberflächentemperatur und Strömungsgeschwindigkeit betreffend der Oberflächenzündung an einer zweidimensionalen Strömung über eine heiße Wand.

In Abbildung 5-14 sind auf Basis der Simulation folgende Erkenntnisse abzuleiten:

**Erstens** ist zu erkennen, dass bei 5 und 10 m/s die Kraftstoffe PRF95 und Isooktan die gleiche Oberflächentemperatur besitzen, bei welcher noch eine Zündung innerhalb von 10 ms stattfindet. Bei einer höheren Strömungsgeschwindigkeit von 20 m/s weist PRF95 eine geringere Zündresistenz als Isooktan auf (Kurve in Richtung niedrigerer Temperaturen verschoben). Isooktan zündet erst oberhalb von 770 °C Oberflächentemperatur, wohingegen PRF95 bereits bei einer 30 °C geringeren Temperatur zündet. Die Sensitivität der Oberflächenzündung beider Kraftstoffe hängt demzufolge von der Strömungsgeschwindigkeit oberhalb der heißen Wand ab.

**Zweitens** vollzieht sich die Oberflächenzündung mit zunehmender Strömungsgeschwindigkeit bei höheren Oberflächentemperaturen. Beispielsweise zündet ein stöchiometrisches Ethanol-Luft-Gemisch mit 5 m/s Strömungsgeschwindigkeit und 760 °C Wandtemperatur nach 2 ms, wohingegen eine Oberflächentemperatur von 800 °C notwendig ist, um die gleiche Zeitdauer bei 20 m/s Anströmung zu erzielen.

**Drittens** kehrt sich das Selbstzündungsranking von Ethanol und Isooktan mit zunehmender Strömungsgeschwindigkeit um. Bei einer geringen Anströmung von 5 m/s erweist sich Ethanol als resistenterer Kraftstoff gegenüber der Oberflächenzündung. Bei 20 m/s erreicht man



jedoch für Isooktan in diesem simplifizierten Fall höhere Oberflächentemperaturen für Zündungen unterhalb von 2 m/s.

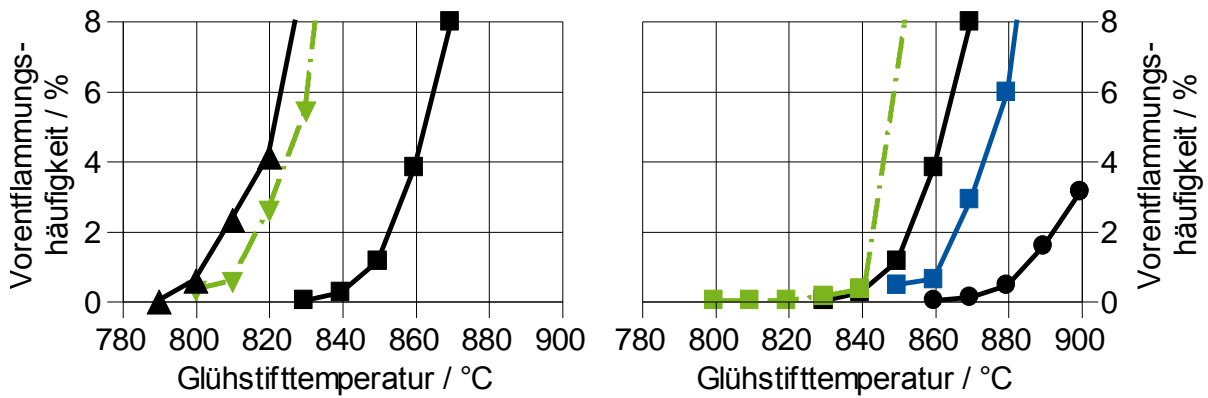
Diese Beobachtungen zeigen, dass im Zusammenhang mit der Oberflächenzündung neben der Niedertemperaturkinetik der Kraftstoffe auch dem Strömungsfeld in der Nähe des Glühstiftes eine beachtliche Rolle zugesprochen werden kann. Insgesamt liefern die 3D und 2D-Simulationen auch wertvolle Erklärungsansätze für die Unterschiede zwischen PRF95 und Isooktan in den Ergebnissen der motorischen Glühzündungsexperimente in Abbildung 5-9.

Des Weiteren ist festzuhalten, dass es sich bei dem Grundkraftstoff KK03 um einen im Vergleich zu PRF95 äußerst Glühzündungsresistenten Kraftstoff handelt. Eine detailliertere Betrachtung der Vorentflammungscharakteristik von KK03 gegenüber anderen EN228 konformen Benzinen wird am Ende dieses Kapitels vorgenommen. Im Folgenden wird zunächst auf Basis der Mischkraftstoffe der Einfluss der einzelnen Kraftstoffkomponenten detailliert analysiert.

### **Experimentelle Untersuchung am Einzylinder-Forschungsmotor**

#### **Isohexan**

In Abbildung 5-15 ist das Ergebnis der Glühzündungsuntersuchung der Isohexan-Kraftstoffe zu sehen. Wie bereits in Kapitel 3 erläutert wurde dem Match Blend zur Darstellung einer definierten ROZ95 Isooktan bzw. n-Heptan beigemischt, wodurch dieser einen hohen Paraffin-Anteil beinhaltet. Zusätzlich wurden der Kraftstoffauswahl 3-Komponenten Kraftstoffe (CFD Surrogate) hinzugefügt, welche der simulativen Betrachtung der äquivalenten Realkraftstoffmischung dienen sollten. Die folgenden Analysen untersuchen unter anderem die Gültigkeit dieser Annahme.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
—▲—	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
—●—	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
—■—		100 % Isooktan	0	100	100
—▼—	04	20 % Isohexan CFD	1.4 (1.3)	78.7 (82.1)	94.9
—■—	08	20 % Isohexan MB	1.0 (1.0)	60.4 (65.9)	95.1
—■—	25	20 % Isohexan SB	-	-	92.9

Abbildung 5-15. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Isohexan.

Das Resultat der Analyse zeigt, dass die Zugabe von Isohexan (KK25) die Glühzündungsneigung gegenüber dem Grundkraftstoff KK03 deutlich erhöht (Diagramm rechts). So weist der Isohexan Splash Blend eine 2% Vorentflammungshäufigkeit bei etwa 865 °C Glühstifttemperatur auf wohingegen beim Grundkraftstoff dies erst bei etwa 895 °C der Fall ist. Interessant ist in diesem Zusammenhang, dass bei dem Match Blend KK08 trotz einer signifikant höheren ROZ als beim Splash Blend (95.1 gegenüber 92.9) eine geringere Glühstifttemperatur ausreichend ist um dieselbe Vorentflammungshäufigkeit hervorzurufen. Darüber hinaus zeigt der Match Blend ebenfalls ein äußerst markantes Selbstzündungsverhalten. Hat es zu Beginn den Anschein eines moderaten Anstieges der kritischen Glühzündungstemperatur, ähnlich jenem von reinem Isooktan bei 840 °C, so kommt es nach überschreiten dieser Temperaturgrenze zu einer hohen Anzahl an Vorentflammungen und davon ausgehenden Klopfamplituden. Das Ausmaß dieses plötzlichen Anstieges führte dazu, dass die Messung aufgrund des hohen Schadenspotenzials nicht mit höheren Glühstifttemperaturen fortgeführt werden konnte. Die gestrichelte Linie in Abbildung 5-15 rechts soll dies andeuten.

Insgesamt verschlechtern beide realen Mischungsvarianten die Glühzündungsresistenz des Grundkraftstoffes am Einzylinder-Forschungsmotor.

Betrachtet man das CFD Surrogat KK04 gegenüber dessen Grundkraftstoff KK02 (PRF95) im Diagramm links, so führt die Zugabe von 20 % mol. Isohexan unter Beibehaltung einer ROZ95 zu einer um 5 – 10 °C erhöhten kritischen Glühstifttemperatur. Dies ist auf das reduzierte Isooktan/n-Heptan-Verhältnis von KK04 zurückzuführen. Somit lässt sich ein um etwa

15 % mol. geringerer Isooktan-Anteil durch die Reduktion von 4 % mol. n-Heptan zugunsten einer höheren Glühzündungsresistenz überkompensieren.

Ein weiterer wesentlicher Punkt in diesem Zusammenhang ist die Übertragbarkeit der Zündungscharakteristik des 3-Komponenten-Kraftstoffes auf dessen äquivalente reale Kraftstoffmischung. Vergleicht man in Abbildung 5-15 KK04 und KK08 ist mit einer Differenz von über 20 °C eine signifikante Abweichung der kritischen Glühstifttemperaturen zu beobachten. Der ROZ95 CFD Kraftstoff ist hierbei deutlich glühzündungsfreudiger als die reale ROZ95 Kraftstoffmischung.

### n-Hexen

In Abbildung 5-16 wird, analog der Abbildung zuvor, der Einfluss der Kohlenwasserstoffkomponente n-Hexen analysiert. Hierzu sind erneut die Grundkraftstoffe KK02 sowie KK03 als auch die Mischkraftstoffe KK09 und KK26 abgebildet.

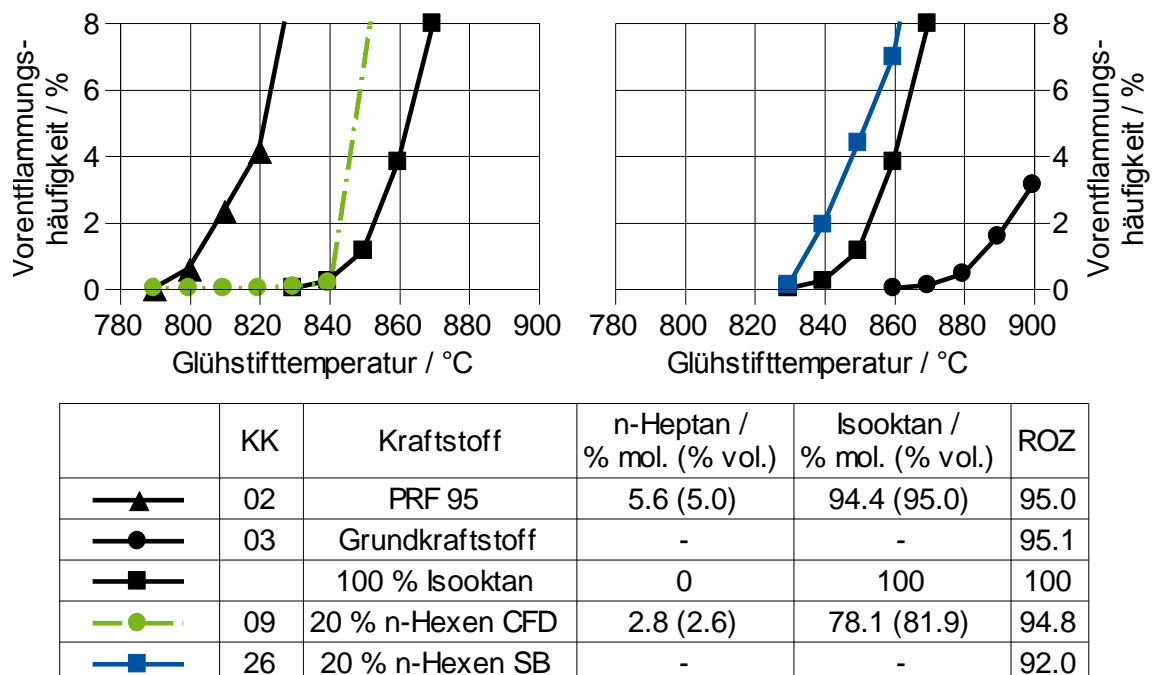


Abbildung 5-16. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit n-Hexen.

Das Glühzündungsexperiment zeigt durch Zugabe von 20 mol. % n-Hexen eine signifikant gesteigerte Glühzündungsneigung des Splash Blends gegenüber dem Grundkraftstoff KK03. Die ROZ wird ebenfalls infolge der hohen Reaktivität des n-Hexen deutlich reduziert. Dies führt dazu, dass zur Einhaltung einer ROZ95 der vollständige Grundkraftstoffanteil durch Isooktan ersetzt werden musste und dementsprechend lediglich ein ROZ95 CFD Kraftstoff (KK09) darstellbar war. Dieses zeigt eine ähnliche Glühzündungscharakteristik wie der Isohexan Match Blend KK08 zuvor. n-Hexen scheint bei niedrigeren Glühstifttemperaturen zunächst die Vorentflammungsneigung gegenüber KK02 zu senken, steigt jedoch nach

Überschreiten von 840 °C erheblich an. Die Annahme, dass dies am reaktionsfreudigen n-Hexen liegt wird dadurch entkräftet, dass der Splash Blend dieses Verhalten nicht aufweist. Der naheliegende Umkehrschluss, dass die Ursache dessen im Isooktan/n-Heptan-Anteil begründet liegt kann ebenfalls nicht gezogen werden, da das Isohexan CFD Surrogat diese Charakteristik nicht aufweist sondern lediglich der reale Match Blend KK08. Dementsprechend ist von einer signifikanten Wechselwirkung der Kraftstoffkomponenten auszugehen und die Kraftstoffeigenschaften von Gemischen ist nicht simpel von den komponentenspezifischen Reinstoffverhalten abzuleiten.

Die markante Glühzündungscharakteristik von KK09 konnte ebenfalls simulativ beobachtet werden. In Abbildung 5-17 sind simulierte Zeitpunkte der Glühzündung im Einzylinder-Forschungsmotor für vier verschiedene Kraftstoffe aufgeführt.

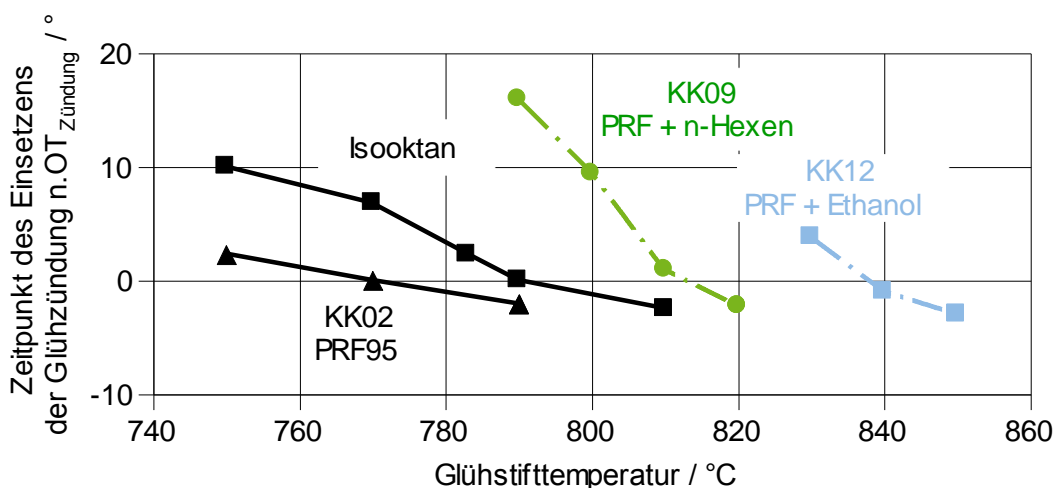
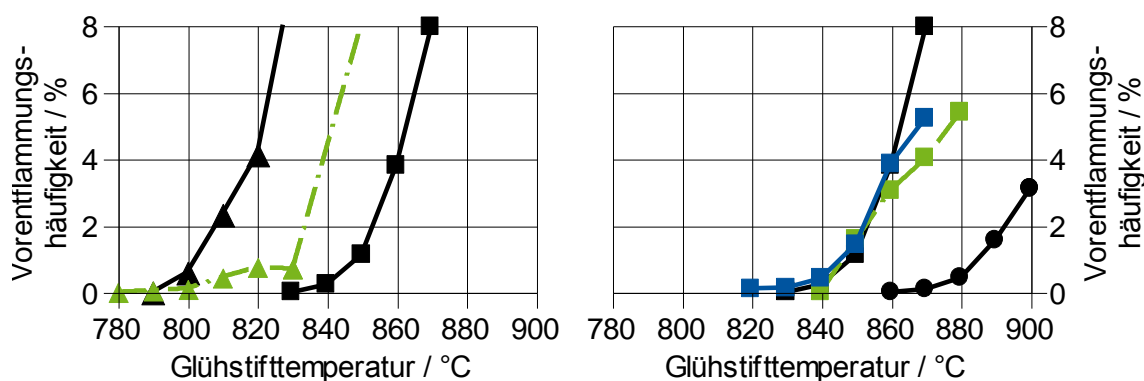


Abbildung 5-17. Zündzeitpunkte simulierter Glühzündungen mit den vier CFD-Surrogate Isooktan, KK02, KK09 und KK12.

Grundsätzlich ist das Ranking der Kraftstoffe qualitativ gleich dem Ranking aus den experimentellen Untersuchungen. Es ist zu erkennen, dass KK09 eine vergleichsweise hohe Sensitivität gegenüber der Glühstifttemperatur aufweist. Eine geringfügige Anhebung der Glühstifttemperatur von 800 °C auf 810 °C führt bei KK09 zu einer um 9.5° früheren Glühzündung.

## Cyclohexan

In Abbildung 5-18 sind die Vorentflammungshäufigkeiten für die Cyclohexan-Kraftstoffe zu sehen.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
■		100 % Isooktan	0	100	100
▲	07	20 % Cyclohexan CFD	3.7 ( 3.6)	76.6 (82.7)	95.3
■	11	20 % Cyclohexan MB	2.2 ( 2.2)	55.4 (63.1)	95.2
■	28	20 % Cyclohexan SB	-	-	93.5

Abbildung 5-18. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Cyclohexan.

Anhand des Splash Blends KK28 ist eine gesteigerte Selbstzündungsneigung gegenüber dem Grundkraftstoff KK03 zu beobachten.

Infolge der reduzierten Klopfestigkeit von KK28 war die Zugabe von Isooktan zur Mischung des Match Blends KK11 notwendig. In diesem Zusammenhang zeigt der Match Blend dieselbe kritische Glühstifttemperatur wie der Splash Blend. Offensichtlich hat das vorliegende n-Heptan/Isooktan-Verhältnis eine ähnliche Glühzündungsempfindlichkeit wie jener Grundkraftstoffanteil welcher durch dieses Gemisch ersetzt wurde. Dies zeigt erneut, dass die ROZ in keinem Verhältnis zur Glühzündungsneigung steht, da die Kraftstoffe eine deutliche unterschiedliche Klopfestigkeit besitzen.

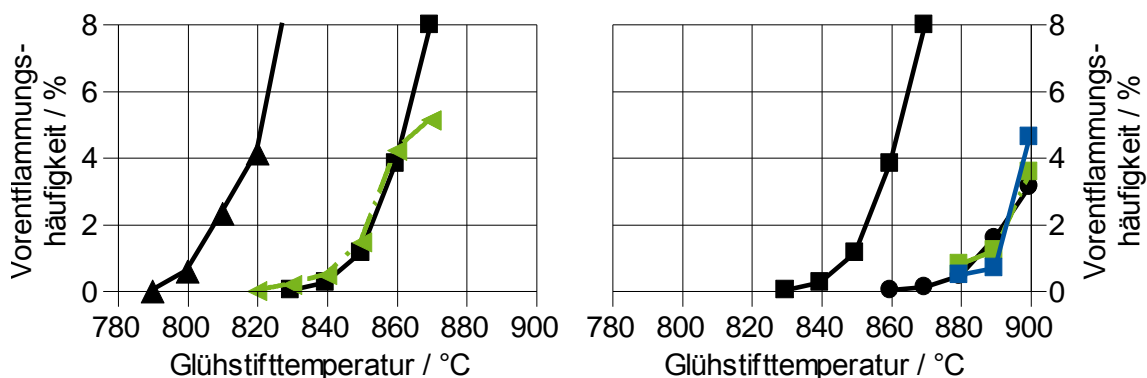
Betreffend das CFD Surrogat KK07 war zur Mischung einer ROZ95 gegenüber der PRF95 Basis keine Änderung des n-Heptan/Isooktan-Verhältnisses notwendig. Nach Zugabe der Cyclohexan-Komponente war dementsprechend keine Anpassung der ROZ durchzuführen. Im Unterschied zur ROZ zeigt sich der CFD Kraftstoff jedoch Glühzündungsresistenter als die PRF95 Basis.

Insgesamt ist Cyclohexan bei den realen Kraftstoffmischungen ein glühzündungsfreudigeres Verhalten als dem Grundkraftstoff KK03 zuzurechnen. Im Fall des CFD Surrogates ist gegenüber dem realen ROZ95 Cyclohexan-Kraftstoffes ein nochmals reaktiveres Verhalten festzustellen. Erneut unterstreicht dies, dass weder die Klopfestigkeit ein Indiz für die

Selbstzündungsneigung infolge einer heißen Oberfläche ist noch, dass CFD Kraftstoffe das reale Kraftstoffverhalten widerspiegeln.

**Toluol**

Infolge der geringeren Reaktivität von Toluol ist bei Zugabe des Aromaten in Abbildung 5-19 eine gesteigerte ROZ des Splash Blends KK27 gegenüber der Basis KK03 zu beobachten. Hinsichtlich der Glühzündungsresistenz ist im Diagramm rechts jedoch keine Änderung festzustellen. Die Unterschiede bewegen sich in der Messtoleranz der Methodik.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
■		100 % Isooktan	0	100	100
◀	06	20 % Toluol CFD	8.4 (8.1)	71.6 (77.9)	95.1
■	10	20 % Toluol MB	4.2 (5.0)	-	95.3
■	27	20 % Toluol SB	-	-	97.8

Abbildung 5-19. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Toluol.

Zur Einhaltung einer ROZ95 musste dem Match Blend KK10 ein geringer Anteil n-Heptan hinzugefügt werden. Durch das reaktive n-Heptan waren bereits 5.0 vol. % ausreichend um die definierte Klopfestigkeit von KK10 einzustellen.

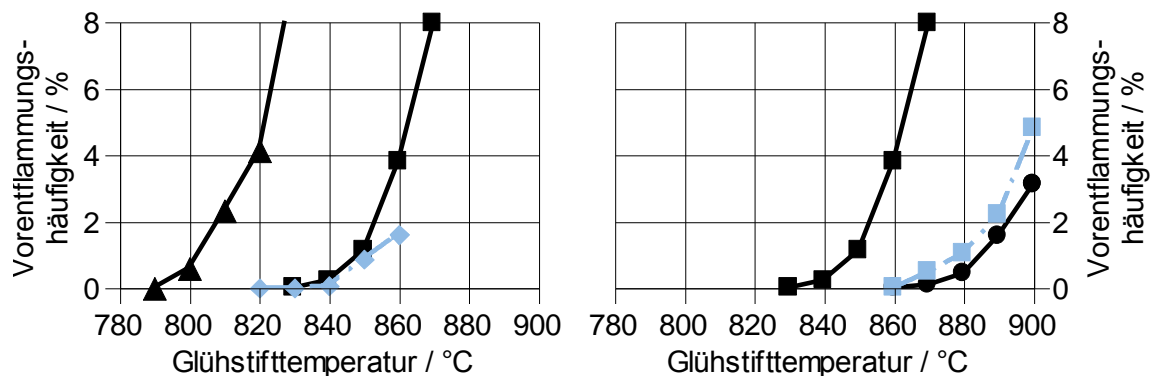
Überraschend ist in diesem Zusammenhang, dass die kritische Glühstifttemperatur des Kraftstoffes KK10 trotz n-Heptan-Anteil dasselbe Niveau erreicht, wie der Splash Blends KK27 bzw. der Basiskraftstoff KK03.

Im Fall des CFD Surrogates ist eine deutlich gesteigerte Glühzündungsresistenz zu beobachten. Trotz des wesentlich höheren n-Heptan-Anteils und des somit ungünstigeren n-Heptan/Isooktan-Verhältnisses führt die Zugabe von 20 % mol. Toluol zu einer signifikant höheren Glühzündungsresistenz, gleich jener von Isooktan. Dementsprechend ist anzunehmen, dass der Reinstoff Toluol eine höhere Glühzündungsresistenz aufweist als Isooktan. Bezüglich der Übertragbarkeit des Kraftstoffverhaltens des CFD Surrogates auf eine reale

Mischung ist erneut eine deutlich abweichende Vorentflammsneigung der Proben zu sehen.

### ETBE (Ethyl-tert-butylether)

In der folgenden Abbildung 5-20 werden die Analysen des ETBE Match Blends KK17 sowie des ETBE CFD Surrogates KK14 betrachtet. Die Kraftstoffauswahl nach Kapitel 3 sah keinen ETBE Splash Blend vor.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
—▲—	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
—●—	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
—■—		100 % Isooktan	0	100	100
—◆—	14	20 % ETBE CFD	12.4 (11.5)	68.4 (71.6)	95.5
—■—	17	20 % ETBE MB	7.1 (7.9)	-	95.4

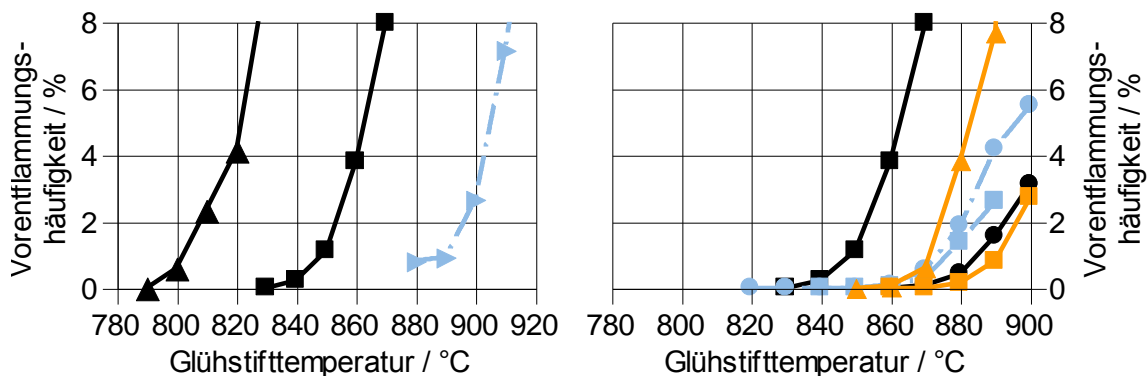
Abbildung 5-20. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit ETBE.

Aufgrund der vergleichsweise hohen Klopfestigkeit des ETBE war die Beimischung von etwa 7 % mol. zum Grundkraftstoff KK03 notwendig um den Match Blend KK17 an eine ROZ95 anzupassen. Diese Maßnahme führt zu einer geringfügigen Steigerung der Glühzündungsreaktivität.

Im Vergleich dazu zeigt der CFD Kraftstoff durch die Zugabe von 20 % mol. ETBE eine deutlich gesteigerte Glühzündungscharakteristik gegenüber KK02 (PRF95). Offensichtlich überkompensiert ETBE den höheren n-Heptan-Anteil (>12 % mol.). Ein äquivalentes Verhalten zur Realkraftstoffmischung ist jedoch ebenfalls nicht festzustellen. Mit einer um etwa 30 °C geringeren kritischen Glühstifttemperatur ist der 3-Komponenten-Kraftstoff wesentlich kritischer.

**Methanol**

Der Kraftstoff Methanol wurde sowohl als Match Blend als auch Splash Blend in jeweils zwei verschiedenen Mischungsvarianten (20 % mol. und 40 % mol.) untersucht. Darüber hinaus wurde ebenfalls ein 20 % mol. CFD Surrogat analysiert. Dieses beinhaltet aufgrund der Entmischungsfahr als 4. Komponente 20 % mol. ETBE. Die verschiedenen Gemische und deren Zündcharakteristik im Einzylinder-Forschungsmotor sind in Abbildung 5-21 dargestellt.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
■		100 % Isooktan	0	100	100
↔	13	20 % Methanol + 20 % ETBE CFD	14.7 (16.2)	46.5 (57.7)	95.3
■	16	20 % Methanol MB	2.6 (3.4)	-	95.3
●	19	40 % Methanol MB	5.6 (8.7)	-	94.9
■	30	20 % Methanol SB	-	-	97.1
▲	32	40 % Methanol SB	-	-	99.1

Abbildung 5-21. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Methanol.

Gemäß den Resultaten der Realmischungen in Abbildung 5-21 zeigt Methanol eine tendenziell höhere Glühzündungsneigung. So ist bei erhöhter Rate (KK32) eine um über 20 °C geringere Glühstifttemperatur ausreichend um die Probe zur Selbstzündung zu bringen. Überraschend ist in diesem Zusammenhang, dass im Fall des Match Blends KK16 bzw. KK19 durch den zusätzlichen n-Heptan-Anteil kein kritischeres Verhalten zu erkennen ist. Dies wurde ebenfalls bei Toluol in Abbildung 5-19 beobachtet.

Das CFD Surrogat KK13 zeigt einen signifikanten Anstieg der Glühzündungsresistenz. Dies ist vornehmlich der hohen Verdampfungsenthalpie der Oxygenate geschuldet (insgesamt 40 % mol. Anteil). Interessant ist hierbei, dass es beim CFD Kraftstoff infolge der hohen Verdampfungsenthalpie zu einer gesteigerten Resistenz kommt, wohingegen beim Realkraftstoff KK03, trotz hoher Verdampfungsenthalpie des Methanols, eine Reduktion zu verzeichnen ist.

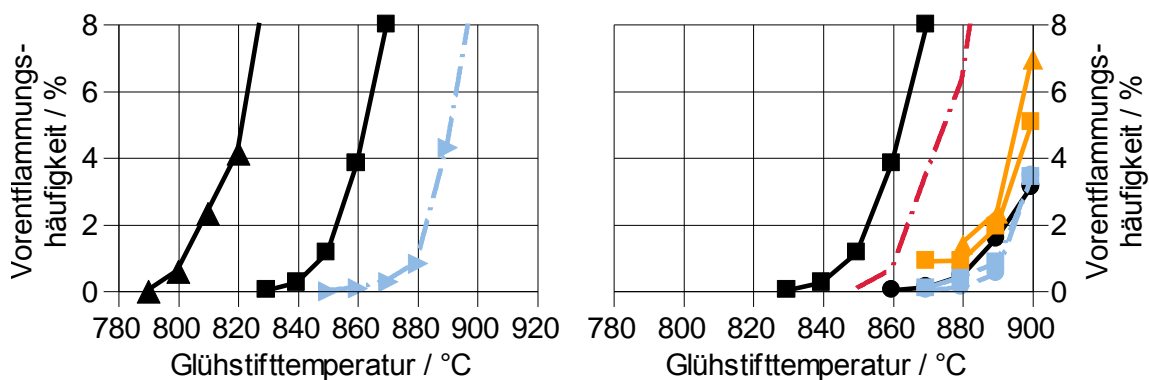


Dieses Ergebnis zeigt das Kraftstoffkomponenten in Abhängigkeit der restlichen in Mischung befindlichen Komponenten zu einer unterschiedlichen Charakteristik führen können.

### Ethanol

Zuletzt wird in Abbildung 5-22 noch auf den Einfluss des Ethanols eingegangen. Analog der Mischungen bei Methanol wurden auch bei Ethanol 20 % mol. sowie 40 % mol. den Match bzw. Splash Blends beigemischt. Hinsichtlich des CFD Kraftstoffes war es nicht notwendig eine 4.

Komponente hinzuzufügen wodurch dieser gemäß der ursprünglichen Definition aus lediglich 3 Komponenten besteht (Ethanol, Isooktan, n-Heptan). Zusätzlich ist in Abbildung 5-22 das Resultat von reinem Ethanol zu sehen.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
—▲—	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
—●—	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
—■—		100 % Isooktan	0	100	100
—▲—	12	20 % Ethanol CFD	9	71	95.6
—■—	15	20 % Ethanol MB	3.4 (4.4)	-	95.2
—●—	18	40 % Ethanol MB	7.3 (10.5)	-	95.6
—■—	29	20 % Ethanol SB	-	-	98.0
—▲—	31	40 % Ethanol SB	-	-	100.4
— · —		100 % Ethanol	-	-	106

Abbildung 5-22. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Ethanol.

Die hohe Klopfestigkeit des Ethanols macht es notwendig, dass den Match Blends n-Heptan zugemischt werden musste um eine definierte ROZ einzustellen. Ethanol zeigt anhand der Splash Blends jedoch eine tendenziell reduzierende Wirkung auf die Glühzündungsresistenz. Dies wird bestätigt wenn man das Resultat von reinem Ethanol betrachtet. Es ist erneut festzustellen, dass die ROZ nicht zwangsläufig die gleiche Tendenz zeigt wie die Selbstzündungsneigung infolge einer heißen Oberfläche.

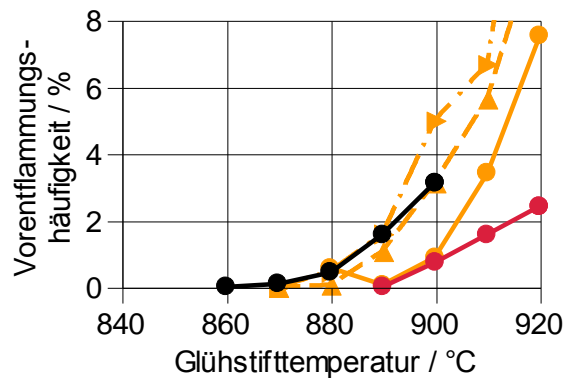
Betreffend den CFD Kraftstoff KK12 führt Ethanol dazu, dass die kritische Glühstifttemperatur signifikant höher liegt als jene der Basis KK02. Im Vergleich zum realen 20 % mol. Match Blend hat dieser jedoch ein deutlich kritischeres Glühzündungsverhalten. Dies ist nicht zuletzt dem höheren n-Heptan-Anteil von etwa 10 % mol. geschuldet. Auch in diesem Fall ist die Vergleichbarkeit des CFD Kraftstoffes und des Realkraftstoffes somit nicht gegeben.

### **EN228 Marktkraftstoffe**

Abseits der Match bzw. Splash Blends wurden ebenfalls fünf EN228 Marktkraftstoffe auf deren Glühzündungsneigung untersucht. Nach Abbildung 5-23 handelt es sich bei dem E5 Kraftstoff KK01 um den Kraftstoff geringster Reaktivität. Dies spiegelt sich ebenfalls in dessen ROZ wider. Erneut ist jedoch die Klopfestigkeit kein hinreichendes Indiz für die Glühzündungsneigung des Kraftstoffes, da KK22 trotz annähernd gleicher ROZ ein reaktiveres Verhalten aufweist. Bei Analyse der Stoffgruppenanteile lässt sich ein geringfügiger Unterschied bei den Naphthenen bzw. den Olefinen feststellen.

Somit würde sich in einer ersten Analyse ein maßgebender Einfluss des Olefin- bzw. Naphthen-Anteils auf die Glühzündungsneigung des Kraftstoffes ableiten lassen. Die Pauschalierung, dass diese Stoffgruppen immer einen positiven bzw. negativen Einfluss auf die Vorentflammung haben ist jedoch nicht möglich, wenn man den Vergleich zwischen KK03 und KK21 anstellt. In diesem Fall ist wie zuvor sowohl im Olefin- als auch im Naphthen-Gehalt eine Differenz zu erkennen. Zusätzlich weist KK21 gegenüber KK03 einen deutlich reduzierten Aromaten-Anteil auf, was tendenziell ein selbstzündungskritischeres Verhalten erwarten lassen würde. Man könnte annehmen, dass KK21, trotz geringfügig höherem Oxygenaten-Anteil ein deutlich reaktiveres Verhalten zeigt als KK03. Dies war jedoch nicht zu beobachten. Demnach ist davon auszugehen, dass weitere Kraftstoffanteile die Glühzündungsneigung signifikant beeinflussen.

Eine detaillierte Betrachtung der Stoffzusammensetzung auf Basis einer gaschromatografischen Analyse und der Ansatz einer Berechnungsmethode zur Vorentflammungsbewertung werden in Kapitel 5.4 diskutiert.



	KK	Kraftstoff	Paraffin / % vol.	Naphthen / % vol.	Aromat / % vol.	Olefin / % vol.	Oxygenat / % vol.	ROZ
—●—	01	E5	44.8	5.7	33.9	6.4	9.2	97.3
—●—	03	E0	52.8	6.0	31.0	6.4	3.9	95.1
—▲—	20	E5	41.6	5.2	35.1	9.2	8.9	95.4
—▲—	21	E5	50.1	3.9	20.7	17.6	7.6	95.3
—●—	22	E10	45.5	3.7	34.0	7.6	9.3	97.0

Abbildung 5-23. Glühzündungshäufigkeiten der EN228 Marktkraftstoffe.

### Zusammenfassung zur oberflächeninduzierten Vorentflammung

Die detaillierte Diskussion der Einflüsse verschiedener Kohlenwasserstoffe und Mischungen auf die Glühzündungsneigung lässt sich wie folgt anhand einiger wesentlicher Beobachtungen zusammenfassen:

- Der Kraftstoff höchster Glühzündungsresistenz ist KK01 mit einem volumetrischen Ethanolanteil von 5 %.
- Eine Erhöhung des Alkoholanteils führt zu keiner Verbesserung bzw. sogar zu einer Verminderung der Glühzündungsresistenz.
- Der empfindlichste Kraftstoff ist KK02 mit 95 % mol. Isooktan und 5 % mol. n-Heptan (PRF95).
- Isooktan ist deutlich resistenter als KK02 → hoher n-Heptan Einfluss bei geringer Zumischung.
- KK20 und KK21 zeigen nur geringe Unterschiede auf → geringer Einfluss des Aromaten- und Olefinanteils im Kraftstoff nach EN228.
- 3-Komponenten-Kraftstoffe spiegeln nicht das Kraftstoffverhalten der äquivalenten realen Proben wider.

Weiterhin gibt Tabelle 9 auf Basis der Splash Blend Resultate eine Übersicht der Komponenteneinflüsse auf die Oberflächenzündneigung im Einzylinder-Forschungsmotor. Die dargestellte Bewertung wird anhand der Differenz der 2 % Glühstifttemperatur des jeweiligen Splash Blends zum Basiskraftstoff KK03 vorgenommen. Ein (+) beschreibt in diesem Zu-

sammenhang eine positive Auswirkung der Komponente wohingegen ein (-) eine schlechtere Kraftstoffperformance erkennen lässt. Aufgrund eines in der Kraftstoffauswahl nicht berücksichtigten ETBE Splash Blends wird dessen Einfluss mittels der Match Blend Mischung bewertet.

Tabelle 9. Übersicht des Einflusses verschiedener Kraftstoffkomponenten auf die Glühzündungsneigung im Einzylinder-Forschungsmotor.

	Komponente	20 % mol.	40 % mol.
Paraffin	Isohexan	--	Nicht vorhanden
Naphthen	Cyclohexan	--	Nicht vorhanden
Olefin	n-Hexen	--	Nicht vorhanden
Aromat	Toluol	o	Nicht vorhanden
Oxygenat	Ethanol	o	o
	Methanol	o	-
	ETBE	o	Nicht vorhanden
Referenz KK03		++/-- $\Delta T_{2\%VEH} \geq 20 \text{ K}$ +/- $\Delta T_{2\%VEH} \geq 10 \text{ K}$	

### 5.2.2 Korrelation mit dem CFR-Prüfverfahren (HSPI)

Im Laufe dieses Forschungsprojektes wurden zahlreiche Versuche unternommen eine oder mehrere geeignete Kraftstoffeigenschaften zu identifizieren, welche eine Einstufung der Vor-entflammungsneigung an einer heißen Oberfläche zulassen. Ein Ausschnitt daraus findet sich in Abbildung 5-24.

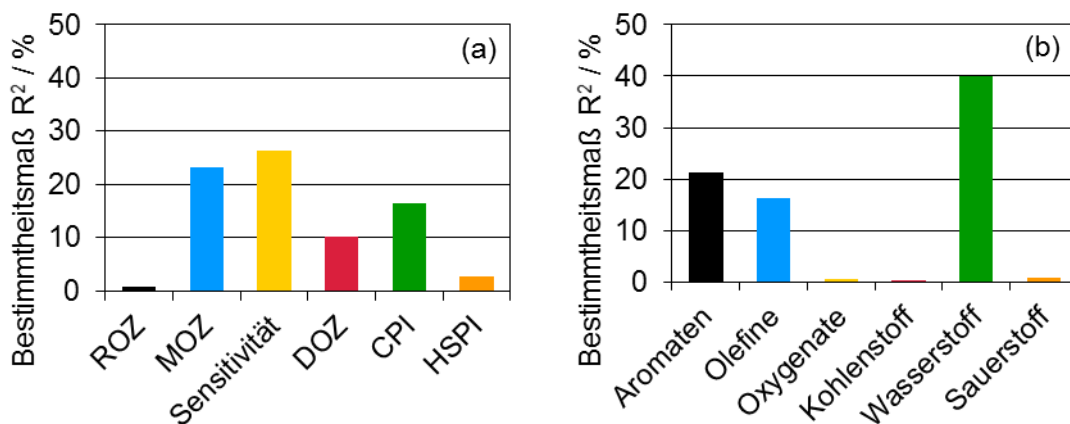


Abbildung 5-24. Bestimmtheitsmaße der Korrelationen der Glühstifttemperatur bei 2 % Vor-entflammungshäufigkeit mit verschiedenen CFR-Kennzahlen, Kraftstoffanteilen und elemen-

taren Grundbestandteilen des Kraftstoffes (CPI bei 200 °C, HSPI/DOZ bei 149 °C Ansauglufttemp.).

In Diagramm (b) von Abbildung 5-24 sind Bestimmtheitsmaße für lineare Korrelationen zwischen verschiedenen Anteilen der Kraftstoffzusammensetzung und der Glühstifttemperatur bei 2 % Vorentflammungshäufigkeit dargestellt.

Die niedrigen Werte bestätigen, dass eine grobe Berücksichtigung einzelner Aspekte der Kraftstoffzusammensetzung kaum eine Aussage über die chemische Reaktivität der Kraftstoffe zulässt.

Weitere Korrelationen sind in Abbildung 5-24 (a) zu sehen. Darin sind gleichermaßen wie in (b) Bestimmtheitsmaße der linearen Korrelationen der Glühstifttemperatur bei 2 % Vorentflammungshäufigkeit mit relevanten Kennzahlen aus CFR-Verfahren dargestellt. Dass eine Vielzahl der Korrelationsansätze nicht zielführend ist, ist zunächst kein unerwartetes Ergebnis, da mit Ausnahme der HSPI keine Kennzahl auf die Glühzündungsbewertung ausgelegt wurde. Die HSPI weist dennoch keinen prädiktiven Zusammenhang mit der motorischen Oberflächenzündung auf. Dieser Sachverhalt wird im Folgenden eingehender untersucht.

Dazu ist in Abbildung 5-25 die Korrelation zwischen der kritischen Glühstifttemperatur und der HSPI im Detail abgebildet. Dabei sind Kraftstoffe mit einem signifikanten Maß an Vorwärmefreisetzung durch nicht ausgefüllte Symbole hervorgehoben. Diese Vorwärmefreisetzung und dessen Auswirkung auf die Glühzündungsneigung wurden bereits in Kapitel 5.2.1 detailliert diskutiert.

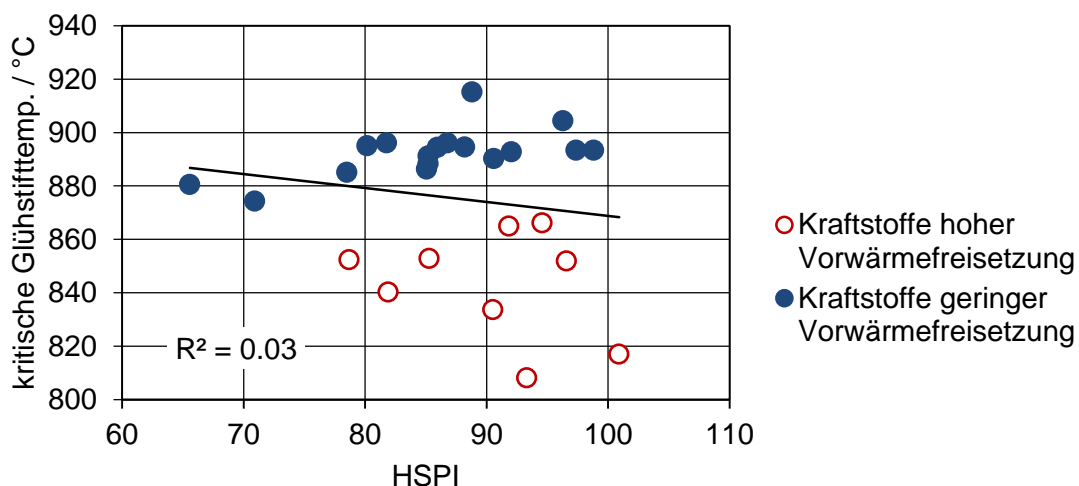


Abbildung 5-25. Korrelation der kritischen Glühstifttemperatur bei 2 % Vorentflammungshäufigkeit und der HSPI.

Bei den gekennzeichneten Kraftstoffen hoher Wärmefreisetzung handelt es sich mit Ausnahme von zwei Splash Blends (Isohexan und n-Hexen) um jene Proben mit einem hohen Anteil an Isooktan. Diese umfassen die CFD Surrogate als auch vereinzelt Match Blends. Diese Vorwärmefreisetzung ist allerdings im CFR-Motor, mit welchem die HSPI gemessen

wird, nicht zu beobachten. Aufgrund des vergleichsweise niedrigen Saugrohrdruckes und des niedrigen Kompressionsverhältnisses des CFR-Verfahrens wird die Zylinderladung in andere reaktionskinetische Regime versetzt, als es im Einzylinder-Motor der Fall ist. Abbildung 5-26 veranschaulicht dies anhand simulierter Zündverzugszeiten.

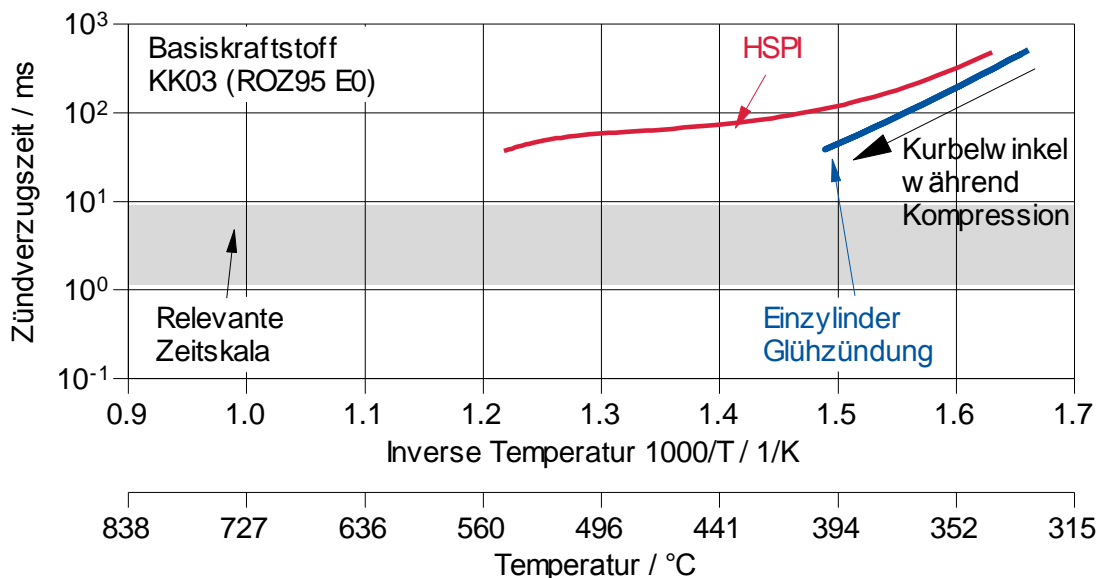


Abbildung 5-26. Simulierte Zündverzugszeiten unter den thermodynamischen Bedingungen des HSPI Messverfahrens im CFR-Prüfmotor und den Glühzündungsexperimenten im Einzylinder-Forschungsmotor.

In dem Diagramm sind Zündverzugszeiten für den Basismischkraftstoff KK03 dargestellt. Diese wurden für Druck- und Temperaturwertepaare während der Kompression in beiden Motoren berechnet. Dazu wurden während der Kompression der kurbelwinkelspezifische Brennraumdruck und die Brennraumtemperatur zugrunde gelegt und basierend darauf eine Zündverzugszeit berechnet. Der Kurbelwinkelbereich für diese Berechnungen erstreckt sich lediglich entlang der Kompression bis zum Zeitpunkt der Fremdzündung durch die Zündkerze, da dieser Zeitbereich für Vorentflammungen relevant ist.

Das Ergebnis der Berechnung ist eine Kurve die zu Beginn der Kompression bei niedrigem Druck und niedriger Temperatur zu hohen Zündverzugszeiten führt und mit zunehmender Kompression in immer geringeren Zündverzügen resultiert. Aus diesem Grund erstrecken sich die beiden Kurven aus Abbildung 5-26 entlang der Pfeilrichtung der Kompression von oben rechts nach unten links im Diagramm. Dargestellt ist außerdem noch das Zeitintervall, in welchem potentiell Selbstzündung innerhalb eines Zyklus im Motor auftreten kann. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Gasphase im Zylinder bei den vorherrschenden mittleren Brennraumdrücken und -temperaturen des HSPI sowie des Einzylinder Messverfahrens nicht in Zündverzugszeitregime vordringt, in welchen eine vollständige Zündung zu erwarten ist. Dies ist insofern verständlich da eine vollständige Zündung bei Glühzündungen nicht infolge der mittleren Brennraumtemperaturen stattfindet, sondern in Gegenwart einer heißen

Oberfläche, welche jedoch in diesem Diagramm nicht berücksichtigt wurde. Es ist weiterhin zu sehen, dass die kürzesten Zündverzugszeiten in beiden Messverfahren in sehr unterschiedlichen Temperaturbereichen auftreten, woraus auch eine abweichende Charakteristik hinsichtlich der Vorwärmefreisetzung zu erwarten wäre. Es ist anzunehmen, dass dies unter anderem eine Ursache für die breite Streuung der Korrelation in Abbildung 5-25 ist.

Mit dem Ziel die CFR-Betriebsbedingungen jenen des Einzylinder-Forschungsmotors anzupassen wurde eine Reduktion der Ansauglufttemperatur beim HSPI-Verfahren von 149 °C auf 50 °C vorgenommen. Das Ergebnis dieser Untersuchung ist in Abbildung 5-27 dargestellt. Zusätzlich zum Resultat der 50 °C Messung sind ebenfalls die HSPI-Daten bei 149 °C eingetragen. Da nicht alle Kraftstoffe bei 50 °C gemessen werden konnten, sind ausschließlich jene Proben dargestellt, welche bei beiden Verfahrensvarianten getestet wurden.

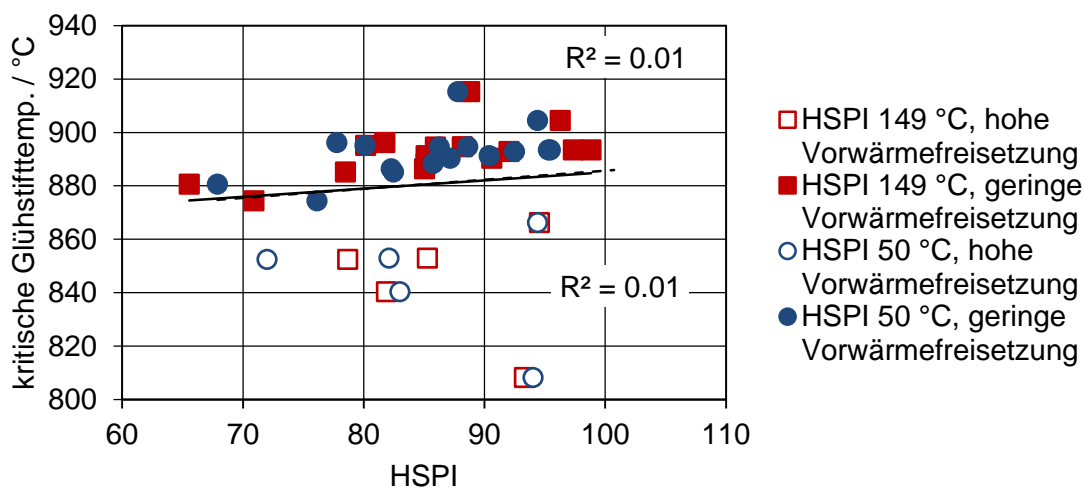


Abbildung 5-27. Korrelation der kritischen Glühstifttemperatur bei 2 % Vorentflammungshäufigkeit und der HSPI unter „heißen“ (149 °C) und „kalten“ (50 °C) Bedingungen.

Infolge der reduzierten Ansauglufttemperatur konnte keine Verbesserung des Verfahrens erzielt werden. Wie bereits in Kapitel 5.2.1 anhand numerischer Daten erläutert wurde, zeigt jedoch unter anderem ebenfalls der Strömungszustand am Glühstift signifikanten Einfluss auf das Selbstzündungsverhalten. Im Fall des CFR-Aggregates ist die Positionierung des Glühstiftes im Randbereich des Brennraumes (ehemals Position des Pick-Up Sensors) in einer Tasche vorgesehen (Abbildung 4-10). Es ist anzunehmen, dass infolge dieser Position, als auch aufgrund des Brennverfahrens an sich sowie der geringen Drehzahl von 900 1/min ein relativ geringes Ladungsbewegungsniveau zu erwarten ist. Im Gegensatz dazu wurden die Glühzündungsexperimente im Einzylinder-Forschungsmotor bei 1500 1/min und modernem Tumble-Brennverfahren durchgeführt. Zusätzlich ragt die seitliche Glühstiftpositionierung am Einzylinder-Motor tendenziell in die Tumble-Ladungsbewegung hinein (Abbildung 4-6). Dementsprechend ist am Glühstift eine relativ hohe Strömungsgeschwindigkeiten zu erwarten.

Zusammen mit der Erkenntnis aus Kapitel 5.2.1, dass die Strömungsgeschwindigkeit an einer heißen Oberfläche einen maßgebenden Einfluss auf die Zündempfindlichkeit des angrenzenden Gases ausüben kann, sind die potenziell sehr unterschiedlichen Strömungszustände am Glühstift in CFR- und Einzylinder-Motor als kritisch zu betrachten. An dieser Stelle sei darauf verwiesen, dass ein finales Urteil hierzu eine detaillierte Untersuchung der Strömungszustände in beiden Motoren voraussetzt, was in Rahmen dieser Arbeit nicht vorliegt.

### 5.3 Analyse der Gasphasenvorentflammung

Auch in diesem Kapitel wird zu Beginn gemäß Kapitel 5.2 eine detaillierte Diskussion der Ergebnisse aus den Untersuchungen am Einzylinder-Forschungsmotor vorgenommen. Zusätzlich zu der gemessenen Vorentflammungshäufigkeit werden die am Einhubtriebwerk experimentell ermittelten Zündverzugszeiten herangezogen um den Einfluss der Mischkomponente auf die Selbstzündungscharakteristik hervorzuheben.

Die anschließende Validierung der am CFR-Motor bzw. dem AFIDA entwickelten Bewertungsverfahren wird durch Messungen am Dreizylinder-Serienaggregat erweitert. Ein Vergleich der Messergebnisse am Dreizylinder-Motor und Einzylinder-Forschungsmotor gibt Aufschluss über die Vergleichbarkeit unterschiedlicher moderner Aggregate und untermauert die Gültigkeit der Entwicklung potenzieller Prüfverfahren.

#### 5.3.1 Bewertung am Einzylinder-Forschungsmotor

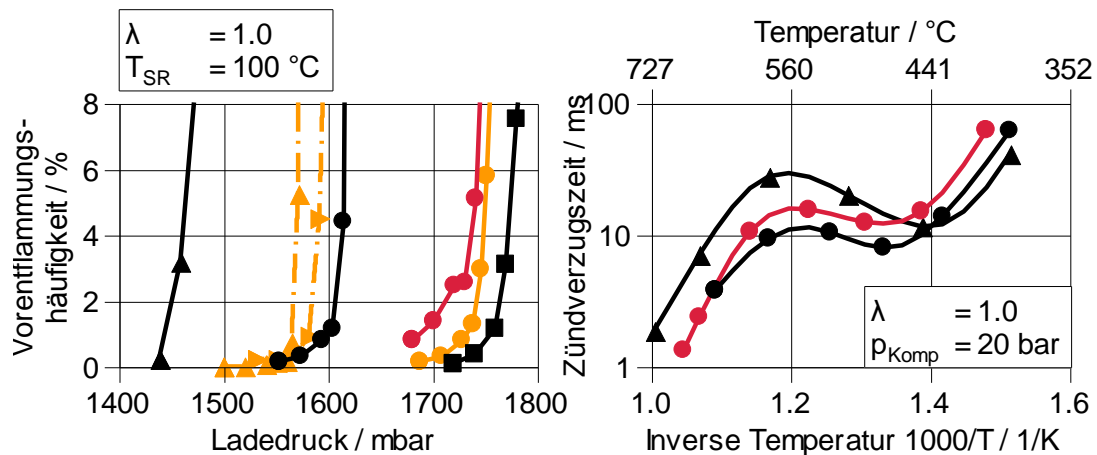
##### Grundkraftstoffe

In Abbildung 5-28 soll zunächst anhand der EN228 konformen Tankstellenkraftstoffe (KK01, KK03, KK20-21) die Bandbreite der ermittelten kritischen Ladedrücke dargestellt werden. Der Abbildung sind das dem Grundkraftstoff KK03 „äquivalente“ CFD Surrogat KK02 (PRF95) sowie reines Isooktan zur Bewertung des n-Heptan Einflusses hinzugefügt.

Zur Analyse potenzieller Einflussfaktoren auf die Vorentflammungsneigung ist erneut die Stoffzusammensetzung bzw. die ROZ dieser Kraftstoffgruppe angegeben. Die Tankstellenkraftstoffe lassen eine äußerst unterschiedliche Gasphasenzündungscharakteristik erkennen. KK01 und KK22 weisen die höchste Vorentflammungsresistenz infolge einer kritischen Gasphase auf und sind nur geringfügig empfindlicher als Isooktan. Gleiches gilt für die ROZ dieser Kraftstoffe.

Die restlichen hier dargestellten Proben zeigen sowohl in deren Vorentflammungsverhalten als auch in deren ROZ deutlich selbstzündungswilligere Eigenschaften. Im Unterschied zur Glühzündungsneigung ist im Fall der Gasphasenzündung zunächst ein tendenzieller Zusammenhang zwischen ROZ und der Vorentflammung zu beobachten.





	KK	Kraftstoff	Paraffin / % vol.	Naphten / % vol.	Aromat / % vol.	Olefin / % vol.	Oxygenat / % vol.	ROZ
●	01	E5	44.8	5.7	33.9	6.4	9.2	97.3
▲	02	PRF 95	100	-	-	-	-	95.0
●	03	E0	52.8	6.0	31.0	6.4	3.9	95.1
▶	20	E5	41.6	5.2	35.1	9.2	8.9	95.4
▲	21	E5	50.1	3.9	20.7	17.6	7.6	95.3
●	22	E10	45.5	3.7	34.0	7.6	9.3	97.0
■		Isoktan	100	-	-	-	-	100

Abbildung 5-28. Vorentflammungshäufigkeit infolge einer kritischen Gasphase der Referenz- und Marktkraftstoffe

Da jedoch innerhalb der ROZ95 Kraftstoffe: KK02, KK03, KK20 und KK21 ebenfalls ein unterschiedliches Vorentflammungsverhalten erkennbar ist, ist auf Basis der ROZ kein belastbares Kraftstoffranking gegeben. Vor allem das CFD Surrogat zeigt erneut signifikant abweichende Tendenzen im Vergleich zu dessen äquivalenten ROZ95 Realgemischen.

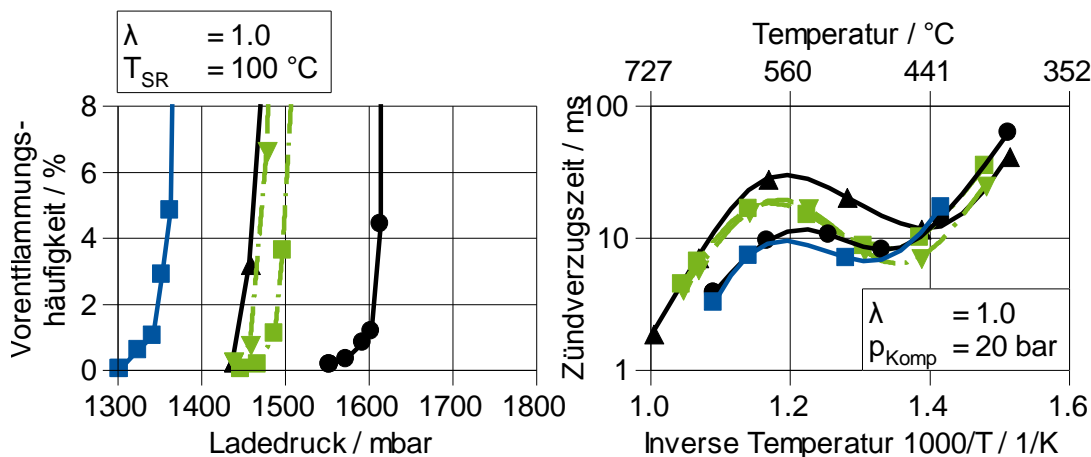
Wie bereits in Kapitel 5.2.1 ist auch bei der Gasphasenzündung kein offensichtlicher Zusammenhang zwischen der Selbstzündungsneigung der Kraftstoffe und den Stoffmengenanteilen der Kohlenwasserstoffgruppen nachvollziehbar. So ist unter anderem zu sehen, dass der Ethanol-Anteil im Kraftstoff zwischen 0 und 10 % keinen strikten Zusammenhang zur Vorentflammungsfestigkeit ableiten lässt.

KK22 ist mit 10 % Ethanol-Anteil zwar vorentflammungsresistenter als Kraftstoffe mit 0 oder 5 % Ethanol, allerdings weisen Kraftstoffe mit 5 % Ethanol-Gehalt ein weiteres Ladedruckspektrum auf. Eine detaillierte Untersuchung des Komponenteneinflusses auf Basis einer gaschromatografischen Analyse folgt in Kapitel 5.4.

Betrachtet man die Zündverzugszeiten der Proben KK01, KK02 und KK03, sind ähnliche Tendenzen zwischen den Zündverzugszeiten und der Vorentflammungshäufigkeit ableitbar. Dem Vergleich dieser Kraftstoffe ist zu entnehmen, dass im Temperaturbereich unter etwa 441 °C das Zündverzugsranking dem Vorentflammungsranking entspricht.

**Isohexan**

Die Zugabe von Isohexan führt neben der deutlichen Reduktion der Klopfintensität ebenfalls, analog der Glühzündungsuntersuchung, zu einem signifikant kritischeren Vorentflammungsverhalten des Splash Blends KK25.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
▼	04	20 % Isohexan CFD	1.4 (1.3)	78.7 (82.1)	94.9
■	08	20 % Isohexan MB	1.0 (1.0)	60.4 (65.9)	95.1
■	25	20 % Isohexan SB	-	-	92.9

Abbildung 5-29. Vorentflammungshäufigkeit infolge einer kritischen Gasphase bei Zugabe von Isohexan zu PRF95.

Infolge des hohen Isooktan-Anteils im Match Blend KK08 ist gegenüber des Splash Blends KK25 ein signifikant resistenteres Verhalten zu beobachten. Dies spiegelt nicht das Ergebnis der Glühzündungsexperimente wider, wo Isooktan eine offensichtlich kritischere Charakteristik hervorruft. Ebenfalls der PRF95 KK02 stellt sich in diesem Experiment nicht mehr als reaktivste Probe dar. Betrachtet man die zugehörigen Zündverzugszeiten so ist im Niedertemperaturbereich bei etwa 441 °C zwischen den Proben KK02, KK03, KK08 und KK25 zunächst kein signifikanter Unterschied auszumachen. Bei zunehmender Temperatur weist speziell KK02 in der Zündverzugsanalyse jedoch ein deutlich unkritischeres Verhalten auf als KK03. Dies lässt erneut die Annahme zu, dass die Niedertemperaturkinetik eine wesentliche Rolle im Selbstzündungsverhalten infolge einer kritischen Gasphase spielt.

Im Unterschied zur Zündung an einer heißen Oberfläche, zeigt in diesem Fall das CFD Surrogat KK04 ein sehr ähnliches Selbstzündungsniveau wie der äquivalente Realrafftstoff KK08.

### n-Hexen

Eine Mischung aus 20 % mol. n-Hexen und dem Grundkraftstoff ist nach Abbildung 5-30 deutlich anfälliger auf Vorentflammung als der Grundkraftstoff KK03. Der Splash Blend KK26 bewirkt eine erhebliche Absenkung des kritischen Ladedruckes. Dieses Verhalten zeigt sich ebenfalls bei den Glühzündungsexperimenten. Eine Anhebung der ROZ durch Zugabe von Isooktan (KK09) erzielt ebenfalls eine Anhebung der Vorentflammungsresistenz. Wie zuvor erwähnt musste der gesamte Grundkraftstoff-Anteil dem Isooktan zur Mischung einer ROZ95 weichen, wodurch kein „realer“ Match Blend darstellbar war. Auch im Fall des n-Hexens führt der hohe Isooktan-Anteil im CFD-Surrogat, entgegen der Glühzündungsergebnisse, zu einer Vorentflammungsresistenteren Mischung als der Splash Blend.

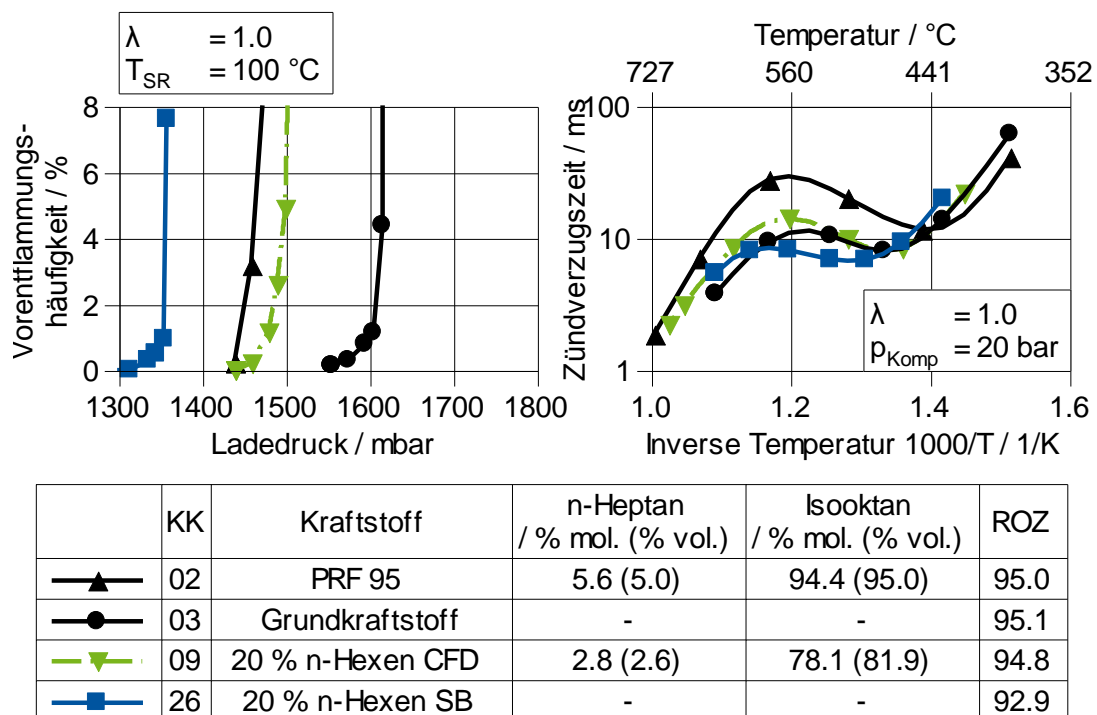


Abbildung 5-30. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von n-Hexen zu PRF95.

Hinsichtlich KK09 liegt ein höheres Isooktan zu n-Heptan Verhältnis vor als bei KK02 wodurch ebenfalls eine geringfügig höhere Vorentflammungsresistenz beobachtbar ist. Dieser Trend deutet sich auch bei den Zündverzugszeiten der beiden Proben an. Unterhalb einer Referenztemperatur von 441 °C ist zwar eine nur geringe Datenbasis an Zündverzugszeiten für KK09 verfügbar, allerdings ist ein Trend des Niedertemperaturastes hin zu längeren Zündverzügen als bei KK02 zu erkennen.

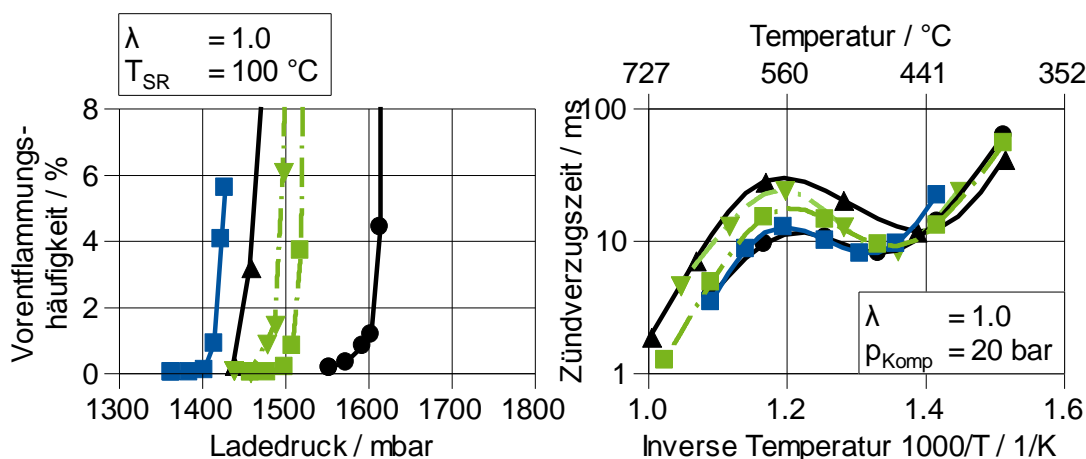
Anhand der Zündverzugszeiten der vier dargestellten Kraftstoffe lässt sich nicht eindeutig ein Temperaturintervall finden, in welchem ein vergleichbares Vorentflammungsranking abgeleitet werden kann. Speziell im Niedertemperaturregime zeigt KK26 ein zündresistenteres Verhalten, was gemäß den Einzylinder-Untersuchungen nicht zu erwarten wäre.

### Cyclohexan

Ähnlich der Beimischung von Isohexan bzw. n-Hexen führt die Zugabe von 20 % mol. Cyclohexan in Abbildung 5-31 zu einer Reduktion der Vorentflammungsresistenz. Der Splash Blend KK28 hat bei einer Vorentflammungswahrscheinlichkeit von 2 % einen um etwa 200 mbar geringeren Ladedruck als der Grundkraftstoff. Der hohe Isooktan-Anteil im Match Blend lässt erneut eine resistenteren Charakteristik beobachten.

Auf Basis der Zündverzugszeiten im Niedertemperaturbereich ist zunächst das motorische Vorentflammungsverhalten von PRF95 und dem CFD Surrogat KK07 nachvollziehbar.

Bei einer Temperatur von etwa 441 °C kreuzen sich die Zündverzugskurven und unterhalb dieser Temperaturgrenze ist der PRF95 reaktiver als KK07. Berücksichtigt man jedoch die realen Kraftstoffmischungen so ist analog der n-Hexen Resultate in Abbildung 5-30 kein Temperaturbereich eindeutig feststellbar, welcher ein vergleichbares Ranking zum Einzylinder-Forschungsmotor erkennen lässt.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
▼	07	20 % Cyclohexan CFD	3.7 (3.6)	76.7 (82.7)	95.3
■	11	20 % Cyclohexan MB	2.2 (2.2)	55.4 (63.1)	95.2
■	28	20 % Cyclohexan SB	-	-	93.5

Abbildung 5-31. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von Cyclohexan zu PRF95.

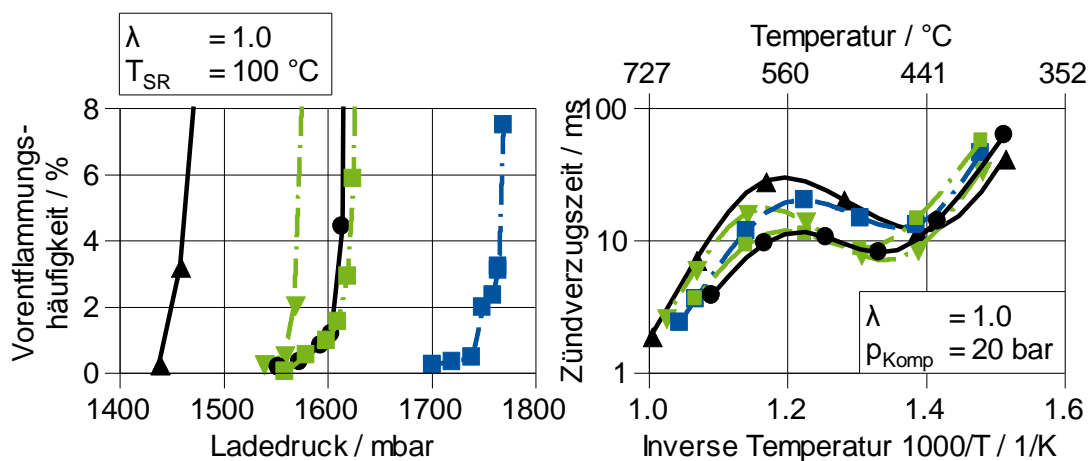
Wie bereits in Abbildung 5-29 bzw. Abbildung 5-30 zeigt das CFD Surrogat KK07 ein kritisches Ladedruckniveau ähnlich jenem des Match Blends KK11.

### Toluol

Eine deutliche Erhöhung der Vorentflammungsresistenz bzw. der Zündverzugszeiten oberhalb von 441 °C ergibt sich in Abbildung 5-19 aus einer Zumischung von 20 % mol. Toluol.

Die hohe Vorentflammungsresistenz dieses Kraftstoffes spiegelt sich in den Glühzündungsuntersuchungen nicht wider.

Durch die Zugabe von etwa 4 % mol. n-Heptan zum Match Blend KK10 kommt es zu einem reaktiveren Verhalten, gleich jenem des Grundkraftstoffes KK03. Dies ist anhand der Zündverzugskurven in einem Temperaturbereich zwischen 470 – 560 °C zu beobachten. Berücksichtigt man zusätzlich die CFD Kraftstoffe KK02 und KK06 so lässt sich deren Vorentflammungsreihenfolge nicht in dem oben genannten Temperaturintervall einordnen. In diesem Fall zeigen Temperaturen unterhalb von 441 °C eine Zündreihenfolge ähnlich jenem Verhalten im Einzylinder-Motor.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
▼	06	20 % Toluol CFD	8.4 (8.1)	71.6 (77.9)	95.1
■	10	20 % Toluol MB	4.2 (5.0)	-	95.3
■	27	20 % Toluol SB	-	-	97.8

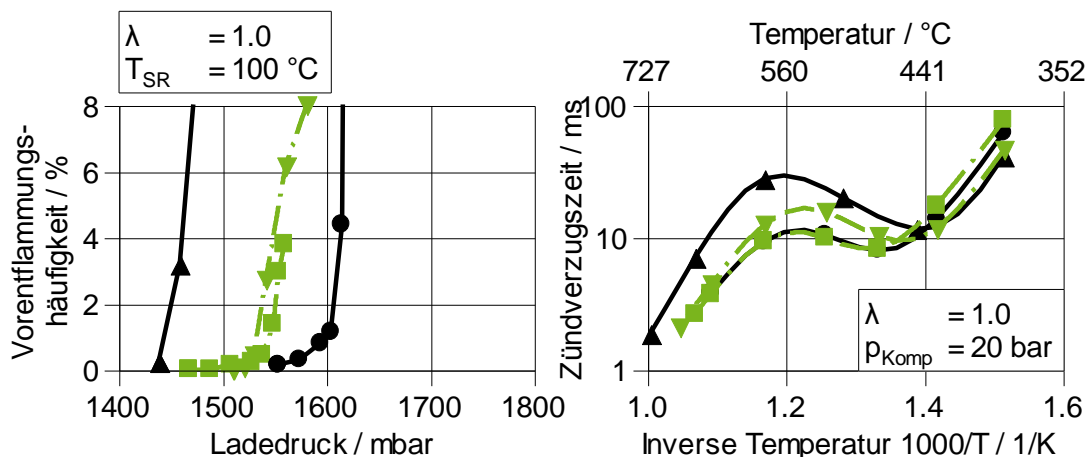
Abbildung 5-32. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von Toluol zu PRF95.

Im Unterschied zu den Kraftstoffkomponenten zuvor zeigen das CFD Surrogat KK06 und der äquivalente Realkraftstoff KK10 eine größere Differenz in deren Vorentflammungsneigung.

### ETBE

Bei der Mischkomponente ETBE ist in Abbildung 5-33 das reduzierte Vorentflammungsverhalten von KK17 in keinem Temperaturintervall der Zündverzugszeiten zu erfassen.

Speziell im Niedertemperaturbereich zeigt KK17 gemäß der Zündverzugsanalyse sogar ein etwas Selbstzündungsresistenteres Verhalten als der Grundkraftstoff. In diesem Bereich würde sich jedoch das reaktivere motorische Verhalten von KK02 und KK14 ableiten lassen.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
▼	14	20 % ETBE CFD	12.4 (11.5)	68.4 (71.6)	95.5
■	17	20 % ETBE MB	7.1 (7.9)	-	95.4

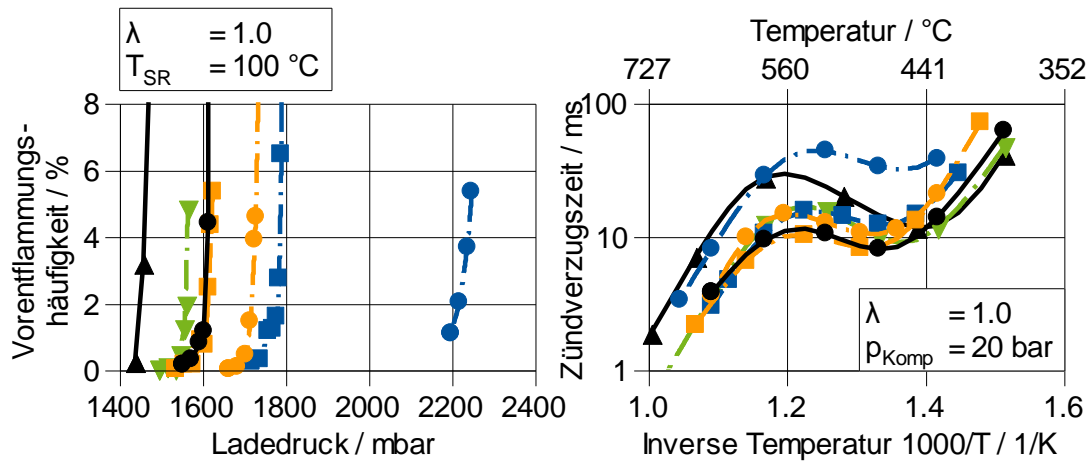
Abbildung 5-33. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von ETBE zu PRF95.

### Methanol

Methanol besitzt gleich den anderen untersuchten alkoholhaltigen Komponenten eine sehr hohe Verdampfungsenthalpie. In Abbildung 5-34 geht dementsprechend eine erhebliche Erhöhung der Vorentflammungsresistenz durch das Methanol hervor. Dies wird deutlich im Hinblick auf die Ergebnisse der Splash Blends, KK30 und KK32. Auch die Zündverzugszeiten dieser Kraftstoffe belegen in einem weiten Temperaturbereich eine geringere Zündneigung dieser Blends. Im Zuge der Glühzündungsanalysen in Abbildung 5-21 war die gesteigerte Selbstzündungsresistenz nicht beobachtbar.

Des Weiteren wird erneut der negative Einfluss von geringen Mengen an n-Heptan deutlich, wenn man KK16 und KK19 hinzuzieht. Der geringe n-Heptan-Anteil von etwa 3 % mol. in KK16 bewirkt gegenüber dem Splash Blend gleichen Methanol-Gehaltes (KK30) bereits eine signifikante Reduktion der Vorentflammungsresistenz. Im Falle des 40 % mol. Splash Blends KK32 zeigt sich infolge des höheren n-Heptan-Anteiles ein noch deutlicherer Unterschied zwischen der Vorentflammungscharakteristik des Splash Blends und des Match Blends KK19.

Betreffend das CFD Surrogat KK13 ist aufgrund des hohen Methanol/ETBE-Anteils eine gegenüber KK02 gesteigerte Vorentflammungsresistenz zu erkennen. Die Zündverzugszeiten von KK13 liegen im Hoch- und Intermediärtemperaturbereich zunächst deutlich unter der von KK02, nähern sich diesen jedoch im Niedertemperaturbereich an.



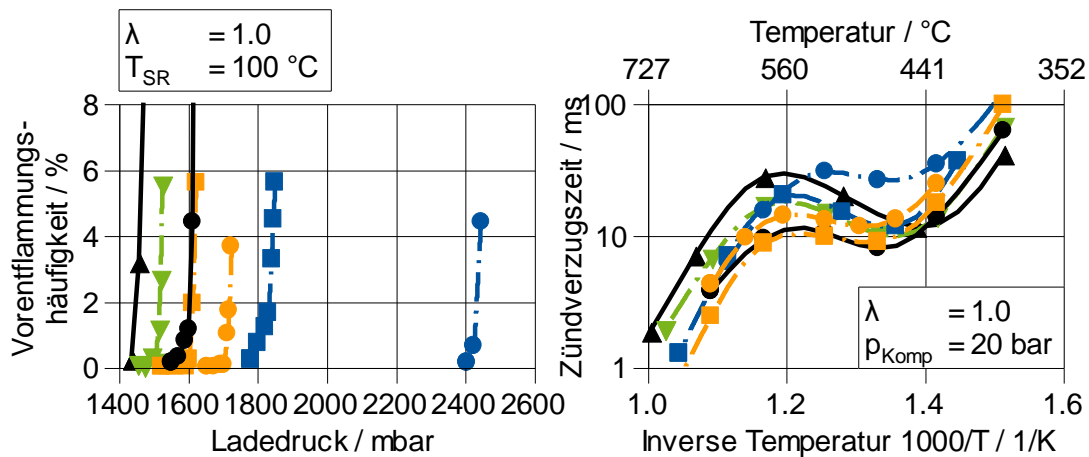
	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
—▲—	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
—●—	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
—▼—	13	20 % Methanol + 20 % ETBE CFD	14.7 (16.2)	46.5 (57.7)	95.3
—■—	16	20 % Methanol MB	2.6 (3.4)	-	95.3
—○—	19	40 % Methanol MB	5.6 (8.7)	-	94.9
—■—	30	20 % Methanol SB	-	-	97.1
—●—	32	40 % Methanol SB	-	-	99.1

Abbildung 5-34. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von Methanol und ETBE zu PRF95.

Im Temperaturbereich um  $T_{\text{Ref}} = 441 \text{ °C}$  sind die Zündverzugszeiten nahezu identisch. Generell lassen sich die Zündverzugszeiten in diesem Bereich relativ gut mit den Ergebnissen am Einzylinder-Motor vergleichen.

### Ethanol

Im Unterschied zu den Glühzündungsuntersuchungen in Abbildung 5-22 ist bei den Gasphasenzündungen ein signifikanter Einfluss des Ethanols ersichtlich. Wie bereits bei Methanol führt die hohe Verdampfungsenthalpie des Alkohols zu einer deutlich reduzierten Vorentflammungsneigung der Splash Blends. Dementsprechend lassen sich die gleichen Erkenntnisse ableiten. Im Vergleich zu Methanol zeigt Ethanol in gleicher molarer Menge eine nochmals gesteigerte Selbstzündungsresistenz. Sowohl die ROZ als auch der kritische Ladedruck ist bei den Splash Blends höher. Auf Basis der Zündverzugsanalyse lässt sich die Vorentflammungscharakteristik der Kraftstoffe im Bereich um  $441 \text{ °C}$  nachvollziehen.



	KK	Kraftstoff	n-Heptan / % mol. (% vol.)	Isooktan / % mol. (% vol.)	ROZ
▲	02	PRF 95	5.6 (5.0)	94.4 (95.0)	95.0
●	03	Grundkraftstoff	-	-	95.1
▼	12	20 % Ethanol CFD	9.9 (10.2)	70.7 (81.9)	95.6
■	15	20 % Ethanol MB	3.4 (4.4)	-	95.2
●	18	40 % Ethanol MB	7.3 (10.5)	-	95.6
■	29	20 % Ethanol SB	-	-	98.0
●	31	40 % Ethanol SB	-	-	100.4

Abbildung 5-35. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von Methanol und ETBE zu PRF95.

### Zusammenfassung

Die detaillierte Diskussion der Einflüsse verschiedener Kohlenwasserstoffe und Mischungen auf die Gasphasenvorentflammungsneigung lässt sich wie folgt anhand einiger wesentlicher Beobachtungen zusammenfassen:

- Der Einfluss einzelner Komponenten und Mischungen auf die Vorentflammungsneigung kann teilweise anhand der chemischen Zündverzugszeiten gemessen bei 20 bar und  $\lambda = 1$  erklärt werden. Speziell der Niedertemperaturbereich der Oxidation scheint in diesem Zusammenhang wesentlich zu sein.
- Auf Basis einer simplen Analyse der Stoffgruppenanteile ist keine Vorhersage zur Vorentflammungsneigung zu treffen.
- Große Unterschiede in der ROZ einzelner Kraftstoffe deuten bereits auf unterschiedliche Vorentflammungsneigungen hin.
- Kleine Unterschiede in der ROZ, besonders im Bereich einer ROZ95, erlauben keine ausreichend akkurate Vorhersage der Vorentflammungsneigung einzelner Kraftstoffe.
- Eine Zufuhr von geringen Mengen an n-Heptan führt zu einem deutlichen Abfall der Vorentflammungsresistenz
- Die Zufuhr von Ethanol, Methanol, ETBE und Toluol trägt zu einer Erhöhung der Vorentflammungsresistenz bei.



- Weiterhin bewirken diese Komponenten auch eine höhere Verträglichkeit der Kraftstoffe gegenüber n-Heptan hinsichtlich der Vorentflammungsneigung.
- CFD Surrogate spiegeln das Vorentflammungsverhalten realer Kraftstoffmischungen deutlich besser wider als dies bei den Glühzündungsuntersuchungen der Fall ist.

Weiterhin ist in Abbildung 5-36 die Korrelation der gemessenen kritischen Ladelufttemperaturen und der kritischen Ladedrücke aus den Experimenten im Drei- und Einzylinder-Motor dargestellt. Die Datenpunkte beinhalten nicht die gesamte Kraftstoffauswahl aus Tabelle 1. CFD Kraftstoffe waren nicht zur Messung am Vollmotor vorgesehen. Des Weiteren konnte unter Berücksichtigung schadensrelevanter Aspekte der 40 % mol. Ethanol Splash Blend KK31 am Dreizylinder-Aggregat nicht zur Vorentflammung gebracht werden.

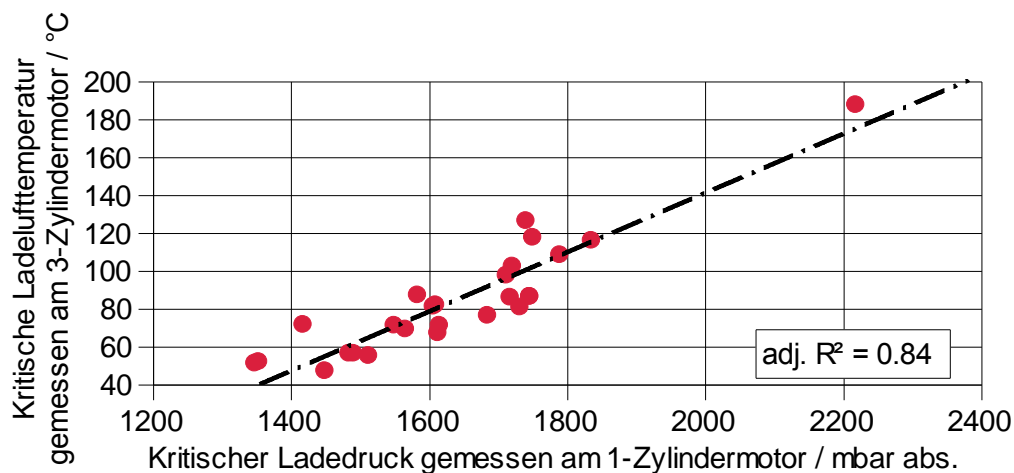


Abbildung 5-36. Korrelation zwischen dem kritischen Ladedruck gemessen im 1-Zylinderforschungsmotor und der kritischen Ladelufttemperatur gemessen im 3-Zylindervollmotor für 25 der untersuchten Kraftstoffe.

Trotz der unterschiedlichen Versuchsträger (Tabelle 2 und Tabelle 6) und der abweichenden Messmethodik (Tabelle 4 und Tabelle 7) ist eine hohe Ergebnisübereinstimmung beider Verfahren zu erkennen. Ein adjustiertes Bestimmtheitsmaß  $\text{adj. } R^2$  von 84 % attestiert eine versuchsträgerübergreifende Vorentflammungsneigung der betrachteten Kraftstoffe.

Abschließend gibt Tabelle 10 auf Basis der Splash Blend Resultate eine Übersicht der Komponenteneinflüsse auf die Vorentflammungsneigung aus der Gasphase heraus im Einzylinder- und Vollmotor. Die dargestellte Bewertung wird anhand der Differenz des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur des jeweiligen Splash Blends zum Basis-Kraftstoff KK03 vorgenommen. Ein (+) beschreibt in diesem Zusammenhang eine positive Auswirkung der Komponente wohingegen ein (-) eine schlechtere Kraftstoffperformance erkennen lässt. Aufgrund eines in der Kraftstoffauswahl nicht berücksichtigten ETBE Splash Blends wird dessen Einfluss mittels der Match Blend Mischung bewertet.

Tabelle 10. Übersicht des Einflusses verschiedener Kraftstoffkomponenten auf die Vorentflammungsneigung in beiden modernen Aggregaten.

		1-Zylindermotor		3-Zylindermotor	
Komponente		20 % mol.	40 % mol.	20 % mol.	40 % mol.
Paraffin	Isohexan	--	Nicht vorh.	--	Nicht vorh.
	Isooktan	+	Nicht vorh.	+	Nicht vorh.
Naphthen	Cyclohexan	-	Nicht vorh.	-	Nicht vorh.
Olefin	n-Hexen	--	Nicht vorh.	--	Nicht vorh.
Aromat	Toluol	+	Nicht vorh.	+	Nicht vorh.
Oxygenat	Ethanol	++	++	++	Nicht vorh.
	Methanol	+	++	++	++
	ETBE	o	Nicht vorh.	-	Nicht vorh.
Referenz KK03		++/-- $\Delta p_{krit} \geq 200$ mbar +/- $\Delta p_{krit} \geq 100$ mbar		++/-- $\Delta T_{krit} \geq 10$ K +/- $\Delta T_{krit} \geq 5$ K	

### 5.3.2 Korrelation mit dem CFR-Prüfverfahren (CPI)

Im Rahmen der Korrelationsanalyse zur Beschreibung der Gasphasenvorentflammungsneigung eines Kraftstoffes haben kraftstoffspezifische Stoffeigenschaften keinen nennenswerten Zusammenhang zur Selbstzündungsneigung erkennen lassen. Ein Auszug der ermittelten Bestimmtheitsmaße  $R^2$  auf Basis der Stoffzusammensetzung ist Abbildung 5-37 zu entnehmen.

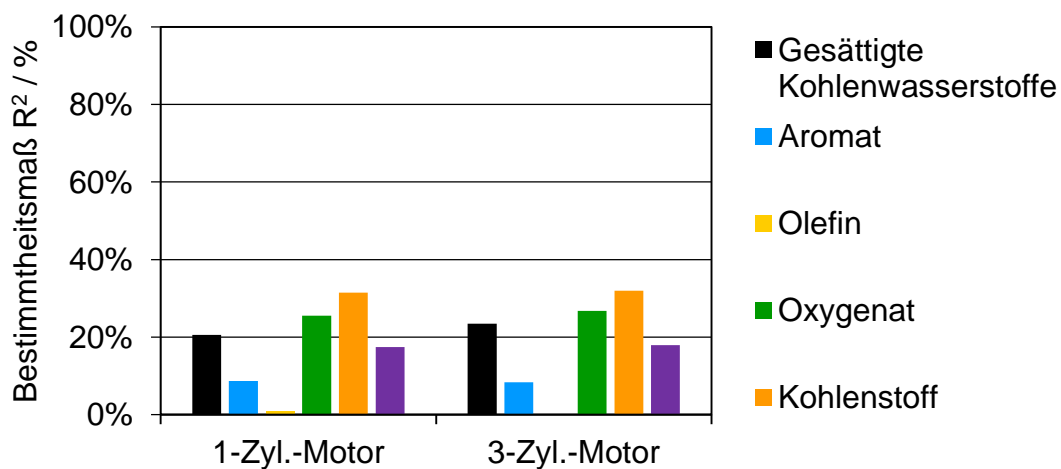


Abbildung 5-37. Bestimmtheitsmaße der Korrelation der Vorentflammungsneigung infolge einer kritischen Gasphase und elementaren Grundbestandteilen des Kraftstoffes.

Prüfverfahren auf dem CFR-Motor und Verfahren auf dem AFIDA haben sich demgegenüber als äußerst vielversprechend erwiesen. Zu beiden Verfahrensklassen folgt in diesem Kapitel eine genaue Analyse.

### CFR-basierte Verfahren

Um eine CFR-basierte Kennzahl zu entwickeln, welche die gasphaseninduzierte Vorentflammungsneigung eines Kraftstoffes einordnet, liegt es nahe die Ergebnisse der Messungen am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. am 3-Zylinder Serienaggregat mit den relevanten CFR-Kennzahlen, wie bereits in Kapitel 5.2.2, in Zusammenhang zu bringen.

Es ist zunächst von Interesse ob bestehende Kraftstoffkennzahlen (ROZ, MOZ) grundsätzlich in der Lage sind das Vorentflamungsverhalten zu beschreiben. Zu diesem Zweck ist in Abbildung 5-38 die ROZ der Kraftstoffe den Ergebnissen der Versuchsträger gegenübergestellt. Im Falle des Einzylinder-Forschungsmotors beinhaltet das Diagramm die gesamte Kraftstoffmatrix (Realkraftstoffe und CFD Surrogate). Beim Dreizylinder-Vollmotor ist die Kraftstoffauswahl um die CFD-Kraftstoffe sowie dem Kraftstoff KK31 (40 % mol. Ethanol) reduziert. Mit der Versuchsmethodik des Vollmotors war es aus schadenrelevanten Gründen nicht möglich den Kraftstoff KK31 zur Vorentflammung zu bringen.

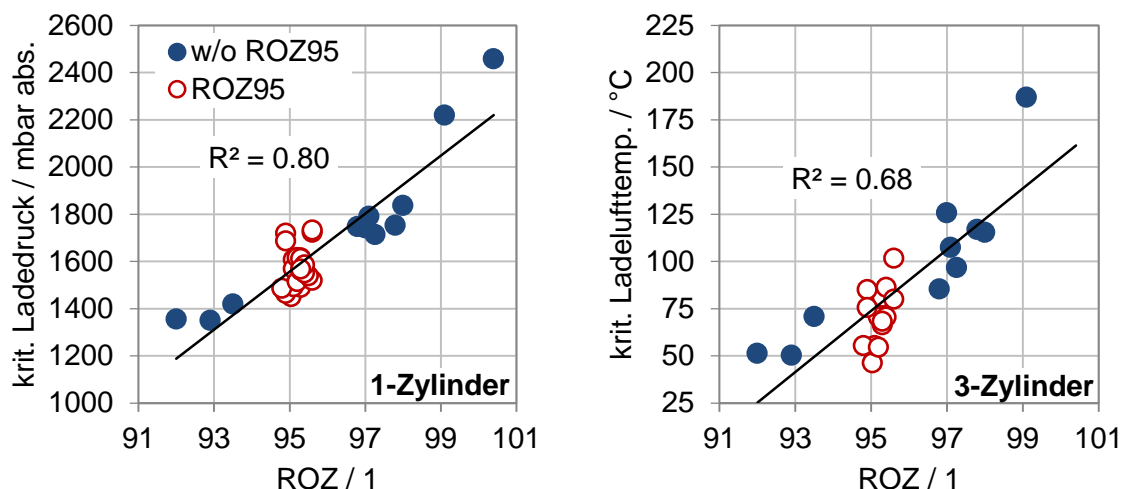


Abbildung 5-38. Korrelationsanalyse der am normgerechten CFR-Prüfmotor gemessenen ROZ und den Ergebnissen am 1-Zylinder- bzw. 3-Zylinder-Versuchsträger.

Es scheint zunächst durchaus einen Zusammenhang zwischen der ROZ und der Gasphasenzündung zu geben. Dies relativiert sich jedoch, wenn man ausschließlich jene Kraftstoffe mit einer ROZ von 95 betrachtet (rote Kreise). Es zeigt sich, dass innerhalb dieser Kraftstoffgruppe trotz ähnlicher bzw. gleicher ROZ signifikant unterschiedliches Vorentflamungsverhalten auftritt. Dementsprechend unterstreicht dieses Ergebnis das unzureichende prädiktive Potenzial der ROZ.

Die Korrelationsanalyse weiterer relevanter CFR-Kennzahlen, unter anderem der bereits in [16] entwickelten Methoden CPI und HSPI, zeigt Abbildung 5-39. Aus Gründen der Vergleichbarkeit basiert diese und die nachfolgenden Darstellungen der CPI auf einer reduzierten Kraftstoffmatrix von 24 Kraftstoffen. Hierin sind die CFD Kraftstoffe, welche nicht auf dem Vollmotor untersucht wurden sowie die Kraftstoffe KK03 (Basiskraftstoff, EN228, ROZ95 E0) bzw. KK31 (Splash Blend, 40 % mol. Ethanol) ausgenommen. Aufgrund der limitierten Kraftstoffmenge war es nicht möglich alle Untersuchungen an den Versuchsträgern mit KK03 durchzuführen.

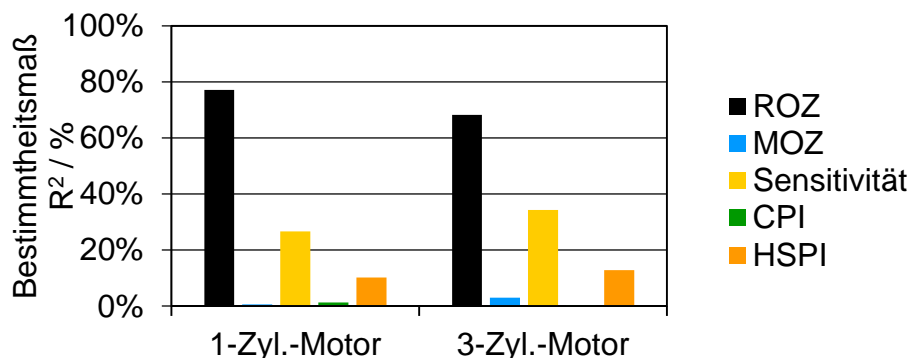


Abbildung 5-39. Bestimmtheitsmaße  $R^2$  einer linearen Korrelation zwischen 2 % Vorentflammungshäufigkeit am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. am Serienmotor und den relevanten Kraftstoffkennzahlen zu sehen.

Es ist festzuhalten, dass betreffend der reduzierten Kraftstoffauswahl weder die MOZ noch die Sensitivität Aufschluss über die Gasphasenzündung geben. Durchaus überraschend ist die Tatsache, dass die CPI keine Korrelation auf die am realen Motor gemessenen Vorentflammungstendenzen erkennen lässt, obwohl die CPI zu diesem Zweck in [16] entwickelt wurde.

Hinsichtlich der geringen Vergleichbarkeit zur HSPI ist dies weniger überraschend, da auf Basis der HSPI-Methodik die Selbstzündung infolge heißer Oberflächen bewertet werden soll.

Berücksichtigt man die Erkenntnisse aus Kapitel 5.1.1 bzgl. des Temperatureinflusses auf die Zündcharakteristik so ist anzunehmen, dass die fehlende Übereinstimmung der CPI möglicherweise in vom Realmotor abweichenden thermodynamischen Bedingungen des CFR-Motors begründet liegt.

Um diese Annahme zu bestätigen ist zunächst eine detailliertere Analyse der CPI Korrelation vorzunehmen. In Abbildung 5-40 ist zunächst bei Betrachtung aller dargestellten Kraftstoffe, wie bereits in Abbildung 5-39 aufgezeigt, keine Korrelation der Daten nachzuvollziehen. Lässt man jedoch die Gruppe jener Kraftstoffe mit einer ROZ von 95 (rot umrandet) aus der Korrelation aus, so ist bei beiden Versuchsträgern ein  $\text{adj. } R^2 > 60\%$  zu verzeichnen. Die Kraftstoffliste in Tabelle 1 zeigt, dass der Großteil der ROZ95 Kraftstoffe einen signifikanten

Anteil an n-Heptan bzw. Isooktan aufweisen. Entsprechend der RCM Analysen in Kapitel 5.1.1 haben paraffinhaltige Kraftstoffe wie etwa n-Heptan bzw. Isooktan ein ausgeprägtes NTC-Verhalten, wodurch es infolge unterschiedlicher Temperaturbedingungen zu signifikant unterschiedlichen Selbstzündungstendenzen der Kraftstoffe kommt, siehe Abbildung 5-2.

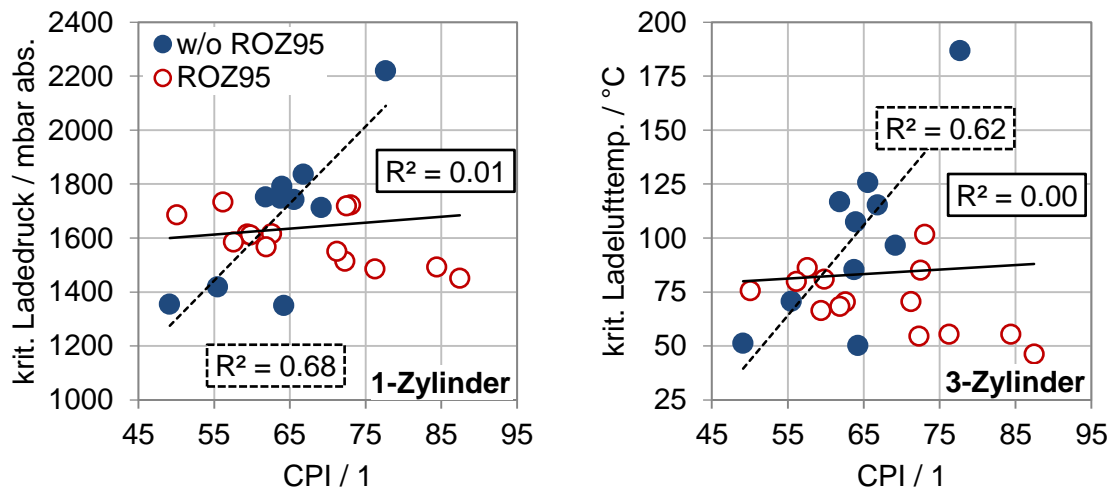


Abbildung 5-40. Korrelationsanalyse der am CFR-Prüfmotor gemessenen CPI und den Ergebnissen am 1-Zylinder- bzw. 3-Zylinder-Versuchsträger. Vergleich des adjustierten Bestimmtheitsmaßes  $R^2$  aller dargestellten Kraftstoffe und jenem ohne ROZ95 Kraftstoffe.

Auf Basis dieser Erkenntnisse und experimenteller und numerischen Daten ist davon auszugehen, dass bei den gewählten CPI Randbedingungen (Ansauglufttemperatur 200 °C) Temperaturregime ausschlaggebend sind, welche im realen Motorbetrieb nicht von Relevanz sind. Wie unterschiedlich die Temperaturbereiche im Einzylinder-Forschungsmotor und dem CFR-Aggregat ausgeprägt sind geht aus Abbildung 5-41 hervor. Da der Einzylinder-Motor ein modernes Brennverfahren widerspiegelt werden dessen Brennraumbedingungen exemplarische für moderne Motoren herangezogen. Für die qualitative Aussage ist dies ausreichend und auf eine zusätzliche Darstellung der Vollmotorbedingungen wird verzichtet.

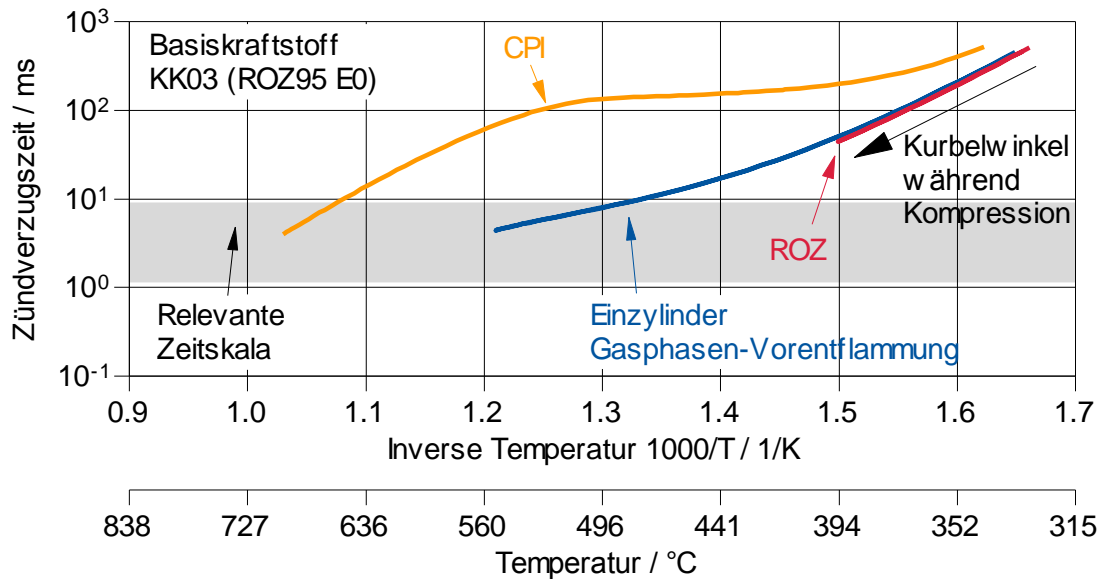


Abbildung 5-41. Simulierte Zündverzugszeiten unter den thermodynamischen Bedingungen des ROZ und CPI Messverfahrens im CFR-Prüfmotor und den Vorentflammungsexperimenten im Einzylinder-Forschungsmotor.

In Abbildung 5-41 sind Zündverzugszeiten abgebildet, welche nach der gleichen Vorgehensweise ermittelt wurden, wie schon anhand von Abbildung 5-26 erklärt wurde. Aus dieser Darstellung lässt sich ableiten, dass die Gasphase während der Kompression im CFR-Motor mit dem ROZ-Verfahren nicht in Zündverzugszeitbereiche vordringt, in welchen eine Selbstzündung entstehen könnte.

Erst die Ausbreitung einer fremdgezündeten Flamme führt im Brennraum zu Gasdrücken, welche die Zylinderladung zum Klopfen bringen. Dieser Bereich ist allerdings in Abbildung 5-41 nicht aufgenommen. Für das CPI-Verfahren gilt, dass aufgrund der hohen Ansauglufttemperatur von 200 °C und einem entsprechend hohen Kompressionsverhältnisses Zündverzugszeiten unterhalb von 10 ms herbeigeführt werden, woraus sich eine Kompressionszündung ergibt. Allerdings spielt sich diese Zündung aufgrund der fehlenden Aufladung im CFR-Motor erst bei hohen Temperaturen oberhalb von 600 °C ab. Im Vergleich der beiden Kurven des CPI- und ROZ-Verfahrens mit dem Zündverzugszeitschaubild des Einzylinder-Forschungsmotors, findet sich eine teilweise Übereinstimmung zwischen ROZ und Einzylinder-Aggregat, wohingegen keine Gemeinsamkeit zwischen CPI-Verfahren und Einzylinder-Motor zu erkennen ist.

Mit dem Ziel den Betriebsbereich des CFR-Prüfmotors modernen Bedingungen anzupassen und dadurch eine Verbesserung der Prognostizierbarkeit von Vorentflammungstendenzen zu erreichen, wurde eine externe Aufladung inkl. Ladeluftkühlung an dem CFR-Motor appliziert. Tabelle 11 zeigt die modifizierten Betriebsbedingungen.

Tabelle 11. Modifizierter Betriebsbereich des CPI-Prüfverfahrens.

Betriebsbereich	CPI	CPI modifiziert
Ansauglufttemperatur / °C	200	<b>30</b>
Ladedruck / mbar abs.	atmosphärisch	<b>1100</b>

Der Einfluss der geänderten CPI-Betriebsbedingungen soll anhand drei ausgewählter Kraftstoffe in Abbildung 5-42 erläutert werden.

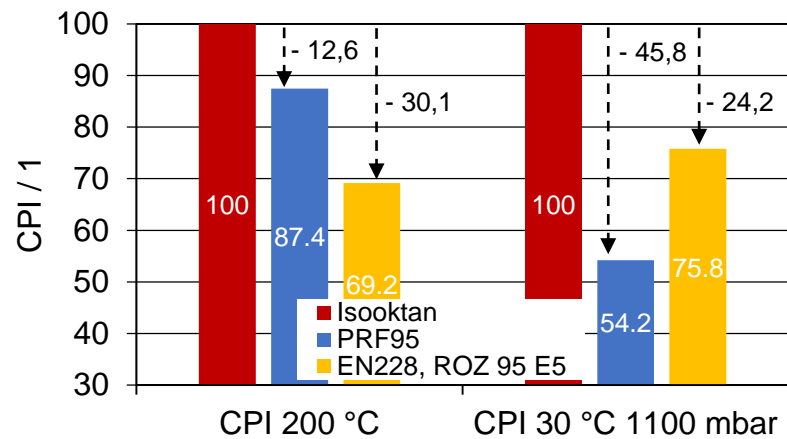
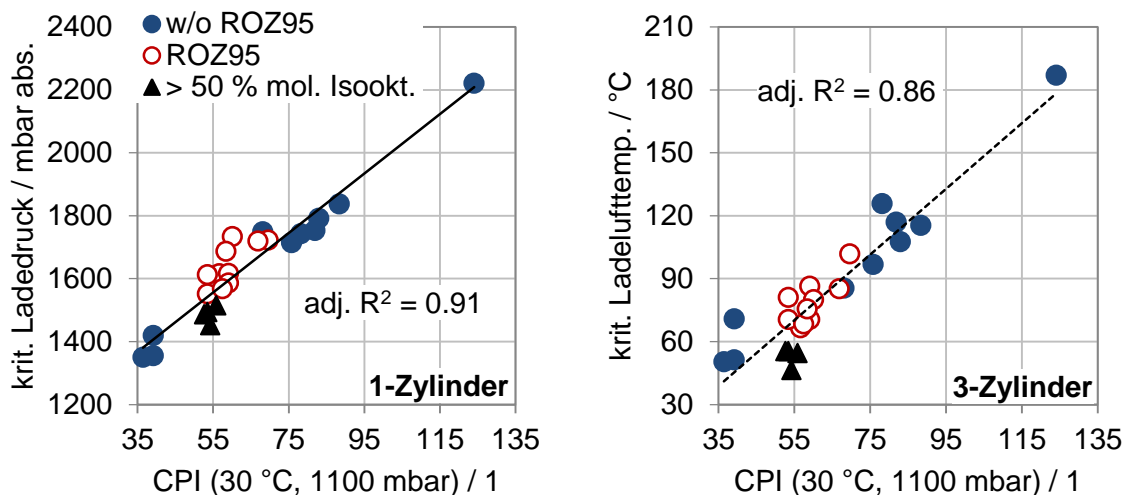


Abbildung 5-42. Vergleich der resultierenden CPI unter „normalen“ CPI-Bedingungen und modifiziertem CFR-Betrieb (inkl. Aufladung und Ladeluftkühlung).

Anhand dieser Darstellung ist eine signifikante Änderung der Selbstzündungstendenzen zu beobachten. PRF95 erfuhr bei modifizierten Bedingungen eine deutliche frühere Selbstzündung und somit geringere CPI als der EN228 E5 Tankstellenkraftstoff.



Dementsprechend hat die Zündreihenfolge der Kraftstoffe gewechselt und dem Tankstellenkraftstoff wird eine höhere Selbstzündungsresistenz als PRF95 zugerechnet. Inwiefern sich dies auf die restlichen Kraftstoffe auswirkt ist in Abbildung 5-43 zu sehen.

Mit einem adjustierten Bestimmtheitsmaß von 0.91 bzw. 0.86 über alle im Diagramm dargestellten Kraftstoffe zeigt sich eine signifikant hohe Übereinstimmung der Ergebnisse. Berücksichtigt man darüber hinaus ausschließlich jene Kraftstoffe mit einem marktrelevanten Isooktan-Anteil, indem diesem Fall  $< 50\%$  mol., so ist eine weitere Steigerung auf 0.93 bzw. 0.91 zu verzeichnen. Abschließend ist in Abbildung 5-44 die thermodynamische Randbedingung des modifizierten CPI-Prüfverfahrens dargestellt.

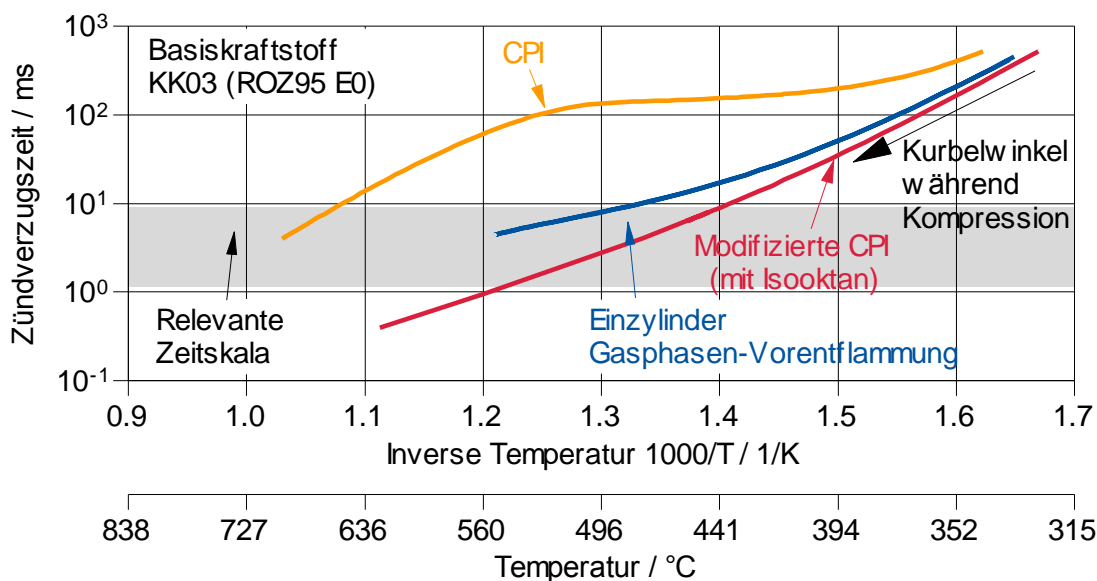


Abbildung 5-44. Simulierte Zündverzugszeiten unter den thermodynamischen Bedingungen des modifizierten CPI-Verfahrens im CFR-Prüfmotor und den Vorentflammungsexperimenten im Einzylinder-Forschungsmotor.

Durch die adaptierte Testbedingung ist es zu einer bemerkenswerten Annäherung an moderne Brennraumbedingungen gekommen. Dementsprechend laufen die Oxidationsprozesse in vergleichbaren Temperaturregimen ab und der Abgleich zu modernen Aggregaten ist gegeben.

An dieser Stelle sei angemerkt, dass zufolge der Vielzahl ein Einflussparameter und der Komplexität des Oberflächenzündprozess (siehe Kapitel 5.2.1) die Modifikation des HSPI-Verfahrens analog der Modifikation des CPI-Verfahrens zu keiner Verbesserung des Korrelationsgrades geführt hat.

Dementsprechend Bedarf es auf dem Gebiet der Glühzündung noch weiterer Forschung um ein prädiktives Verfahren zur kraftstoffspezifischen Glühzündungsbewertung zu entwickeln.



### 5.3.3 Korrelation mit dem AFIDA-Prüfverfahren

Analog der Korrelationsanalysen der CFR-Daten wird die Übertragbarkeit der Ergebnisse des AFIDA auf den seriennahen Einzylinder-Motor und den Dreizylinder-Serienmotor untersucht. Abbildung 5-45 zeigt hierzu die gemessenen Zündverzugszeiten in Korrelation mit den Ergebnissen aus der Einzylinder-Untersuchung und den Dreizylinder-Messungen.

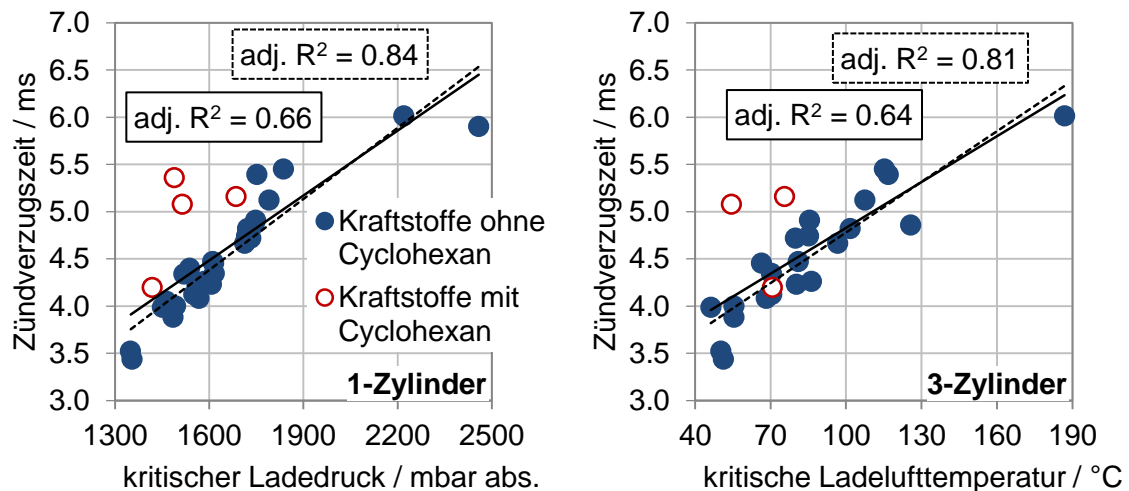


Abbildung 5-45. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (Brennkammerbedingung: 700 °C, 40 bar).

Anhand Abbildung 5-45 ist ein hohes Bestimmtheitsmaß betreffend jener Kraftstoffe ohne Cyclohexan-Komponente zu erkennen. So zeigt sich auf beiden Aggregaten ein Bestimmtheitsmaß  $> 0.8$ . Im Unterschied zu den zuvor gezeigten Daten beinhaltet die linke Analyse alle Kraftstoffe der Kraftstoffmatrix (ebenfalls 3-Komponenten-Kraftstoffe). Die Darstellung der Dreizylinder-Daten im rechten Diagramm umfasst hingegen die um die CFD Surrogate und KK31 (40 % mol. Ethanol Splash Blend) reduzierte Kraftstoffgruppe.

Anhand des Korrelationsgrades ist nachzuvollziehen, dass die vorhandenen Betriebsbedingungen (700 °C Brennkammerinnentemperatur, 40 bar Brennkammerdruck) in einem hohen Maße den Versuchsbedingungen moderner Motoren entsprechen. Lässt man zusätzlich Kraftstoffe mit einem Alkoholanteil  $\geq 40$  % mol. aus dieser Betrachtung aus, so ist Abbildung 5-46 ein Bestimmtheitsgrad  $> 0.90$  bzw. 0.78 zu verzeichnen.

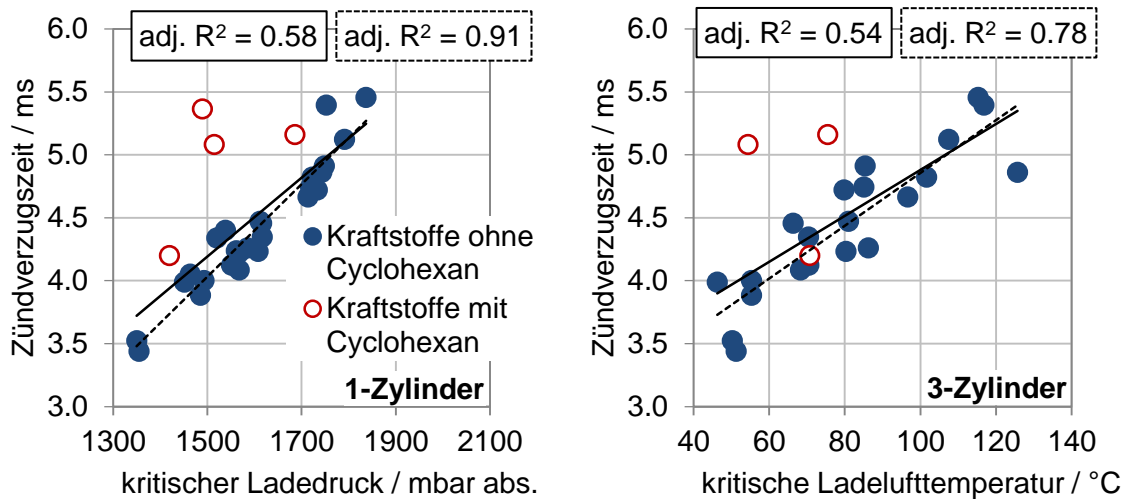


Abbildung 5-46. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (Brennkammerbedingung: 700 °C, 40 bar). Kraftstoffe > 40 % mol. Alkohol-Anteil sind in der Analyse ausgenommen.

Grundsätzlich zeigt sich bereits auf Basis dieser Ergebnisse, dass die Zündverzugszeiten im AFIDA eine potenzielle Methode zur Vorentflammungsbewertung bieten. Dennoch ist es auffällig, dass ausgerechnet Kraftstoffe mit Cyclohexan-Anteil im AFIDA deutlich vorentflammungsresistenter eingestuft werden, als die motorischen Untersuchungen offenlegen. Des Weiteren ist auffällig, dass dies mit Ausnahme eines Cyclohexan-Kraftstoffes gültig ist.

In Abbildung 5-47 sind die Cyclohexan-Kraftstoffe detaillierter aufgeschlüsselt. Darin ist zu sehen, dass es sich bei den stark von der Korrelation abweichenden Proben um KK07 und KK11 handelt. Beides sind Kraftstoffe mit einem relativ hohen Anteil an Isooktan (> 50 % mol.). Demgegenüber besteht KK28 als Splash Blend lediglich aus dem Basiskraftstoff KK03 und 20 % mol. Cyclohexan.

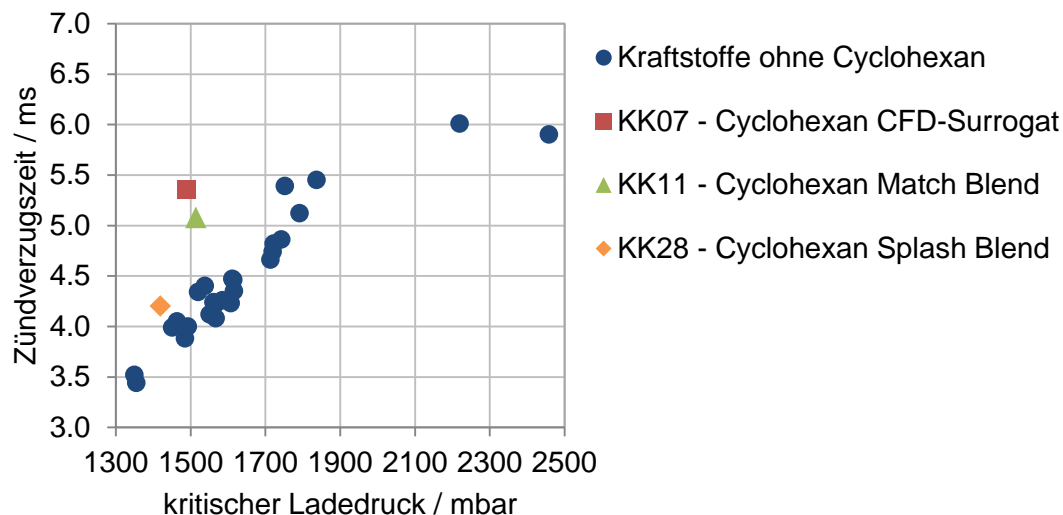


Abbildung 5-47. Korrelation des kritischen Ladedruckes aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (700 °C Brennkammerinnentemperatur, 40 bar Brennkammerdruck).

Der vergleichsweise lange Zündverzug von KK07 und KK11 (5.0 – 5.5 ms) gegenüber den restlichen Kraftstoffen mit einem kritischen Ladedruck um etwa 1500 mbar kann sich prinzipiell (Direkteinspritzung bei AFIDA) aus zwei Anteilen zusammensetzen: dem chemischen Zündverzug und dem physikalischen Zündverzug (siehe 4.2). Falls sich der physikalische Zündverzug bei diesen beiden Kraftstoffen signifikant von KK28 unterscheidet, könnte diese Differenz bereits im Siedeverhalten der Kraftstoffe zum Ausdruck kommen. Die Siedeverläufe dieser Kraftstoffe sind Abbildung 5-48 zu entnehmen.

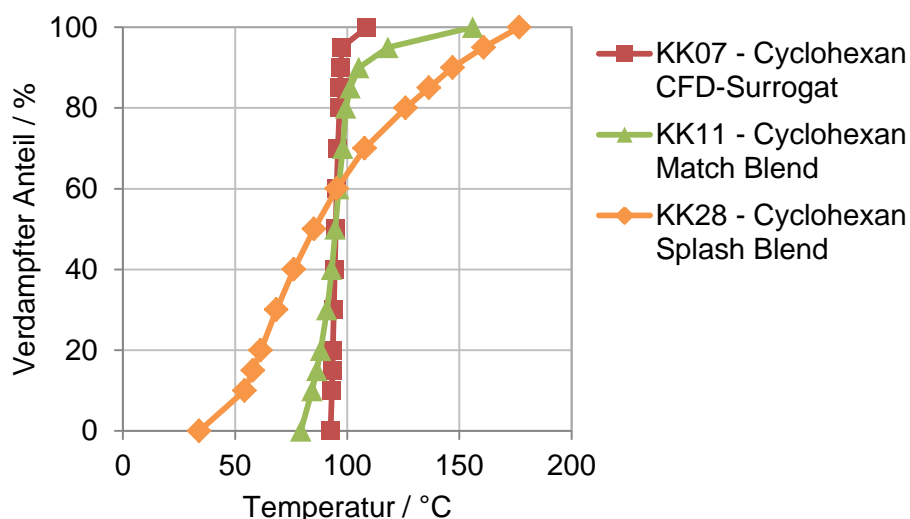


Abbildung 5-48. Bei Umgebungsdruck gemessene Siedeverläufe der Cyclohexan Kraftstoffe KK07, KK11 und KK28.

Anhand der Siedekurven ist ein deutlich unterschiedliches Siedeverhalten zu verzeichnen. KK07 und KK11 beginnen erst bei einer wesentlich höheren Temperatur zu verdampfen als

es bei KK28 der Fall ist. Die gesamte Verdampfung vollzieht sich allerdings bei diesen beiden Proben in einem deutlich kleineren Temperaturfenster. Dieses Verhalten ist kennzeichnend für Kraftstoffe, die nur aus einer geringen Komponentenanzahl zusammengesetzt sind. KK28 hingegen weist die typische Verdampfungscharakteristik eines komplex zusammengesetzten Kraftstoffes auf.

Basierend auf dieser Erkenntnis wurden AFIDA-Experimente mit Stickstoffatmosphäre durchgeführt, um die Unterschiede bzgl. der Gemischbildungszeit analysieren zu können. Dazu wurden die zu untersuchenden Kraftstoffe in die mit Stickstoff gefüllte Brennkammer des AFIDA eingespritzt. Anschließend wurde jene Zeitspanne analysiert, welche bis zum Erreichen des Druckminimums in der Brennkammer verstreicht. Das Ergebnis dieser Analyse ist in Abbildung 5-49 aufgeführt.

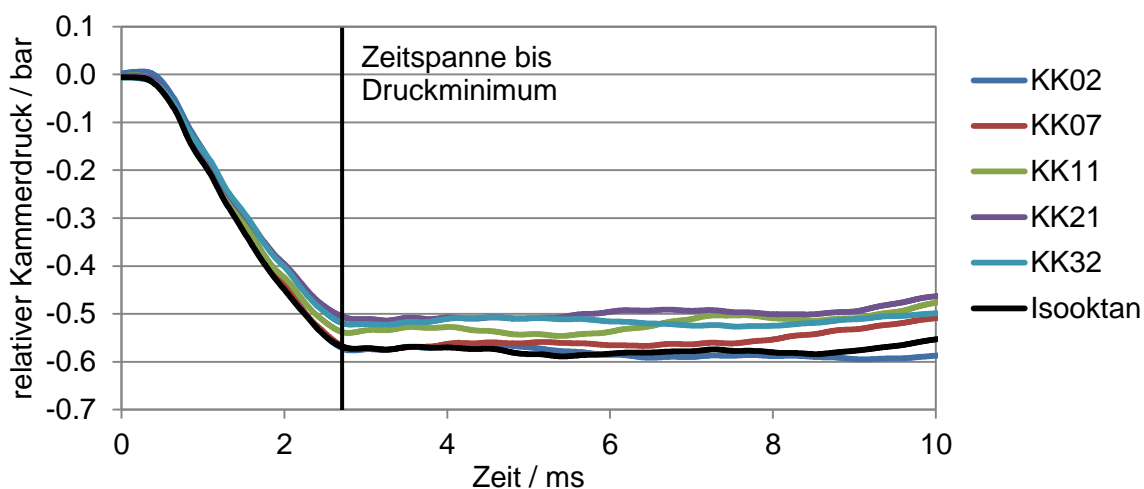


Abbildung 5-49. Relative Kammerdruckverläufe aus AFIDA-Experimenten mit verschiedenen Kraftstoffen in Stickstoffatmosphäre.

Die Abwesenheit von Sauerstoff erlaubt es, jeglichen Druckabfall innerhalb der Brennkammer nahezu ausschließlich auf die Verdampfungskühlung beim Übergang des flüssigen Kraftstoffes in die Gasphase zurückzuführen. Ohne dabei auf die einzelnen Kraftstoffe im Detail einzugehen, kann anhand von Abbildung 5-49 festgehalten werden, dass zumindest im Hinblick auf die Verdampfungsdauer der einzelnen Kraftstoffe keine Differenz erkennbar sind. Dennoch kann nicht ausgeschlossen werden, dass die Gemischbildung der einzelnen Kraftstoffe unterschiedlich abläuft, da diese nur zum Teil von der Verdampfung abhängt. Zu einem weiteren Teil hängt die Gemischbildungszeit davon ab, in welcher Zeit aus dem verdampften Kraftstoff lokal ein reaktionsfähiges Gemisch aus Sauerstoff und Kraftstoff durch Stofftransportprozesse entsteht. Daher wurden im Laufe dieser Arbeit Anstrengungen unternommen, etwaige Unterschiede in der Gemischbildungszeit durch unterschiedliche Versuchsrandbedingungen auszugleichen.

Diese Untersuchungen umfassten unter anderem die Aufheizung des flüssigen Kraftstoffes bevor dieser in die Kammer eingespritzt wird sowie eine Variation der Kammertemperatur

und des Kammerdruckes. Ersteres hat nur einen unwesentlichen Einfluss auf die Zündverzugszeit der Kraftstoffe ausgeübt. Eine Variation des Kammerdruckes- und der Kammertemperatur hingegen hatte signifikante Auswirkungen auf die Zündverzugszeiten der Kraftstoffe, wie in Abbildung 5-50 zu sehen ist. Wie bereits zuvor erwähnt, konnten aufgrund der limitierten Kraftstoffmengen nicht alle Untersuchungen mit der gesamten Kraftstoffauswahl durchgeführt werden. Dementsprechend wurde KK12 (20 % mol. Ethanol CFD Surrogat) und KK31 (40 % mol. Ethanol Splash Blend) im Falle der AFIDA Tests bei 650 °C und 50 bar nicht bewertet. Die folgende Darstellung beinhaltet ausschließlich Kraftstoffe welche mit beiden Methoden gemessen wurden.

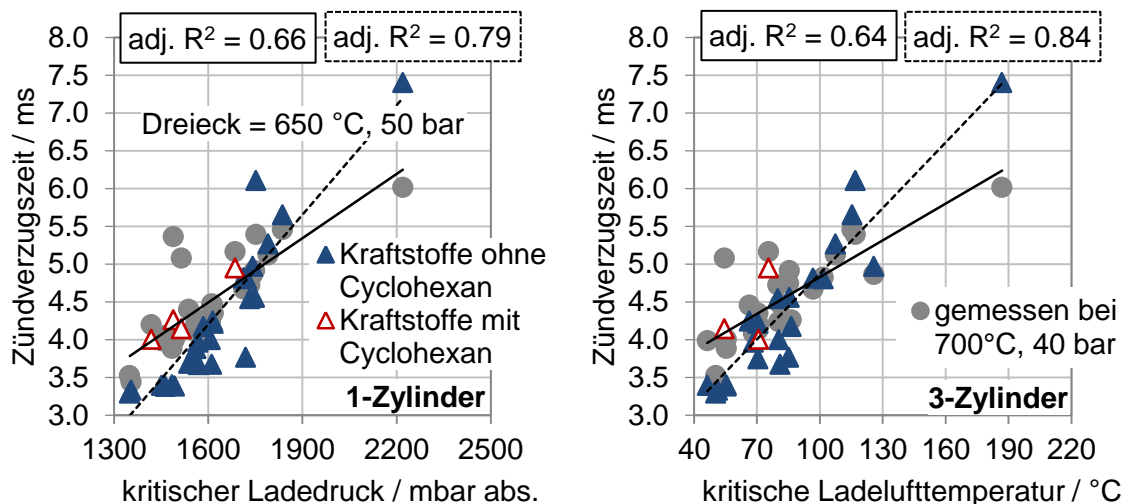


Abbildung 5-50. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA bei unterschiedlichen Betriebsbedingungen (650 °C, 50 bar gegenüber 700 °C, 40 bar).

Zündverzugszeiten bei 650 °C und 50 bar Kammerbedingungen sind als Dreiecke zu sehen. Um einen Vergleich mit den Ergebnissen bei 700 °C und 40 bar Kammerdruck anstellen zu können sind die bei diesen Bedingungen ermittelten Zündverzugszeiten als Kreise dargestellt. Infolge der abweichenden Anfangsbedingungen hat sich die Anordnung der Kraftstoffe innerhalb der Punktwolke geändert. Kraftstoffe mit Cyclohexan bewegen sich zwar in Richtung der Korrelationsgeraden und werden dementsprechend „korrekter“ bewertet, allerdings fallen nun andere Kraftstoffe aus der Korrelation. Insgesamt ist anhand der Bestimmtheitsmaße  $R^2$  eine geringfügige Verbesserung infolge geänderter Betriebsbedingungen zu sehen. Ein weiterer Versuch, die Vorhersagegenauigkeit der Zündverzugszeiten im AFIDA zu erhöhen ist eine alternative Definition der Zündverzugszeit (IDT2), wie in Kapitel 5.1.1 beschrieben. Nach aktuellem Stand ist die Zündverzugszeit im AFIDA als Zeitdauer vom Beginn der Injektoransteuerung bis zum Überschreiten einer Druckschwelle in der Brennkammer definiert. Um den Einfluss der Gemischbildung in gewissem Maße aus der Kraftstoffbewertung auszunehmen, wird in diesem Fall die Zündverzugszeit ab dem Zeitpunkt des Druckmini-

mums in der Brennkammer herangezogen. Das Ergebnis dieser alternativen Auswertemethodik wird in Abbildung 5-51 gezeigt. Die Kraftstoffauswahl umfasst lediglich jene Proben, welche beide Methoden abdecken. Im Vergleich zu Abbildung 5-50 ist zusätzlich KK28 (20 % mol. Cyclohexan Splash Blend) bei den Ergebnissen des Einzylinder- bzw. Dreizylinder-Motors nicht enthalten.

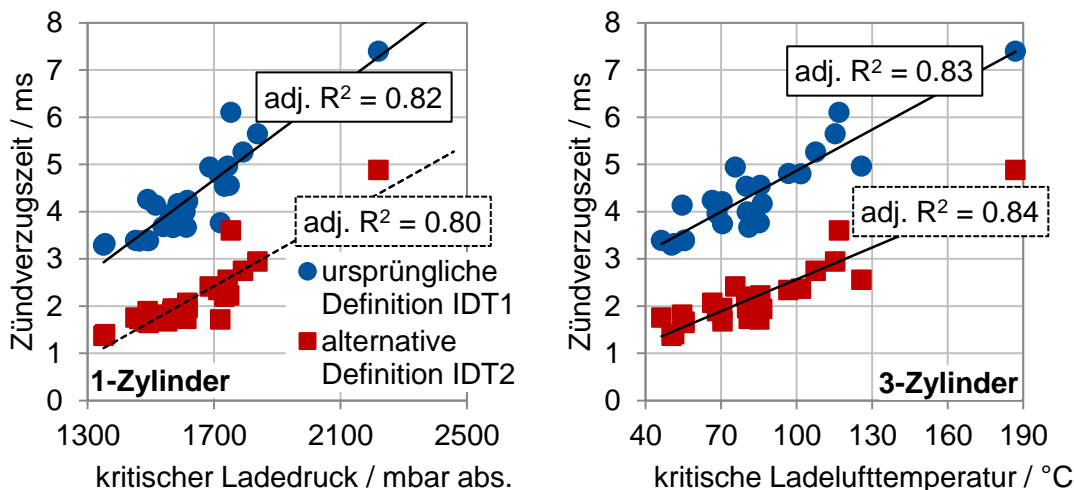


Abbildung 5-51. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (650 °C Brennkammerinnentemperatur, 50 bar Brennkammerdruck) bzw. den alternativen Zündverzugszeiten des AFIDA (IDT2).

Im Wesentlichen bewirkt die alternative Definition der Zündverzugszeit eine Verschiebung der Datenwolke in Richtung kleinerer Zündverzugszeiten. Auch hier bestätigt sich die Beobachtung aus Abbildung 5-49, dass alle Kraftstoffe in einer sehr ähnlichen Zeitspanne verdampfen. Die Abfolge der Kraftstoffe nach Zündverzugszeiten ändert sich nicht und eine signifikante Verbesserung der Korrelationsgüte lässt sich nicht beobachten. Die betrachtete Korrelation wird im Fall des Einzylinder-Forschungsmotors sogar schlechter. Somit ist diese Variante als nicht zielführend einzuordnen.

Ein weiterer Ansatz, mit welchem die Vorhersagegenauigkeit des AFIDA verbessert werden sollte, war eine alternative Prüfmethdik. Der Grundgedanke dieser war, das Messverfahren näher an die Methodik aus den motorischen Untersuchungen heranzuführen. In den motorischen Untersuchungen wurde der Druck bzw. die Temperatur im Saugrohr variiert um Vor-entflammungen zu provozieren. Da die Motordrehzahl zwischen den Experimenten konstant blieb, hatte das Luft-Kraftstoff-Gemisch stets die gleiche Zeitspanne zur Selbstzündung. Diese erstreckte sich von etwa 30° KW v.OT bis zum regulären Zündzeitpunkt und war für jeden Kraftstoff vereinfacht ausgedrückt gleich groß. Im AFIDA variierte die kraftstoffspezifische Zündverzugszeit bei ansonsten gleicher Temperatur und gleichem Druck, wobei diese Aussage auch nur in Grenzen gültig ist, da die Verdampfungskühlung der einzelnen Kraftstoffe

unterschiedlich ausfällt. Die alternative Vorgehensweise war nun den Kammerdruck und die Kammertemperatur des AFIDA kraftstoffspezifisch anzupassen, um eine kraftstoffübergreifend konstante Zündverzugszeit zu erzielen. Der dazu notwendige Kammerdruck sowie die Temperatur dienten in diesem Fall als Korrelationsgröße zu den motorischen Ergebnissen. Die Analyse wurde mit einer reduzierten Kraftstoffauswahl stichprobenartig durchgeführt. Die Kraftstoffe und die entsprechenden Kammerdrücke und Kammertemperaturen sind in Abbildung 5-52 aufgeführt.

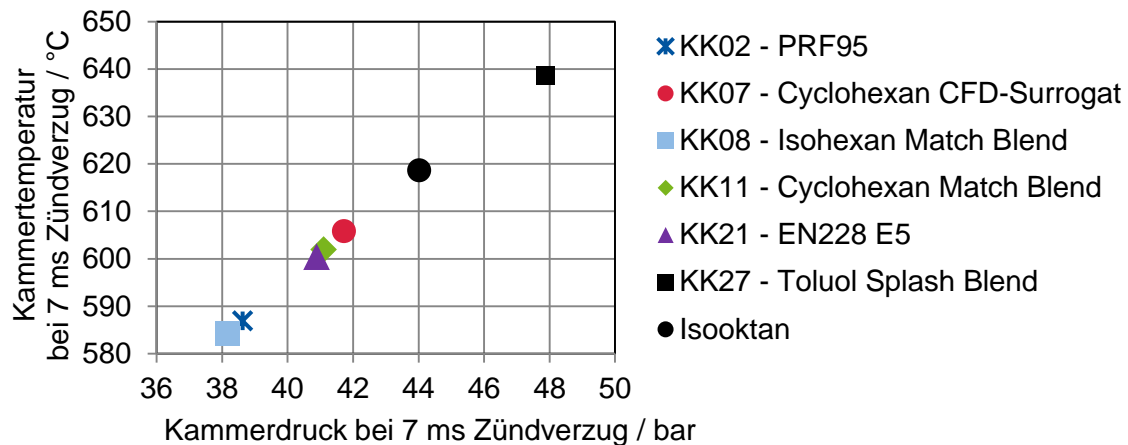


Abbildung 5-52. Kammerdrücke und Kammertemperaturen für die AFIDA-Experimente bei konstantem Zündverzug von 7 ms.

Eine Zündverzugszeit von 7 ms wurde definiert. Dies entspricht bei einer Motordrehzahl von 1500 1/min einem Kurbelwinkelfenster von 63° KW und bildet damit die Zeitspanne der chemischen Reaktionen in den motorischen Untersuchungen näherungsweise ab. Die Korrelationen, welche aus diesen Untersuchungen hervorgehen, sind in Abbildung 5-53 dargestellt. Die Analyse umfasst lediglich eine ausgewählte Kraftstoffgruppe von 6 (Einzyylinder-Aggregat: KK02, 07, 08, 11, 21, 27) bzw. 5 (Dreizylinder-Motor: KK02, 08, 11, 21, 27) Proben um das Potenzial dieser Auswertemethodik zu prüfen.

- Zündverzugszeit im AFIDA bei konstanten Bedingungen (650 °C, 50 bar)
- Kammerdruck bei 7ms Zündverzugszeit im AFIDA

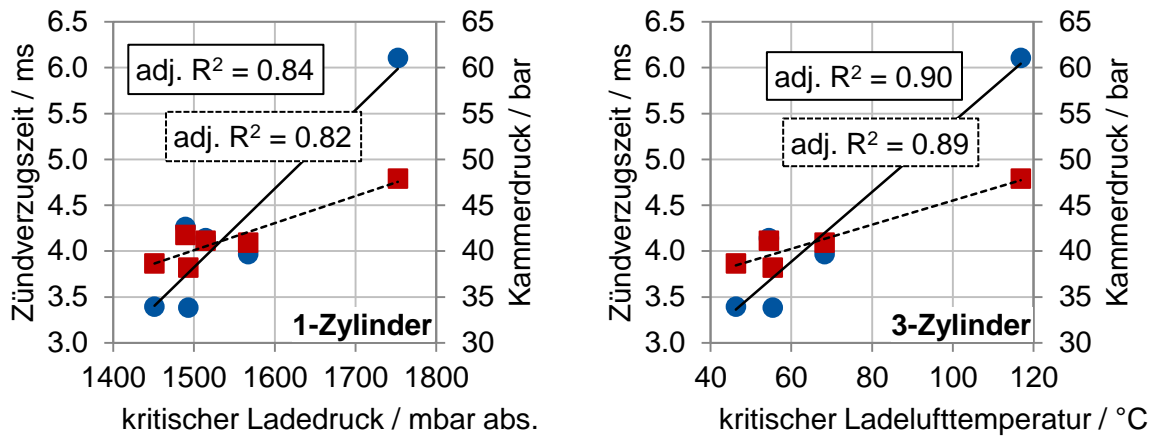


Abbildung 5-53. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (650 °C Brennkammerinnentemperatur, 50 bar Brennkammerdruck) bzw. den AFIDA-Bedingungen zur Einstellung einer Zündverzugszeit von 7 ms.

Das Ergebnis dieses Vergleiches ist, dass diese Vorgehensweise nicht signifikant die Vorhersagegenauigkeit des AFIDA hinsichtlich der Vorentflammungsneigung eines Kraftstoffes verbessert. In Anbetracht dieser Tatsache sowie dem Analyseaufwand zur Ermittlung individueller Brennkammerbedingungen zur Darstellung konstanter Zündverzugszeiten, ist dieser Ansatz zur Optimierung der AFIDA Prüfmethode auszuschließen.

#### 5.4 Analyse einer Vorentflammungsbewertung auf Basis der Stoffzusammensetzung

Im folgenden Kapitel wird die Möglichkeit einer Berechnungsmethodik zur Vorentflammungsbewertung auf Basis der kraftstoffspezifischen Stoffzusammensetzung diskutiert.

Wie bereits im Kapitel zur Oberflächenzündung (5.2.2) bzw. Gasphasenzündung (5.3.2) gezeigt, ist eine simple Korrelation der einzelnen Stoffgruppen (Paraffin, Olefin, etc.) mit dem Vorentflammungsverhalten der Kraftstoffe nicht zielführend. Dementsprechend wird nun eine detaillierte Analyse der Kraftstoffzusammensetzung vorgenommen.

In der praktischen Anwendung von Ottokraftstoffen wird dessen molekulare Zusammensetzung selten detailliert bestimmt. Unter vertretbarem Aufwand ist jedoch mittels gaschromatographischer Kraftstoffanalysen (GC-Analyse) eine Aufschlüsselung der Kohlenwasserstoffe nach den Anteilen einzelner Kohlenwasserstoffgruppen, wie Paraffinen, Olefinen, Alkoholen etc. möglich. Solch eine Analyse, auch PIONA genannt, bietet zudem die Möglichkeit innerhalb der Kohlenwasserstoffgruppe, z.B. den Paraffinen, den prozentualen Anteil von Molekü-



len spezifischer Kohlenstoffatomanzahl anzugeben. So hat man zum Beispiel die Information des Paraffin-Anteils im Kraftstoff mit einer Molekülgröße von 7 Kohlenstoffatomen.

Zunächst ist in Abbildung 5-54 beispielhaft die Gegenüberstellung zweier EN228 Kraftstoffe (KK01 und KK20) zu sehen. Die Analyse beschränkt sich in dieser Darstellung lediglich auf den Anteil der Kohlenwasserstoffgruppen. In der Stoffgruppe der gesättigten Kohlenwasserstoffe sind zusätzlich die Naphthene enthalten. Diese sind im Fall beider Proben zu ca. 5 % vol. beigemischt.

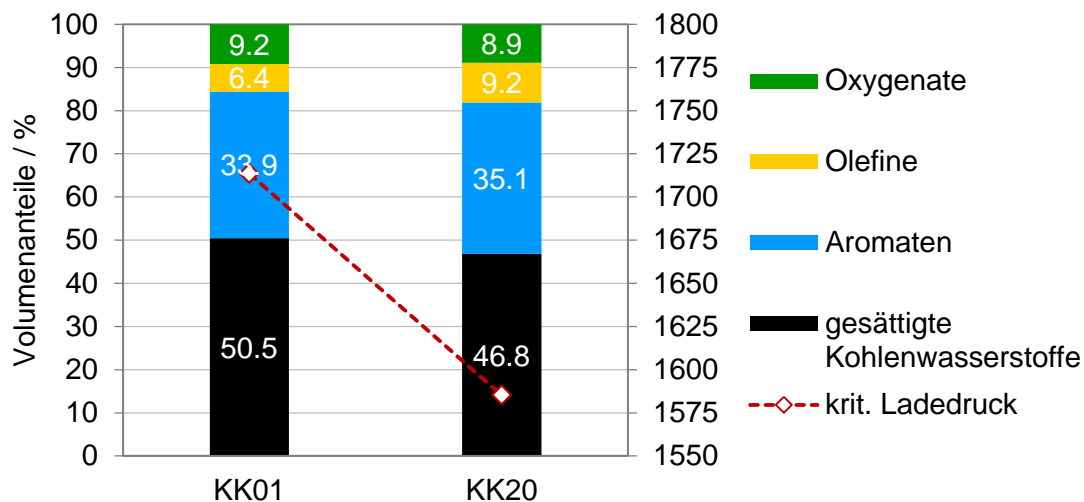


Abbildung 5-54. Vergleich der Kraftstoffzusammensetzung (Stoffgruppen) von KK01 (Referenzkraftstoff) und KK20 (max. Aromaten-Anteil nach EN228) sowie deren Auswirkung auf den kritischen Ladedruck (1-Zylinder Gasphasenzündungsexperiment).

Die Kraftstoffe lassen nur geringfügige Abweichungen der volumetrischen Zusammensetzung erkennen, weisen aber deutliche Unterschiede im Vorentflammungsverhalten am Einzylinder-Forschungsmotor (kritischer Ladedruck) auf. Weshalb an dieser Stelle ein Berechnungsansatz welcher die Komponentenanteile gewichtet und in eine entsprechende Kennzahl überführt nicht zielführend ist zeigen die folgenden Diagramme.

In Abbildung 5-55 werden die Differenzanteile einzelner Moleküle gleicher Kohlenstoffatomanzahl und Stoffgruppe im direkten Vergleich der beiden Kraftstoffe KK01 und KK20 übersichtlich aufgezeichnet. Als Referenz dient KK01. Der in diesem Diagramm dargestellte Detailgrad spiegelt den maximalen Informationsgehalt einer vertretbaren PIONA-Analyse wider.

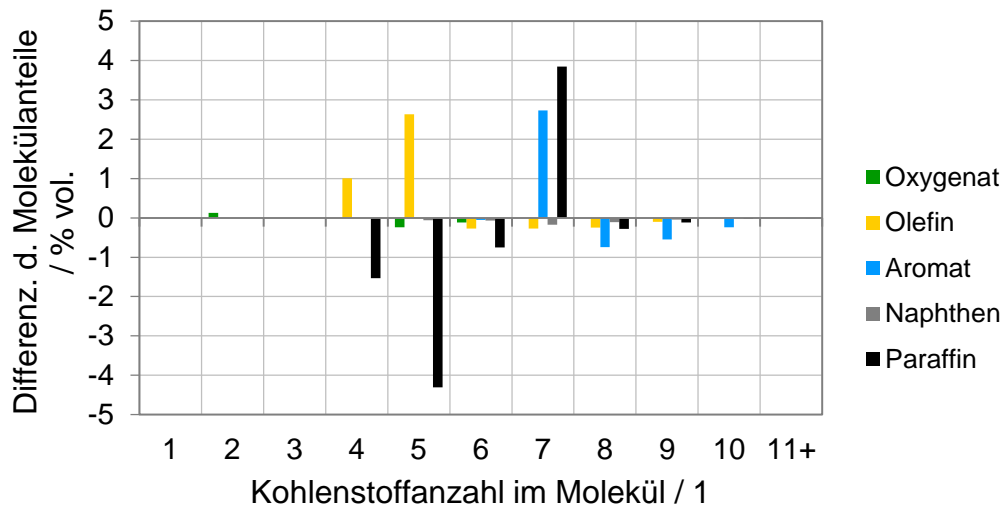


Abbildung 5-55. Vergleich der Kraftstoffe KK01 und KK20 auf Basis einer detaillierten GC-Analyse. Referenzkraftstoff ist KK01. Beispiel: KK20 hat um etwa 4 % vol. mehr Paraffine mit 5 Kohlenstoffatomen.

Es ist zu erkennen, dass innerhalb der Paraffine KK20 im Vergleich zu KK01 einen zusätzlichen C7-Molekülanteil (7 Kohlenstoffatomen) von etwa 4 % vol. aufweist. Demgegenüber hat KK01 jedoch vermehrt kurzkettige Paraffine (C4-C6). In Kapitel 2 wurde bereits erläutert, dass die unterschiedliche Kettenlänge zu deutlichen Unterschieden in der Zündcharakteristik führt. Dies lässt den Schluss zu, dass eine Berechnungsmethodik lediglich auf Basis des Stoffgruppen-Anteils (Paraffin-Gehalt) nicht ausreichend ist und die Information über die Molekülstruktur notwendig ist. Weshalb ebenfalls eine detaillierte PIONA, gemäß Abbildung 5-55, nicht hinreichend ist, wird anhand Abbildung 5-56 deutlich.

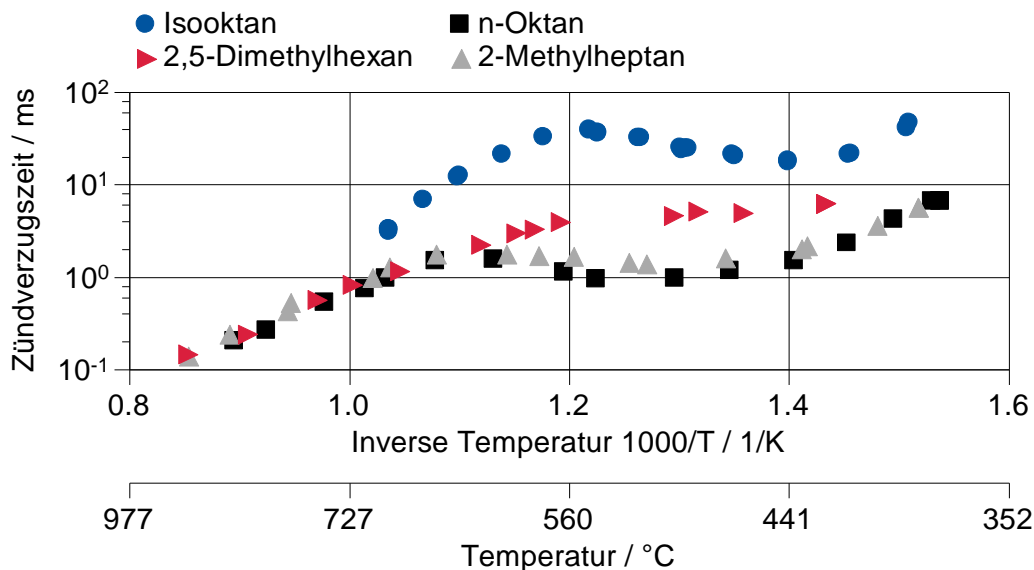


Abbildung 5-56. Zündverzugszeiten vier verschiedener Isomere des C8-Paraffins. Die Daten sind entnommen aus [23, 125, 122].

Aus der Literatur ist bereits bekannt, dass Moleküle gleicher Stoffgruppe, je nach dessen chemischer Struktur, unterschiedliches Zündverhalten aufweisen können [124, 43, 41]. Dies umfasst ebenso Moleküle gleicher Stoffgruppe und Kettenlänge wie anschaulich aus Abbildung 5-56 hervorgeht.

In dieser Darstellung sind Zündverzugszeiten aus der Literatur für vier verschiedene Isomere des C8-Paraffins enthalten. Es ist zu erkennen, dass die Zündverzugszeiten trotz gleicher Kohlenstoff-/Wasserstoffatomanzahl erhebliche Unterschiede aufweisen.

Trotz einer signifikant unterschiedlichen Reaktivität fallen diese vier Kohlenwasserstoffe in der PIONA in dieselbe Komponentenategorie. Da das Vorentflammungsverhalten eines Kraftstoffes jedoch maßgebend von dessen chemischer Reaktivität abhängig ist wäre eine detailliertere Betrachtung der einzelnen Isomere eines Moleküls notwendig um einen belastbaren Zusammenhang zwischen der Vorentflammung und der Stoffzusammensetzung nachweisen zu können. An diesem Punkt ist der vertretbare Aufwand für eine industriell einsetzbare GC-Analysemethodik überschritten. Des Weiteren würde diese Tatsache eine enorme Informationsbasis notwendig machen, wodurch die industrielle Akzeptanz zusätzlich in Frage zu stellen ist.



## 6 Zusammenfassung und Schlussfolgerungen

Mit dem Fokus der stetigen CO<sub>2</sub>-Reduktion von Verbrennungsmotoren spielt heutzutage, neben den motorischen Maßnahmen wie etwa Downsizing und Aufladung, zunehmend der Kraftstoff eine wesentliche Rolle in der Entwicklung.

Alternative Kraftstoffe auf biogener Basis wie etwa Ethanol bzw. ETBE bieten hierbei ein signifikantes Potenzial zur Treibhausgasreduktion, sofern diese durch regenerative Herstellungsprozesse gewonnen werden. Infolge der gesteigerten Downsizing-Grade sowie moderner Kraftstoffe hohen biogenen Anteiles kommt es jedoch zu neuen Herausforderungen durch das Auftreten von Verbrennungsanomalien.

Der Kraftstoffeinfluss auf die Vorentflammung, einem abnormalen Verbrennungsphänomen mit signifikant hohem Schädigungspotenzial für Ottomotoren, ist in diesem Zusammenhang durch kein industriell einsetzbares Verfahren einzustufen. Untersuchungen in dieser Arbeit bestätigen unter anderem, dass die bestehenden, genormten Kraftstoffkennzahlen Research-Oktananzahl (ROZ) und Motor-Oktananzahl (MOZ) das Vorentflammungsverhalten von Kraftstoffen nicht abdecken.

Ziel dieser Arbeit war dementsprechend die Entwicklung eines Testverfahrens bzw. einer Kennzahl, welche eine Vorhersage der kraftstoffspezifischen Vorentflammungscharakteristik erlaubt. Im Fokus standen dabei zwei Arten der Vorentflammung: Die Vorentflammung aus thermodynamisch kritischen Zuständen in der Gasphase, kurz Gasphasenvorentflammung, und die Vorentflammung infolge einer Zündung an einer heißen Oberfläche, kurz oberflächeninduzierte Vorentflammung oder Glühzündung. Um das Potenzial möglicher Prüfmethode zu unterstreichen bzw. zur Validierung wurde eine umfassende Kraftstoffmatrix von mehr als 30 Kraftstoffen herangezogen.

Grundlegende numerische und experimentelle Untersuchungen zum chemischen und physikalischen Zündverzög dieser Kraftstoffe lassen dabei folgende Schlussfolgerungen zu:

- Chemische Zündverzugszeiten der Kraftstoffe unterscheiden sich im Nieder- Intermediär- und Hochtemperaturbereich deutlich.
- Speziell Kraftstoffe mit ausgeprägter NTC-Charakteristik (Paraffine) zeigen signifikante Auswirkung auf deren Selbstzündungstendenzen infolge unterschiedlicher Betriebsbedingungen.
  - Beispielweise haben Kraftstoffe mit hohem Ethanol oder Methanol-Gehalt lange Zündverzugszeiten bei niedrigen Temperaturen, aber relative kurze Zündverzugszeiten im Hochtemperaturbereich.
- Sogenannte CFD-Surrogate, bestehend aus maximal 4 verschiedenen Kohlenwasserstoffen, weisen eine deutlich andere Zündverzugszeitcharakteristik auf als korrespondierende Realkraftstoffe bestehend aus einer Vielzahl an Kohlenwasserstoffen.

- Der physikalische Zündverzug ist besonders im Niedertemperaturbereich erheblich länger als der chemische Zündverzug.
- Der Umfang des physikalischen Zündverzuges ist nur teilweise auf die Zeitdauer zurückzuführen, welche zur Verdampfung des flüssigen Kraftstoffes benötigt wird.

Aus numerischen und experimentellen motorischen Untersuchungen zur Glühzündung im Einzylinder-Forschungsmotor lässt sich festhalten:

- CFD-Surrogate sind teilweise erheblich empfindlicher als korrespondierende Realkraftstoffe.
- Die Unterschiede sind umso größer, je deutlicher eine sogenannte Vorwärmefreisetzung in Nähe des oberen Totpunktes verzeichnet wird.
- Diese Vorwärmefreisetzung entstammt der exothermen Wärmebilanz der Vorreaktionen im Luft-Kraftstoff-Gemisch während der ersten Stufe einer zweistufigen Zündung von NTC-behafteten Kraftstoffen.
- Generell führt eine Zugabe kleiner Mengen an n-Heptan von etwa 3-5 % vol. bereits zu einer deutlichen Abnahme der Glühzündungsresistenz.
- Oberflächeninduzierte Zündung ist grundsätzlich stark vom Strömungszustand an der heißen Oberfläche abhängig.
- Für einzelne Kraftstoffe ist in Abhängigkeit des Strömungszustandes sogar ein unterschiedliches Ranking untereinander zunächst nicht auszuschließen.

Experimentelle motorische Untersuchungen zur Gasphasenvorentflammung im Einzylinder-Forschungsmotor und im Dreizylinder-Serienaggregat führen zu folgenden Erkenntnissen:

- Die in beiden Versuchsträgern gemessenen Vorentflammungssensitivitäten der Kraftstoffe korrelieren mit einem Bestimmtheitsmaß von 84 %
  - Diese hohe Korrelationsgüte zeigt, dass unterschiedliche Versuchsträger letztlich zu vergleichbaren Aussagen hinsichtlich der Vorentflammungstendenzen kommen, womit bestätigt wird, dass das Auftreten von Gasphasenvorentflammungen deutlich vom Kraftstoff geprägt ist.
- Die Vorentflammungscharakteristik in modernen Motoren kann großteils anhand der gemessenen chemischen Zündverzugszeiten bei niedrigen bis mittleren Temperaturen nachvollzogen werden.

Weiterhin gibt Tabelle 12 eine Übersicht der Komponenteneinflüsse auf die Vorentflammungsneigung im Einzylinder-Forschungsmotor. Als Referenzkraftstoff wurde dabei der Basiskraftstoff KK03 gewählt. Eine detaillierte Erklärung des Bewertungsschemas findet sich in den Erläuterungen zu Tabelle 9 und Tabelle 10.

Tabelle 12. Übersicht des Einflusses verschiedener Kraftstoffkomponenten auf die Vorentflammungsneigung im modernen Serienaggregat.

	Komponente	Oberflächeninduzierte Vorentflammung	Gasphasen-Vorentflammung
Paraffin	Isohexan	--	--
	Isooktan	Nicht vorh.	+
Naphthen	Cyclohexan	--	-
Olefin	n-Hexen	--	--
Aromat	Toluol	o	+
Oxygenat	Ethanol	o	++
	Methanol	o	++
	ETBE	o	o

Hinsichtlich der Entwicklung einer Kennzahl lassen sich folgende Aussagen treffen:

- Die Berechnung einer Vorentflammungskennzahl anhand einer PIONA Analyse ist zufolge des limitierten Informationsgehaltes bzgl. einzelner Isomere eines Moleküls nicht möglich.
- Das Phänomen der Glühzündung lässt sich im Rahmen dieser Arbeit nicht mittels einer charakteristischen Kennzahl beschreiben.
- Es ist gelungen qualitativ Glühzündungscharakteristiken einzelner Kraftstoffe in 3D-CFD Simulationen abzubilden:
  - Daher müssen die dort angewandten Stoff-, Strömungs- und Reaktionsmodelle die Gesetzmäßigkeiten zur Beschreibung der Glühzündung abbilden.
  - Allerdings lassen sich diese komplexen Zusammenhänge nicht ohne tiefergreifende Untersuchungen in einer einzigen Kennzahl vereinigen.
- Zur Beschreibung der Gasphasenvorentflammungsneigung eines Kraftstoffes stehen zwei potenzielle Verfahren zur Verfügung:
  - Ein CFR-Verfahren auf Basis eines aufgeladenen CFR-Motors mit Direkteinspritzung und Ladeluftkühlung
    - Einzylinder-Forschungsmotor: adj.  $R^2 = 91 \%$
    - Dreizylinder-Serienmotor: adj.  $R^2 = 86 \%$
  - Ein AFIDA-Verfahren, auf Basis einer bei konstantem Kammervolumen gemessener Zündverzugszeit.
    - Einzylinder-Forschungsmotor: adj.  $R^2 = 79 \%$  (650 °C, 50 bar)
    - Dreizylinder-Serienmotor: adj.  $R^2 = 83 \%$  (650 °C, 50 bar)

## 7 Anhang

### 7.1 Literaturverzeichnis

- [1] S. Pischinger, Antriebsentwicklung der Zukunft, ATZextra 16 (2011) 136–141.
- [2] Richtlinie 2003/30/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 8. Mai 2003 zur Förderung der Verwendung von Biokraftstoffen oder anderen erneuerbaren Kraftstoffen im Verkehrssektor.
- [3] A. B. Mansfield, E. Chapman, K. Briscoe, Impact of Fuel Octane Rating and Aromatic Content on Stochastic Pre-Ignition, SAE Technical Paper 2016-01-0721 (2016).
- [4] G. T. Kalghatgi, Fuel Anti-Knock Quality - Part I. Engine Studies, SAE Technical Paper 2001-01-3584 (2001).
- [5] G. T. Kalghatgi, Fuel Anti-Knock Quality- Part II. Vehicle Studies - How Relevant is Motor Octane Number (MON) in Modern Engines?, SAE Technical Paper 2001-01-3585 (2001).
- [6] C. Dahnz, K.-M. Han, U. Spicher, M. Magar, R. Schiessl, U. Maas, Investigations on Pre-Ignition in Highly Supercharged SI Engines, SAE International Journal of Engines 3 (2010) 214–224.
- [7] N. Sasaki, K. Nakata, K. Kawatake, S. Sagawa, M. Watanabe, T. Sone, The Effect of Fuel Compounds on Pre-ignition under High Temperature and High Pressure Condition, SAE Technical Paper 2011-01-1984 (2011).
- [8] M. Amann, T. Alger, D. Mehta, The Effect of EGR on Low-Speed Pre-Ignition in Boosted SI Engines, SAE Int. J. Engines 4 (2011) 235–245.
- [9] E. Chapman, R. S. Davis, W. Studzinski, P. Geng, Fuel Octane and Volatility Effects on the Stochastic Pre-Ignition Behavior of a 2.0L Gasoline Turbocharged DI Engine, SAE International Journal of Fuels and Lubricants 7 (2014) 379–389.
- [10] V. Mittal, J. B. Heywood, The Shift in Relevance of Fuel RON and MON to Knock Onset in Modern SI Engines Over the Last 70 Years, SAE International Journal of Engines 2 (2009) 1–10.
- [11] A. Zahdeh, P. Rothenberger, W. Nguyen, M. Anbarasu, S. Schmuck-Soldan, J. Schaefer, T. Goebel, Fundamental Approach to Investigate Pre-Ignition in Boosted SI Engines, SAE International Journal of Engines 4 (2011) 246–273.
- [12] Y. Okada, S. Miyashita, Y. Izumi, Y. Hayakawa, Study of Low-Speed Pre-Ignition in Boosted Spark Ignition Engine, SAE International Journal of Engines 7 (2014) 584–594.
- [13] K. Morikawa, Y. Moriyoshi, T. Kuboyama, Y. Imai, T. Yamada, K. Hatamura, Investigation and Improvement of LSPI Phenomena and Study of Combustion Strategy in Highly Boosted SI Combustion in Low Speed Range, SAE Technical Paper 2015-01-0756 (2011).



- [14] A. B. Mansfield, E. Chapman, K. Briscoe, Effect of market variations in gasoline composition on aspects of stochastic pre-ignition, *Fuel* 184 (2016) 390–400.
- [15] M. Günther, Y. Uygun, Kraftstoffkennzahlen Biofuels Otto-DI, FVV - Vorhaben Nr. 1059, Heft 1042, FVV, Frankfurt am Main, Germany, 2013.
- [16] C. Martin, R. Luef, Downsizingkraftstoff, FVV - Vorhaben Nr. 1078, Heft 1059, FVV, Frankfurt am Main, Germany, 2015.
- [17] S. A. Arrhenius, Über die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von Rohrzucker durch Säuren, *Zeitschrift für Physikalische Chemie* 4 (1889) 226.
- [18] O. E. Meyer, Die kinetische Theorie der Gase. In elementarer Darstellung mit mathematischen Zusätzen, 1899.
- [19] L. Boltzmann, Vorlesungen über Gastheorie, Barth, Leipzig, 1896.
- [20] H. J. Curran, P. Gaffuri, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation, *Combustion and flame* 114 (1998) 149–177.
- [21] H. Nakamura, D. Darcy, M. Mehl, C. J. Tobin, W. K. Metcalfe, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, H. J. Curran, An experimental and modeling study of shock tube and rapid compression machine ignition of n-butylbenzene/air mixtures, *Combustion and flame* 161 (2014) 49–64.
- [22] T. Tsujimura, W. J. Pitz, F. Gillespie, H. J. Curran, B. W. Weber, Y. Zhang, C.-J. Sung, Development of Isopentanol Reaction Mechanism Reproducing Autoignition Character at High and Low Temperatures, *Energy & Fuels* 26 (2012) 4871–4886.
- [23] S. M. Sarathy, C. K. Westbrook, M. Mehl, W. J. Pitz, C. Togbe, P. Dagaut, H. Wang, M. A. Oehlschlaeger, U. Niemann, K. Seshadri, P. S. Veloo, C. Ji, F. N. Egolfopoulos, T. Lu, Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from C7 to C20, *Combustion and flame* 158 (2011) 2338–2357.
- [24] H. Curran, A comprehensive modeling study of iso-octane oxidation, *Combustion and flame* 129 (2002) 253–280.
- [25] K. A. Heufer, S. M. Sarathy, H. J. Curran, A. C. Davis, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, Detailed Kinetic Modeling Study of n -Pentanol Oxidation, *Energy & Fuels* 26 (2012) 6678–6685.
- [26] S. M. Sarathy, S. Vranckx, K. Yasunaga, M. Mehl, P. Oßwald, W. K. Metcalfe, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, K. Kohse-Höinghaus, R. X. Fernandes, H. J. Curran, A comprehensive chemical kinetic combustion model for the four butanol isomers, *Combustion and flame* 159 (2012) 2028–2055.
- [27] J. Warnatz, R. W. Dibble, U. Maas, *Combustion*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2006.
- [28] C. K. Westbrook, Chemical kinetics of hydrocarbon ignition in practical combustion systems, *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000) 1563–1577.

- [29] C. Banyon, K. Zhang, H. J. Curran, An experimental investigation of the effect of alkane fuel structure on reactivity demonstrated through the hexane isomers, *Proceedings of the European Combustion Meeting 2015* (2015) 1–41.
- [30] S. Gersen, A. V. Mokhov, J. H. Darneveil, H. B. Levinsky, Ignition properties of n-butane and iso-butane in a rapid compression machine, *Combustion and flame* 157 (2010) 240–245.
- [31] P. Hellier, M. Talibi, A. Eveleigh, N. Ladommatos, An overview of the effects of fuel molecular structure on the combustion and emissions characteristics of compression ignition engines, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering* 140 (2017) 095440701668745.
- [32] J. Yanowitz, M. Ratcliff, R. McCormick, J. Taylor, M. Murphy, *Compendium of Experimental Cetane Numbers*, 2014.
- [33] A. Schönborn, N. Ladommatos, J. Williams, R. Allan, J. Rogerson, The influence of molecular structure of fatty acid monoalkyl esters on diesel combustion, *Combustion and flame* 156 (2009) 1396–1412.
- [34] E. Koivisto, N. Ladommatos, M. Gold, Systematic study of the effect of the hydroxyl functional group in alcohol molecules on compression ignition and exhaust gas emissions, *Fuel* 153 (2015) 650–663.
- [35] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, Autoignition behavior of unsaturated hydrocarbons in the low and high temperature regions, *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011) 201–208.
- [36] P. Hellier, N. Ladommatos, R. Allan, M. Payne, J. Rogerson, The Impact of Saturated and Unsaturated Fuel Molecules on Diesel Combustion and Exhaust Emissions, *SAE International Journal of Fuels and Lubricants* 5 (2012) 106–122.
- [37] Y. Zhang, A. L. Boehman, Experimental study of the autoignition of C<sub>8</sub>H<sub>16</sub>O<sub>2</sub> ethyl and methyl esters in a motored engine, *Combustion and flame* 157 (2010) 546–555.
- [38] A. Schönborn, N. Ladommatos, C. Bae, Diffusion- and Homogeneous-Charge Combustion of Volatile Ethers in a Compression Ignition Engine, *Energy & Fuels* 23 (2009) 5865–5878.
- [39] P. Hellier, N. Ladommatos, R. Allan, J. Rogerson, Influence of Carbonate Ester Molecular Structure on Compression Ignition Combustion and Emissions, *Energy & Fuels* (2013) 130825122743008.
- [40] A. Fridlyand, S. S. Goldsborough, K. Brezinsky, S. S. Merchant, W. H. Green, Influence of the double bond position on the oxidation of decene isomers at high pressures and temperatures, *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015) 333–340.

- [41] G. Vanhove, M. Ribaucour, R. Minetti, On the influence of the position of the double bond on the low-temperature chemistry of hexenes, *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005) 1065–1072.
- [42] S. Tanaka, Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives, *Combustion and flame* 132 (2003) 219–239.
- [43] M. Mehl, G. Vanhove, W. J. Pitz, E. Ranzi, Oxidation and combustion of the n-hexene isomers, *Combustion and flame* 155 (2008) 756–772.
- [44] M. Yahyaoui, N. Djebailichaumeix, P. Dagout, C. Paillard, S. Gail, Kinetics of 1-hexene oxidation in a JSR and a shock tube, *Combustion and flame* 147 (2006) 67–78.
- [45] A. J. Dean, O. G. Penyazkov, K. L. Sevruck, B. Varatharajan, Autoignition of surrogate fuels at elevated temperatures and pressures, *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007) 2481–2488.
- [46] O. Lemaire, M. Ribaucour, M. Carlier, R. Minetti, The production of benzene in the low-temperature oxidation of cyclohexane, cyclohexene, and cyclohexa-1,3-diene, *Combustion and flame* 127 (2001) 1971–1980.
- [47] M. J. Pilling, *Low-temperature combustion and autoignition*, Comprehensive chemical kinetics, Elsevier, Amsterdam, New York, 1997.
- [48] J. Andrae, D. Johansson, P. Björnbom, P. Risberg, G. Kalghatgi, Co-oxidation in the auto-ignition of primary reference fuels and n-heptane/toluene blends, *Combustion and flame* 140 (2005) 267–286.
- [49] G. Vanhove, G. Petit, R. Minetti, Experimental study of the kinetic interactions in the low-temperature autoignition of hydrocarbon binary mixtures and a surrogate fuel, *Combustion and flame* 145 (2006) 521–532.
- [50] P. Hellier, N. Ladommatos, R. Allan, J. Rogerson, Combustion and emissions characteristics of toluene/n-heptane and 1-octene/n-octane binary mixtures in a direct injection compression ignition engine, *Combustion and flame* 160 (2013) 2141–2158.
- [51] Z. Xiao, N. Ladommatos, H. Zhao, The effect of aromatic hydrocarbons and oxygenates on diesel engine emissions, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering* 214 (2005) 307–332.
- [52] M. Hartmann, I. Gushterova, M. Fikri, C. Schulz, R. Schießl, U. Maas, Auto-ignition of toluene-doped n-heptane and iso-octane/air mixtures, *Combustion and flame* 158 (2011) 172–178.
- [53] D. F. Davidson, B. M. Gauthier, R. K. Hanson, Shock tube ignition measurements of iso-octane/air and toluene/air at high pressures, *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005) 1175–1182.

- [54] C. Togbé, F. Halter, F. Foucher, C. Mounaim-Rousselle, P. Dagaut, Experimental and detailed kinetic modeling study of 1-pentanol oxidation in a JSR and combustion in a bomb, *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011) 367–374.
- [55] C. Togbé, P. Dagaut, A. Mzé-Ahmed, P. Diévarf, F. Halter, F. Foucher, Experimental and Detailed Kinetic Modeling Study of 1-Hexanol Oxidation in a Pressurized Jet-Stirred Reactor and a Combustion Bomb, *Energy & Fuels* 24 (2010) 5859–5875.
- [56] M. Gautam, D. W. Martin, D. Carder, Emissions characteristics of higher alcohol/gasoline blends, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part A: Journal of Power and Energy* 214 (2005) 165–182.
- [57] K. A. Heufer, J. Bugler, H. J. Curran, A comparison of longer alkane and alcohol ignition including new experimental results for n-pentanol and n-hexanol, *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013) 511–518.
- [58] N. Peters, *Turbulent Combustion*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [59] B. Morcinkowski, *Simulative Analyse von zyklischen Schwankungen der kontrollierten ottomotorischen Selbstzündung*, Dissertation, Aachen, 2015.
- [60] O. Reynolds, On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion, *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences* 186 (1895) 123–164.
- [61] A. J. Favre, *The equations of compressible turbulent gases*, Inst de mecanique statistique de la turbulence, Universite D'Aix Marseille, 1965.
- [62] W.P. Jones, B.E. Launder, The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence, *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (1972) 301–314.
- [63] B. E. Launder, B. I. Sharma, Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc, *Letters in heat and mass transfer* 1 (1974) 131–137.
- [64] V. Yakhot, S. A. Orszag, S. Thangam, T. B. Gatski, C. G. Speziale, Development of turbulence models for shear flows by a double expansion technique, *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* 4 (1992) 1510–1520.
- [65] D. C. Wilcox, Reassessment of the scale-determining equation for advanced turbulence models, *AIAA Journal* 26 (1988) 1299–1310.
- [66] D. C. Wilcox, *Turbulence modeling for CFD*, DCW Industries, La Canada, 1994.
- [67] F. R. Menter, Two-equation eddy-viscosity turbulence models for engineering applications, *AIAA Journal* 32 (1994) 1598–1605.
- [68] C. Baumgarten, *Mixture formation in internal combustion engines*, Heat and mass transfer, Springer, Berlin [u.a.], 2006.

- [69] P. J. O'Rourke, A. A. Amsden1987, The Tab Method for Numerical Calculation of Spray Droplet Breakup. In . SAE Technical Paper Series. SAE International400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/872089.
- [70] R. Reitz, F. V. Bracco, Mechanisms of breakup of round liquid jets, *Encyclopedia of Fluid Mechanics* 3 (1986).
- [71] R. D. Reitz, Modeling Atomization Processes in High-Pressure Vaporizing Sprays, *Atomisation and Spray Technologie* 3 (1987) 309–337.
- [72] R. D. Reitz, R. Diwakar1987, Structure of High-Pressure Fuel Sprays. In . SAE Technical Paper Series. SAE International400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/870598.
- [73] J. Xin, L. Ricart, R. D. Reitz, Computer Modeling of Diesel Spray Atomization and Combustion, *Combustion Science and Technology* 137 (1998) 171–194.
- [74] D. D. Joseph, J. Belanger, G. S. Beavers, Breakup of a liquid drop suddenly exposed to a high-speed airstream, *International Journal of Multiphase Flow* 25 (1999) 1263–1303.
- [75] A. A. Amsden, L. A. N. Laboratory, KIVA-II, Los Alamos National Laboratory, 1985.
- [76] P. J. O'Rourke, A. A. Amsden2000, A Spray/Wall Interaction Submodel for the KIVA-3 Wall Film Model. In . SAE Technical Paper Series. SAE International400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/2000-01-0271.
- [77] D. Kuhnke, Spray/wall-interaction modelling by dimensionless data analysis, Dissertation, Darmstadt, Germany, 2004.
- [78] van Basshuysen, R., Ed.2012. *Handbuch Verbrennungsmotor. Grundlagen, Komponenten, Systeme, Perspektiven. Mit mehr als 1300 Literaturstellen*, ATZ-MTZ Fachbuch, Vieweg & Teubner.
- [79] van Basshuysen, R., Ed.2013. *Ottomotor mit Direkteinspritzung. Verfahren, Systeme, Entwicklung, Potenzial*, ATZ/MTZ-Fachbuch, Springer Vieweg.
- [80] G. P. Merker, C. Schwarz, *Grundlagen Verbrennungsmotoren*, Vieweg+Teubner, Wiesbaden, 2009.
- [81] C. Dahnz, K.-M. Han, M. Magar, Vorentflammung bei Ottomotoren, FVV - Vorhaben Nr. 931, Report No. 907, FVV, Frankfurt am Main, Germany, 2010.
- [82] P. W. Manz, M. Daniel, K.-N. Jippa, J. Willand, Pre-ignition in highly charged turbocharged engines. Analysis procedure and results, 8th International Symposium on Combustion Diagnostics (2009).
- [83] T. Inoue, Y. Inoue, M. Ishikawa2012, Abnormal Combustion in a Highly Boosted SI Engine - The Occurrence of Super Knock. In . SAE Technical Paper Series. SAE International400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/2012-01-1141.

- [84] Z. Wang, H. Liu, T. Song, Y. Xu, J.-X. Wang, D.-S. Li, T. Chen 2014, Investigation on Pre-ignition and Super-Knock in Highly Boosted Gasoline Direct Injection Engines. In . SAE Technical Paper Series. SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/2014-01-1212.
- [85] J. Willand, M. Daniel, E. Montefrancesco, B. Geringer, P. Hofmann, M. Kieberger, Grenzen des Downsizing bei Ottomotoren durch Vorentflammungen, MTZ - Motortechnische Zeitschrift 70 (2009) 422–428.
- [86] S. Palaveev, M. Magar, H. Kubach, R. Schiessl, U. Spicher, U. Maas, Premature Flame Initiation in a Turbocharged DISI Engine - Numerical and Experimental Investigations, SAE International Journal of Engines 6 (2013) 54–66.
- [87] T. Lauer, M. Heiß, N. Bobicic, S. Pritze, Modellansatz zur Entstehung von Vorentflammungen, MTZ - Motortechnische Zeitschrift 75 (2014) 64–71.
- [88] C. Dahnz, H. Kubach, U. Spicher, M. Magar, R. Schießl, U. Maas, Pre-Ignition in Supercharged SI Engines, 10. Internationales Stuttgarter Motorensymposium "Automobil- und Motorentechnik" (16.03.2010).
- [89] Y. Long, Z. Wang, Y. Qi, S. Xiang, G. Zeng, P. Zhang, X. He, A. Gupta, H. Shao, Y. Wang 2016, Effect of Oil and Gasoline Properties on Pre-Ignition and Super-Knock in a Thermal Research Engine (TRE) and an Optical Rapid Compression Machine (RCM). In . SAE Technical Paper Series. SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/2016-01-0720.
- [90] K. Takeuchi, K. Fujimoto, S. Hirano, M. Yamashita, Investigation of Engine Oil Effect on Abnormal Combustion in Turbocharged Direct Injection - Spark Ignition Engines, SAE International Journal of Fuels and Lubricants 5 (2012) 1017–1024.
- [91] K. Takeuchi, K. Fujimoto, S. Hirano, M. Yamashita, Investigation of Engine Oil Effect on Abnormal Combustion in Turbocharged Direct Injection - Spark Ignition Engines, SAE Int. J. Fuels Lubr. 5 (2012) 1017–1024.
- [92] K. Morikawa, Y. Moriyoshi, T. Kuboyama, Y. Imai, T. Yamada, K. Hatamura, Investigation and Improvement of LSPI Phenomena and Study of Combustion Strategy in Highly Boosted SI Combustion in Low Speed Range, SAE Technical Paper 2015-01-0756 (2011).
- [93] Y. Qi, Y. Xu, Z. Wang, J. Wang 2014, The Effect of Oil Intrusion on Super Knock in Gasoline Engine. In . SAE Technical Paper Series. SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/2014-01-1224.
- [94] M. Amann, T. Alger, B. Westmoreland, A. Rothmaier, The Effects of Piston Crevices and Injection Strategy on Low-Speed Pre-Ignition in Boosted SI Engines, SAE International Journal of Engines 5 (2012) 1216–1228.

- [95] A. Gupta, H. Shao, J. Remias, J. Roos, Y. Wang, Y. Long, Z. Wang, S.-J. Shuai 2016, Relative Impact of Chemical and Physical Properties of the Oil-Fuel Droplet on Pre-Ignition and Super-Knock in Turbocharged Gasoline Engines. In . SAE Technical Paper Series. SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/2016-01-2278.
- [96] N. Sasaki, K. Nakata, K. Kawatake, S. Sagawa, M. Watanabe, T. Sone 2011, The Effect of Fuel Compounds on Pre-ignition under High Temperature and High Pressure Condition. In . SAE Technical Paper Series. SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/2011-01-1984.
- [97] M. Amann, D. Mehta, T. Alger, Engine Operating Condition and Gasoline Fuel Composition Effects on Low-Speed Pre-Ignition in High-Performance Spark Ignited Gasoline Engines, SAE International Journal of Engines 4 (2011) 274–285.
- [98] M. Serruys, Experimental study of ignition by hot spot in internal combustion engines, University of North Texas Libraries, 1938.
- [99] R. C. Spencer, Preignition Characteristics of Several Fuels Under Simulated Engine Conditions, 1941.
- [100] D. Downs, J. H. Pignéguy, An experimental investigation into pre-ignition in the spark-ignition engine, ARCHIVE: Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Automobile Division 1947-1970 1950 (1950) 125–149.
- [101] D. Downs, F. B. Theobald, The effect of fuel characteristics and engine operating conditions on pre-ignition, ARCHIVE: Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Automobile Division 1947-1970 178 (1963) 89–108.
- [102] G. T. Kalghatgi, D. Bradley, Pre-ignition and 'super-knock' in turbo-charged spark-ignition engines, International Journal of Engine Research 13 (2012) 399–414.
- [103] Y. B. Zeldovich, V. B. Librovich, G. M. Makhviladze, G. I. Sivashinsky, On Development of Detonation in a Non-Uniformly Preheated gas, Appl. Mech. Techn. Phys. 2 (1970) 76–84.
- [104] Y. B. Zeldovich, V. B. Librovich, G. M. Makhviladze, G. I. Sivashinsky, Development of Detonation in a Non-Uniformly Preheated Gas, Astronautica Acta 15 (1970) 313–321.
- [105] Y. B. Zeldovich, Regime Classification of an Exothermic Reaction with Nonuniform Initial Conditions, Combustion and flame 39 (1980) 211–214.
- [106] L. He, P. Clavin, Premixed hydrogen-oxygen flames. Part II, Combustion and flame 93 (1993) 408–420.
- [107] M. Günther, Vorentflammungen und Glühzündungen von Ottokraftstoffen mit Bioanteilen, Dissertation, Aachen, Germany, 2015.
- [108] K. Boulouchos, Entflammung und Energieumsetzung im fremdgezündeten Motor durch temperaturgesteuerte Oberflächen, Dissertation, Zürich, Switzerland, 1984.

- [109] R. Ernst, S. Münzinger, B. Hanula, T. Schnitzler, F. Geiser, Das Phänomen Glühzündung: Ursachen, Entstehung und Vermeidung, MTZ - Motortechnische Zeitschrift 63 (2002) 916–924.
- [110] N. Sasaki, K. Nakata, Effect of Fuel Components on Engine Abnormal Combustion, SAE Technical Paper 2012-01-1276 (2012).
- [111] X. Yu, V. Costanzo, E. Chapman, R. Davis 2017, A Robust Preignition Rating Methodology: Evaluating the Propensity to Establish Propagating Flames under Real Engine Conditions. In . SAE Technical Paper Series. SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States. DOI=10.4271/2017-01-2241.
- [112] N. Peters, Der Einfluß von Zündungen an heißen Oberflächen auf den Verbrennungsablauf in Ottomotoren bei hohen Verdichtungsverhältnissen, Dissertation, Aachen, Germany, 1964.
- [113] G. Adomeit, Die Zündung brennbarer Gemische an umströmten heißen Körpern, Dissertation, Aachen, Germany, 1961.
- [114] Deutsches Institut für Normung (DIN), DIN EN ISO 5163:2014, Mineralölerzeugnisse - Bestimmung der Klopfestigkeit von Otto- und Flugkraftstoffen - Motor-Verfahren, Beuth Verlag GmbH Berlin 2006.
- [115] C. Lee, S. Vranckx, K. A. Heufer, S. V. Khomik, Y. Uygun, H. Olivier, R. X. Fernandez, On the Chemical Kinetics of Ethanol Oxidation, Zeitschrift für Physikalische Chemie 226 (2012) 1–28.
- [116] C.-J. Sung, H. J. Curran, Using rapid compression machines for chemical kinetics studies, Progress in Energy and Combustion Science 44 (2014) 1–18.
- [117] L. Cai, H. Pitsch, Optimized chemical mechanism for combustion of gasoline surrogate fuels, Combustion and flame 162 (2015) 1623–1637.
- [118] P. K. Senecal, K. J. Richards, E. Pomraning, T. Yang, M. Z. Dai, R. M. McDavid, M. A. Patterson, S. Hou, T. Shethaji, A New Parallel Cut-Cell Cartesian CFD Code for Rapid Grid Generation Applied to In-Cylinder Diesel Engine Simulations, SAE Technical Paper 2007-01-0159 (2007).
- [119] Deutsches Institut für Normung (DIN), DIN EN ISO 5164:2014, Mineralölerzeugnisse - Bestimmung der Klopfestigkeit von Ottokraftstoffen - Research-Verfahren, Beuth Verlag GmbH Berlin 2006.
- [120] Deutsches Institut für Normung (DIN), DIN EN 228, Kraftstoffe für Kraftfahrzeuge - Unverbleite Ottokraftstoffe - Anforderungen und Prüfverfahren, Beuth Verlag GmbH Berlin 2006.
- [121] K. Fieweger, Selbstzündung von Kohlenwasserstoff/Luft-Gemischen unter motorischen Randbedingungen, Dissertation, Aachen, Germany, 1996.



- 
- [122] N. Atef, G. Kukkadapu, S. Y. Mohamed, M. A. Rashidi, C. Banyon, M. Mehl, K. A. Heufer, E. F. Nasir, A. Alfazazi, A. K. Das, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, T. Lu, A. Farooq, C.-J. Sung, H. J. Curran, S. M. Sarathy, A comprehensive iso-octane combustion model with improved thermochemistry and chemical kinetics, *Combustion and flame* 178 (2017) 111–134.
- [123] M. Mehl, W. J. Pitz, C. K. Westbrook, H. J. Curran, Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions, *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011) 193–200.
- [124] W. R. Leppard, The Chemical Origin of Fuel Octane Sensitivity, SAE Technical Paper 902137 (1990).
- [125] S. M. Sarathy, T. Javed, F. Karsenty, A. Heufer, W. Wang, S. Park, A. Elwardany, A. Farooq, C. K. Westbrook, W. J. Pitz, M. A. Oehlschlaeger, G. Dayma, H. J. Curran, P. Dagaut, A comprehensive combustion chemistry study of 2,5-dimethylhexane, *Combustion and flame* 161 (2014) 1444–1459.

## 7.2 Abbildungsverzeichnis

2-1. Schematische Darstellung des Niedertemperaturpfades der Oxidation von Kohlenwasserstoffen. ....	4
2-2. Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan/Luft-Gemisch bei 20 bar und 430 °C mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [20]. ....	5
2-3. Schematische Darstellung des Intermediärtemperaturpfades der Oxidation von Kohlenwasserstoffen. ....	6
2-4. Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan/Luft-Gemisch bei 20 bar und 580 °C mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [20]. ....	6
2-5. Schematische Darstellung des Hochtemperaturpfades. ....	7
2-6. Temperaturverlauf einer simulierten Zündung für ein stöchiometrisches n-Heptan/Luft-Gemisch bei 20 bar und 740 °C mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [20]. ....	7
2-7. Simulierte Zündverzugszeiten für ein stöchiometrisches n-Heptan/Luft-Gemisch bei 20 bar mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus aus [20]. ....	8
2-8. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Butan/Luft- und n-Hexan/Luft-Gemische bei 15 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk (RCM) [29, 30]. ....	9
2-9. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan/Luft- und Isohexan/Luft-Gemische bei 15 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk [29]. ....	10
2-10. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan/Luft- und n-Hexen/Luft-Gemische bei 15 bar bzw. 9.4 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk und 9 bar Kompressionsenddruck gemessen im Stoßwellenrohr [29, 41, 44, 45]. ....	11
2-11. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan/Luft- und Cyclohexan/Luftäquivalent-Gemische bei 15 bar bzw. 14 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk [29, 46]. ....	11
2-12. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Heptan/Luft- und Toluol/Luft-Gemische bei 40 bar bzw. 50 bar Kompressionsenddruck gemessen im Stoßwellenrohr [52, 53]. ....	12
2-13. Zündverzugszeiten für stöchiometrische n-Hexan/Luft- und Hexanol/Luft-Gemische bei 15 bar bzw. 9 bar Kompressionsenddruck gemessen im Einhubtriebwerk und im Stoßwellenrohr [29, 57]. ....	13

---

2-14. Schematische Darstellung des Energiespektrums einer turbulenten Strömung mit der üblichen Einteilung der turbulenten Skalen [58], entnommen aus [59].....	15
2-15. Schematische Darstellung der Aufteilung der Strömungsgeschwindigkeit in zeitlichen Mittelwert und zeitliche Schwankungsbreite. ....	16
2-16. Zylinderdruckverläufe abnormaler Verbrennungen [85].....	20
2-17. Zylinderdruckverläufe einer intermittierenden Vorentflammungsserie [86]. ....	21
2-18. Motorische Quellen für Vorentflammung nach Dahnz et al. [88].....	22
3-1. Molare Zusammensetzung der Kraftstoffe KK27 und KK10. ....	31
3-2. Molare Zusammensetzung der Kraftstoffe KK25 und KK08. ....	32
3-3. Molare Zusammensetzung der Kraftstoffe KK25 und KK08. ....	32
4-1. Einhubtriebwerk des PCFC der RWTH Aachen (engl. RCM = Rapid Compression Machine). ....	34
4-2. Einhubtriebwerk des PCFC der RWTH Aachen in Schnittdarstellung. ....	34
4-3. Zylinderdruckverlauf gemessen im Einhubtriebwerk des PCFC (RWTH Aachen University). ....	35
4-4. Schematischer Aufbau der Konstantvolumenbrennkammer (AFIDA). ....	36
4-5. Exemplarischer Kammerdruckverlauf gemessen im AFIDA mit KK31 bei einem Kammerdruck bzw. einer Kammertemperatur bei Start der Einspritzung von 20 bar bzw. 650 °C.....	37
4-6. Schnittdarstellung des Zylinderkopfes mit Ventildeckel und Tumble-System (links), Kolben mit Zündkerze, Glühstift und Injektor (mittig), Brennraumdach mit Spraykeulen und Glühstift (rechts).....	40
4-7. Temperaturschwankungen im Glühstift und statistische Verteilung der Glühstifttemperaturmessung in Temperaturklassen von 10 °C Breite.....	41
4-8. Rechennetz und Randbedingungen der 2D-CFD Simulationen. ....	43
4-9. 3D-CFD Zylindermodell. Einlass links und Auslass rechts im Bild. ....	44
4-10. Schnittdarstellung des modifizierten CFR-Prüfmotors. DE-Injektor und Druckaufnehmer machten Bohrungen im Zylinderkopf notwendig. Der Glühstiftadapter ist anstatt des Pick- Up-Sensors verbaut. ....	46
5-1. Zündverzugszeitmessungen aus 15 Kraftstoffen bei stöchiometrischen Luft-Kraftstoff- Verhältnis und 20 bar Kompressionsenddruck im Einhubtriebwerk. ....	51

5-2. Zündverzugszeitmessungen ausgewählter Kraftstoffe am Einhubtriebwerk bei 20 bar Kompressionsenddruck und stöchiometrischem Luft-Kraftstoff-Verhältnis.....	52
5-3. Einfluss des Drucks auf den chemischen Zündverzug und die NTC-Charakteristik anhand von experimentellen Daten aus [121, 122]. Dargestellt sind Zündverzugszeiten von stöchiometrischem Isooktan-Luftgemisch.....	53
5-4. Exemplarischer Vergleich zwischen Zündverzugszeiten gemessen im Einhubtriebwerk und im AFIDA.....	53
5-5. Exemplarische Darstellung verschiedener Definitionen der AFIDA Zündverzugszeit gemessen im AFIDA. ....	54
5-6. Einfluss einer alternativen Definition der AFIDA Zündverzugszeit (IDT2). Vergleich mit IDT1 bzw. dem Ergebnis aus dem Einhubtriebwerk. ....	54
5-7. Ergebnis der ROZ/MOZ Analyse aller Splash Blends und deren Grundkraftstoff KK03 am normierten CFR-Prüfmotor. ....	55
5-8. Ergebnis der CPI/HSPI Analyse aller Splash Blends und deren Grundkraftstoff KK03 am modifizierten CFR-Prüfmotor.....	56
5-9. Glühzündungshäufigkeit der Grundkraftstoffe. Die Zündverzugszeiten stammen aus Simulationen mit dem Reaktionsmechanismus nach [123].....	58
5-10. Mittlere Brennraumtemperatur (a) und Gastemperatur in unmittelbarer Umgebung zum Glühstift (b) aus CFD-Simulationen zur Glühzündung. Simulation mit Isooktan und zwei verschiedenen Glühstiftoberflächentemperaturen (740 °C und 790 °C).....	59
5-11. Vergleich zwischen CFD-Simulation und indizierten Zylinderdruckverläufen für Glühzündungsexperimente mit stöchiometrischen Isooktan- und PRF95-Luft-Gemischen. Kraftstoffverteilung im Brennraum bei 8° KW n.OT <sub>Zündung</sub> (links) und mittlere indizierte Druckverläufe aus experimentellen Untersuchungen am Einzylinder-Forschungsmotor (rechts).....	61
5-12. Zylinderdruck für gefeuerten und geschleppte Simulation im Einzylinder-Forschungsmotor (links), Druckverläufe aus experimentellen Untersuchungen im Einhubtriebwerk mit PRF95-Luft-Gemisch und PRF95-Stickstoff-Gemisch (Mitte) und Differenzdruckverläufe aus linkem und mittlerem Bild (rechts). ....	62
5-13. Ablauf einer Oberflächenzündung in einer 2D-Strömungssimulation. Dargestellt ist die Temperaturverteilung nahe der heißen Wandoberfläche.....	63
5-14. Numerische Untersuchung zur Variation der Oberflächentemperatur und Strömungsgeschwindigkeit betreffend der Oberflächenzündung an einer zweidimensionalen Strömung über eine heiße Wand. ....	64

---

5-15. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Isohexan....	66
5-16. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit n-Hexen.....	67
5-17. Zündzeitpunkte simulierter Glühzündungen mit den vier CFD-Surrogate Isooktan, KK02, KK09 und KK12. ....	68
5-18. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Cyclohexan.	69
5-19. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Toluol. ....	70
5-20. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit ETBE.....	71
5-21. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Methanol. ..	72
5-22. Glühzündungshäufigkeiten der Grundkraftstoffe und Mischkraftstoffe mit Ethanol. ....	73
5-23. Glühzündungshäufigkeiten der EN228 Marktkraftstoffe. ....	75
5-24. Bestimmtheitsmaße der Korrelationen der Glühstifttemperatur bei 2 % Vorentflammungshäufigkeit mit verschiedenen CFR-Kennzahlen, Kraftstoffanteilen und elementaren Grundbestandteilen des Kraftstoffes (CPI bei 200 °C, HSPI/DOZ bei 149 °C Ansauglufttemp.). ....	76
5-25. Korrelation der kritischen Glühstifttemperatur bei 2 % Vorentflammungshäufigkeit und der HSPI. ....	77
5-26. Simulierte Zündverzugszeiten unter den thermodynamischen Bedingungen des HSPI Messverfahrens im CFR-Prüfmotor und den Glühzündungsexperimenten im Einzylinder- Forschungsmotor. ....	78
5-27. Korrelation der kritischen Glühstifttemperatur bei 2 % Vorentflammungshäufigkeit und der HSPI unter „heißen“ (149 °C) und „kalten“ (50 °C) Bedingungen. ....	79
5-28. Vorentflammungshäufigkeit infolge einer kritischen Gasphase der Referenz- und Marktkraftstoffe .....	81
5-29. Vorentflammungshäufigkeit infolge einer kritischen Gasphase bei Zugabe von Isohexan zu PRF95.....	82
5-30. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von n-Hexen zu PRF95. ....	83
5-31. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von Cyclohexan zu PRF95. ....	84
5-32. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von Toluol zu PRF95. ....	85
5-33. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von ETBE zu PRF95. ....	86
5-34. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von Methanol und ETBE zu PRF95. ....	87
5-35. Vorentflammungshäufigkeit bei Zugabe von Methanol und ETBE zu PRF95. ....	88

5-36. Korrelation zwischen dem kritischen Ladedruck gemessen im 1-Zylinderforschungsmotor und der kritischen Ladelufttemperatur gemessen im 3-Zylindervollmotor für 25 der untersuchten Kraftstoffe. ....	89
5-37. Bestimmtheitsmaße der Korrelation der Vorentflammungsneigung infolge einer kritischen Gasphase und elementaren Grundbestandteilen des Kraftstoffes. ....	90
5-38. Korrelationsanalyse der am normgerechten CFR-Prüfmotor gemessenen ROZ und den Ergebnissen am 1-Zylinder- bzw. 3-Zylinder-Versuchsträger. ....	91
5-39. Bestimmtheitsmaße $R^2$ einer linearen Korrelation zwischen 2 % Vorentflammungshäufigkeit am Einzylinder-Forschungsmotor bzw. am Serienmotor und den relevanten Kraftstoffkennzahlen zu sehen. ....	92
5-40. Korrelationsanalyse der am CFR-Prüfmotor gemessenen CPI und den Ergebnissen am 1-Zylinder- bzw. 3-Zylinder-Versuchsträger. Vergleich des adjustierten Bestimmtheitsmaßes $R^2$ aller dargestellten Kraftstoffe und jenem ohne ROZ95 Kraftstoffe.	93
5-41. Simulierte Zündverzugszeiten unter den thermodynamischen Bedingungen des ROZ und CPI Messverfahrens im CFR-Prüfmotor und den Vorentflammungsexperimenten im Einzylinder-Forschungsmotor. ....	94
5-42. Vergleich der resultierenden CPI unter „normalen“ CPI-Bedingungen und modifiziertem CFR-Betrieb (inkl. Aufladung und Ladeluftkühlung). ....	95
5-43. Korrelationsanalyse der modifizierten CPI und den Ergebnissen am 1-Zylinder- bzw. 3- Zylinder-Versuchsträger. ....	95
5-44. Simulierte Zündverzugszeiten unter den thermodynamischen Bedingungen des modifizierten CPI-Verfahrens im CFR-Prüfmotor und den Vorentflammungsexperimenten im Einzylinder-Forschungsmotor. ....	96
5-45. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (Brennkammerbedingung: 700 °C, 40 bar). ....	97
5-46. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (Brennkammerbedingung: 700 °C, 40 bar). Kraftstoffe > 40 % mol. Alkohol-Anteil sind in der Analyse ausgenommen. ....	98
5-47. Korrelation des kritischen Ladedruckes aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (700 °C Brennkammerinnentemperatur, 40 bar Brennkammerdruck). ....	99

---

5-48. Bei Umgebungsdruck gemessene Siedeverläufe der Cyclohexan Kraftstoffe KK07, KK11 und KK28.....	99
5-49. Relative Kammerdruckverläufe aus AFIDA-Experimenten mit verschiedenen Kraftstoffen in Stickstoffatmosphäre.....	100
5-50. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA bei unterschiedlichen Betriebsbedingungen (650 °C, 50 bar gegenüber 700 °C, 40 bar). ....	101
5-51. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (650 °C Brennkammerinnentemperatur, 50 bar Brennkammerdruck) bzw. den alternativen Zündverzugszeiten des AFIDA (IDT2).....	102
5-52. Kammerdrücke und Kammertemperaturen für die AFIDA-Experimente bei konstantem Zündverzug von 7 ms.....	103
5-53. Korrelation des kritischen Ladedruckes bzw. der kritischen Ladelufttemperatur aus den motorischen Untersuchungen und der Zündverzugszeiten des AFIDA (650 °C Brennkammerinnentemperatur, 50 bar Brennkammerdruck) bzw. den AFIDA-Bedingungen zur Einstellung einer Zündverzugszeit von 7 ms.....	104
5-54. Vergleich der Kraftstoffzusammensetzung (Stoffgruppen) von KK01 (Referenzkraftstoff) und KK20 (max. Aromaten-Anteil nach EN228) sowie deren Auswirkung auf den kritischen Ladedruck (1-Zylinder Gasphasenzündungsexperiment).105	
5-55. Vergleich der Kraftstoffe KK01 und KK20 auf Basis einer detaillierten GC-Analyse. Referenzkraftstoff ist KK01. Beispiel: KK20 hat um etwa 4 % vol. mehr Paraffine mit 5 Kohlenstoffatomen. ....	106
5-56. Zündverzugszeiten vier verschiedener Isomere des C8-Paraffins. Die Daten sind entnommen aus [23, 125, 122]......	106

### 7.3 Tabellenverzeichnis

1. Liste der untersuchten Kraftstoffe und ausgewählte Stoffeigenschaften.....	30
2. Technische Daten des Versuchsträgers.....	39
3. Versuchsrandbedingungen der Glühzündungsmessungen. ....	40
4. Versuchsrandbedingungen der Messungen zur Gasphasenzündung.....	42
5. CFR-Betriebsbedingung relevanter Kraftstoffkennzahlen [16, 120, 114]. ....	47
6. Technische Daten des Dreizylinder-Serienmotors.....	48
7. Versuchsrandbedingungen der Vorentflammungsuntersuchung am Dreizylinder- Ottomotor. ....	49
8. Übersicht des Einflusses verschiedener Kraftstoffkomponenten auf die relevanten CFR- Kennzahlen .....	57
9. Übersicht des Einflusses verschiedener Kraftstoffkomponenten auf die Glühzündungsneigung im Einzylinder-Forschungsmotor.....	76
10. Übersicht des Einflusses verschiedener Kraftstoffkomponenten auf die Vorentflammungsneigung in beiden modernen Aggregaten. ....	90
11. Modifizierter Betriebsbereich des CPI-Prüfverfahrens. ....	95
12. Übersicht des Einflusses verschiedener Kraftstoffkomponenten auf die Vorentflammungsneigung im modernen Serienaggregat.....	111