Untersuchungen zur optimalen Zusammensetzung synthetischer Dieselkraftstoffe für konventionelle Brennverfahren

Von der Fakultät Konstruktions-, Produktions- und Fahrzeugtechnik der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

> Vorgelegt von Peter Bloch aus Bayreuth

Hauptberichter: Mitberichter:

Prof. Dr.-Ing. M. Bargende Prof. Dr. sc. techn. K. Boulouchos

Tag der mündlichen Prüfung: 18.10.2012

Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen der Universität Stuttgart

2012

"Shaken, not stirred"

007 James Bond

Vorwort

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Kraftfahrwesen und Verbrennungsmotoren (IVK) der Universität Stuttgart am Lehrstuhl für Verbrennungsmotoren unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende in den Jahren 2007 bis 2011 und basiert auf den Ergebnissen der Untersuchungen im Rahmen des Forschungsprojekts "Future Fuels for Diesel Engines" der Forschungsvereinigung für Verbrennungskraftmaschinen. Ich danke der FVV für die Finanzierung dieses Projekts aus Eigenmitteln.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende für die wissenschaftliche und persönliche Betreuung bei der Durchführung dieser Arbeit sowie die Übernahme des Hauptreferates.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Konstantinos Boulouchos danke ich für das entgegengebrachte Interesse an der Arbeit und für die Übernahme des Koreferates.

Den Bearbeitern des FVV-Projekts auf Züricher Seite, Herrn Dr. Wolfgang Kreutner und Herrn Dr. Bruno Schneider sowie allen weiteren Beteiligten möchte ich für die gute Zusammenarbeit und die Erlaubnis danken, einige Ihrer Ergebnisse in dieser Arbeit zu verwenden.

Herrn Dipl.-Ing. Hannes Berner gilt mein herzlicher Dank für seine großartige Unterstützung in allen Belangen und für den großen Freiraum den ich bei der Ausgestaltung und der Durchführung meiner Tätigkeit genießen durfte.

Den Studenten Frieder Zapf und Thomas Lachnit gebührt für ihre, im Rahmen von Studienarbeiten, durchgeführten Literaturrecherchen Dank. Ihre Arbeiten trugen zum Kapitel 2 "Einführung in synthetische Kraftstoffe" bei.

Bei allen Mitarbeitern des Lehrstuhls Verbrennungsmotoren und den Mitarbeitern des FKFS möchte ich mich für die sehr kollegiale Arbeitsatmosphäre, sämtliche Unterstützung und die gute Zusammenarbeit ganz herzlich bedanken. In besonderem Maße möchte ich an dieser Stelle meinen Freund und Bürokollegen, Herrn Sebastian Beck erwähnen. Erst der gemeinsame Prüfstandsaufbau und vor allem der vielfältige Gedankenaustausch haben das Gelingen dieser Arbeit möglich gemacht.

Abschließend will ich für die große Geduld danken, die mir meine Frau Diana und meine Tochter Mia entgegengebracht haben. Oftmals blieb für sie zu wenig Zeit.

Stuttgart, 2012

Summary

The findings that are presented in this study are based on the results of the research project "Future Fuels for Diesel Engines", which was assigned and financed by the "Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen – FVV". The project task was the evaluation of the influences of chemical and physical properties of synthetic fuels on combustion and emission behavior at conventional diesel engine operation. Therefore seven synthetic blends of different structures were defined and investigated. The results are compared to a reference diesel fuel following the requirements of EN590.

In order to evaluate the fuel properties from the engine's side, studies were conducted on a single-cylinder research engine with common rail injection system. The behavior of the fuels was examined at several representative operating points under various conditions including operation with a single shot injection only in order to gain knowledge about the fundamental fuel behavior. Methods of "Design of Experiments" were conducted to attain a maximum of information within an acceptable range of measurements. Objecting to convey those results to more common operating conditions of modern diesel engines investigations of operation with pilot injection and full load operation was carried out as well. Ignition delay, burn duration and combustion phasing were defined as the criteria to assess the combustion behavior. While the emission behavior was judged by recording the raw engine out emissions of carbon monoxide, unburned hydrocarbons, nitrogen oxides and soot the efficiency was evaluated with regard to the specific fuel consumption, the energy entry per working cycle and the carbon dioxide emissions. To enable a deeper interpretation of the results from the engine investigations fundamental experiments are performed at a constant volume combustion chamber (high temperature / high pressure test cell – HTDZ). Here spray penetration depth, spray propagation, evaporation, points of ignition and soot formation are in the focus of interest. Furthermore the injector was characterized by injection rate measurements for both the evaluation of differences in fuel entry into the combustion chamber and to present an exact data basis for consequently performed quantitative process calculations.

The results that were gained from engine experiments were largely dependent on the considered load and the chosen operation strategy (with or without pilot injection). Generally most effects found during investigations with single shot injections (SSI) were transferable to those with multi shot injection (MSI) whilst the differences in SSI-mode were more distinctive. The influence of the load condition has to be seen in the temperature level at the start of injection and the time required to inject the desired fuel mass. Therefore it was obvious that the results have to be judged in respect to the operating condition. At low loads the low temperature level and the short time needed for fuel injection led to a completed injection before the start of burn for all fuels considered. The ignition delay times were following the classification

vi

by their respective Cetan Numbers (CN). But it has to be noted that quantitative statements cannot be made based solely on CN as the synthetic fuel with exposed aromatic content showed a very similar combustion behavior to the reference fuel despite having a higher CN. Here considerable potential of synthetic fuels mainly consisting of long straight chain molecules was found in terms of efficiency. High partly burned and unburned emissions of the reference fuel and the fuel of aromatic content enforce the assumption of a more complete combustion by the highly ignitable fuels being the reason for the efficiency differences. Due to the good homogenization and large amounts of available oxygen at low loads soot did not play a role for any of the fuels. At higher load operation the ignition delays were significantly reduced while a greater amount of fuel had to be injected into the combustion chamber. While this was generally resulting in a predominantly diffusive combustion, the individual combustion characteristics of the fuels gain importance. The recorded burn durations and the combustion phasing pointed out that the combustion behavior of the reference fuel is more sensitive to different ignition delays than the synthetic fuels: Great portions of premixed combustion were seen at higher part load and late starts of injection while the combustion of all synthetic fuels was still mainly diffusive. At those conditions the soot emissions of the reference fuel were below the synthetic fuels. Contrary to that by far the highest soot emissions were recorded for the reference fuel at MSI operation. With regard to the synthetic fuels naphtenic contents led to an unfavorable soot performance independent of the application of a pilot injection. This could be due to slower soot oxidation processes as it is suggested by results from the HTDZ. On the other hand long-chain alcohols were recorded with lowest soot emissions at MSI operation and also showed the smallest KL-maxima in HTDZ experiments.

In a summarizing fuel assessment the FT-Base which was mainly consisting of n- and isoparaffins led to the greatest potential in terms of efficiency, partly burned and unburned emissions and nitrogen oxides. Soot performance could be improved by the earlier boiling fuel, the fuel with a larger fraction of iso-paraffins and the fuel with alcoholic content. But except for the fuel with alcoholic content these fuel types had negative impacts on the other assessment criteria. Therefore long-chain alcohols are a promising fuel content for diesel fuels of the future.

Kurzfassung

Die in dieser Arbeit vorgestellten Betrachtungen basieren auf den Ergebnissen des Forschungsprojekts "Future Fuels for Diesel Engines" das durch die Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) beauftragt und finanziert wurde. Die Aufgabenstellung dieses Projekts war die Untersuchung des Einflusses chemischer und physikalischer Eigenschaften synthetischer Kraftstoffe auf das Brenn- und Emissionsverhalten bei konventioneller dieselmotorischer Verbrennung. Dazu wurde eine Kraftstoffmatrix bestehend aus sieben synthetischen Kraftstoffen mit unterschiedlichen, Merkmal prägenden Komponenten definiert und sowie motorisch als auch optisch mittels einer Hochdruck-/ Hochtemperaturzelle untersucht. Die Ergebnisse wurden mit einem gleichfalls vermessenen Referenzkraftstoff (CEC) verglichen.

Um die Kraftstoffeigenschaften motorisch zu beurteilen wurden Untersuchungen an einem modernen Einzylinder Forschungsmotor mit Common-Rail Einspritzausrüstung durchgeführt. Dabei wurde das Brenn- und Emissionsverhalten der Kraftstoffe an mehreren repräsentativen Betriebspunkten unter Variation der Betriebsbedingungen evaluiert. Zum Einen beinhalteten die Versuche den Betrieb mit lediglich einer Einspritzung pro Arbeitsspiel um die fundamentalen Einflüsse durch die verschiedenen Kraftstoffkomponenten offen zu legen. Um anhand einer akzeptablen Anzahl von Versuchen den maximalen Informationsgehalt zu erreichen fanden hier Methoden der statistischen Versuchsplanung (DoE) Anwendung. Um zum Anderen die Übertragbarkeit auf realitätsnähere Betriebsbedingungen moderner Dieselmotoren zu überprüfen, wurden Versuche mit Voreinspritzung und Volllastuntersuchungen ergänzend durchgeführt. Als Bewertungskriterien für das Brennverhalten wurden der Zündverzug, die 50%-Umsatzlage und die Brenndauer definiert. Während die Kohlenmonoxid-, Kohlenwasserstoff-, Stickoxid- und Russ-Rohemissionen zur Bewertung des Emissionsverhaltens dienten, wurden der spezifische Kraftstoffverbrauch, die Energieeintrag pro Arbeitspiel sowie die Kohlendioxidemissionen zur Beurteilung der Wirkungsgradunterschiede herangezogen. Um die Interpretation der motorischen Ergebnisse zu erleichtern, wurden am LAV der ETH Zürich in einer optisch zugänglichen konstant-Volumen Brennkammer (Hochtemperatur-/ Hochdruckzelle - HDTZ) optische Messungen zu Eindringtiefe und Ausbreitung eines Einspritzstrahls, zu Verdampfung, Zündverzug und -ort und Russbildung durchgeführt. Zudem wurde der verwendete Injektorentyp mit Einspritzverlaufsmessungen charakterisiert, um einerseits eventuelle Unterschiede beim Kraftstoffeintrag in den Brennraum zu eruieren und andererseits genaue Daten für quantitative Prozessrechnungen zu erhalten.

Die Ergebnisse aus den motorischen Untersuchungen zeigten eine starke Abhängigkeit vom betrachteten Lastzustand und der gewählten Betriebsstrategie (mit oder ohne Voreinspritzung). Grundsätzlich waren die meisten Effekte, die bei Blockeinspritzuntersuchungen auftraten, auf die Untersuchungen mit Voreinspritzung übertragbar, wobei die Unterschiede beim Betrieb mit Blockeinspritzung zumeist stärker ausgeprägt waren. Der Einfluss des Lastzustands war einerseits im Temperaturniveau bei Beginn der Einspritzung und andererseits in der benötigten Zeit für den Einspritzvorgang zu sehen. Deshalb mussten die Ergebnisse unter Berücksichtigung der jeweiligen Betriebsbedingung bewertet werden. Bei niedrigen Lasten führten das niedrige Temperaturniveau und die kurzen benötigten Einspritzzeiten bei allen Kraftstoffen zu einem vollständig vor dem Brennbeginn abgeschlossenen Einspritzvorgang. Die gemessenen Zündverzugszeiten waren gualitativ in den Cetanzahlen der Kraftstoffe wiederzufinden. Es muss aber angemerkt werden, dass qualitative Aussagend basiernd auf den Cetanzahlen nicht möglich waren. Zum Beispiel zeigte der durch mono-Aromate geprägte Kraftstoff ein dem Referenzdiesel nahezu identisches Brennverhalten obwohl die Cetanzahl signifikant höher war. Bezüglich des Wirkungsgrads wurde hier beachtliches Potenzial der Kraftstoffe gefunden, die vorwiegend aus langen geradkettigen Molekülstrukturen bestanden. Hohe teil- und unverbrannte Emissionen des Referenzkraftstoffs und des aromatischen Blends bestärkten in der Annahme, dass eine vollständigere Verbrennung der sehr zündwilligen Kraftstoffe die Ursache für Wirkungsgradunterschiede war. Aufgrund der langen zur Verfügung stehenden Zeit für die Homogenisierung des Kraftstoff-Luft-Gemisches und ausreichend zur Verfügung stehenden Luftsauerstoffs spielte Russ bei niedrigen Lasten nur eine marginale Rolle. Bei höheren Lasten wurden einerseits weitaus kürzere Zündverzugszeiten beobachtet und andererseits musste eine größere Kraftstoffmenge eingespritzt werden. Grundlegend resultierte dies in einer vorwiegend diffusiven Verbrennung wobei das kraftstoffspezifische Brennverhalten an Bedeutung gewann. Die dokumentierten Brennverläufe und 50%-Umsatzlagen deuteten darauf hin, dass der Referenzkraftstoff eine höhere Sensibilität gegenüber verschiedenen Zündverzügen aufweist als die synthetischen Kraftstoffe: Hohe Anteile vorgemischter Verbrennung wurden bei höherer Teillast und späten Einspritzbeginn beobachtet, während das Brennverhalten der synthetischen Kraftstoffe weiterhin vornehmlich diffusiv war. Bei diesen Bedingungen waren die Russemissionen des Referenzkraftstoffs niedriger als die der synthetischen Kraftstoffe. Im Gegensatz dazu waren bei Betrieb mit Voreinspritzung die bei weitem höchsten Russemissionen beim Referenzkraftstoff zu verzeichnen. Bezüglich der synthetischen Kraftstoffe wurde der höchste Russausstoß unabhängig von der Applikation einer Voreinspritzung für den naphtenischen Kraftstoff beobachtet worden. Das kann eventuell durch die im Vergleich am langsamsten ablaufenden Russoxidationsprozesse begründet werden, wie es durch Ergebnisse aus den Untersuchungen in der HDTZ nahegelegt wird. Demgegenüber konnten die niedrigsten Russemissionen bei Untersuchung des alkoholischen Blends mit Mehrfacheinspritzung dokumentiert werden. Dieser zeigte auch die niedrigsten Maxima des KL-Wertes in HDTZ-Untersuchungen.

iх

Aus einer abschließenden Kraftstoffbewertung folgt, dass der FT-Basiskraftstoff bezüglich Wirkungsgrad, teil- und unverbrannten Emissionen und Stickoxiden das günstigste Verhalten aufwies. Der Russausstoß konnte durch den Kraftstoff mit niedrigem Siedebeginn, dem Kraftstoff mit gesteigertem iso-Paraffin Anteil und dem Kraftstoff mit langkettigen Alkoholen nochmals verringert werden. Aber abgesehen vom alkoholischen Kraftstoff hatte dies negative Auswirkungen auf die weiteren Bewertungskriterien. Folglich stellen langkettige Alkohole eine vielversprechende Kraftstoffkomponente für zukünftige Kraftstoffe dar.

Inhaltsverzeichnis

V	orwort.		v			
S	ummar	у	vi			
K	urzfass	ung	viii			
In	haltsve	erzeichnis	xi			
1	Einle	eitung	1			
2	2 Einführung in Synthetische Kraftstoffe					
2	2 1	2.1 Kohlenwasserstoffverbindungen in Kraftstoffen				
	22	Physikalisch-chemische Figenschaften	7			
	2.3	Gesetzliche Anforderungen	14			
	2.0	Syntheseprozesse	18			
	2.5	Einfluss synthetischer Kraftstoffe auf das motorische Verhalten				
3	Unte	rsuchte Kraftstoffe	27			
	3.1	Gaschromatographische Analysen				
	3.2	Zusammenfassung der Eigenschaften				
4	Unte	rsuchungsstrategie				
	4.1	Versuchsplanung unter Berücksichtigung statistischer Methoden	35			
	4.1.1	Einführung in die Methoden der statistischen Versuchsplanung	35			
	4.1.2	Planung der Versuche mit Blockeinspritzung	43			
	4.2	Ergänzende Untersuchungsstrategien				
	4.2.1	Untersuchungen mit Vor- und Haupteinspritzung:				
	4.2.2	Untersuchung des Volllastverhaltens				
	4.2.3	Optische Untersuchungen an einer Konstant-Volumen Zelle				
	4.2.4	Einspritzratenmessung				
5	Vers	uchsträger und Versuchsdurchführung	50			
	5.1	Einzylinderaggregat und Motorprüfstand	50			
	5.1.1	Motor	50			
	5.1.2	Prüfstandsaufbau	51			
	5.1.3	Messtechnik	53			
	5.1.4	Versuchsablauf				
	5.2	IAV Injection Analyzer	55			
	5.3	Hochtemperatur- / Hochdruckzelle				
	5.3.1	Zusammenfassung der Eigenschaften der HTDZ	56			
	5.3.2	Bei Untersuchungen in der HTDZ eingesetzte Messtechnik	59			

6		Datenauswertung6		
	6.1 Definition von Kennwerten		Definition von Kennwerten	60
	6.1.1		Bestimmung der Verbrennungskennwerte	60
	6.1.2		Berechnung der spezifischen Verbrauchs- und Emissionsgrößen	63
	6.1.3		Beurteilung der optischen Untersuchungen	65
	6.2 Modellierung, Validierung		Modellierung, Validierung und Auswertung der DoE-Daten	67
	6.2.1		Modellierung und Validierung der Daten aus Blockeinspritzuntersuchungen	67
		6.2.2	Entwicklung eine Auswertewerkzeugs	70
	6.	.3	Kumulierte Tabellen / Gewichtungsfunktion	73
7		Erge	bnisse	75
	7.	.1	Diskussion der Ergebnisse	75
		7.1.1	Kraftstoffeinflüsse auf das hydraulische Injektorverhalten	75
		7.1.2	Einspritzstrahlausbreitung	76
	7.		Brennverhalten	78
		7.1.4	Verbrauch und Emissionen	87
	7.	.2	Summarische Kraftstoffbewertung 1	03
8		Zusa	ammenfassung und Ausblick1	07
9		Liter	aturverzeichnis	09
10 Anhang				
	1(0.1	Abkürzungsverzeichnis 1	14
	1(0.2	Bedienungsanleitung der GUI zur Visualisierung der motorischen Ergebnisse 1	17

1 Einleitung

Moderne Dieselmotoren sind nach heutigem Stand bezüglich Effizienz und Reichweite die zu favorisierende verbrennungsmotorische Antriebsquelle. Allerdings resultiert aus der Art des Brennverfahrens eine Emissionsproblematik, die mit innermotorischen Maßnahmen allein nicht lösbar ist. Eine Reduktion der Stickoxide führt zumeist zu einem Anstieg der Russemissionen und umgekehrt. Dem wird mit einer immer aufwendigeren Abgasnachbehandlung Rechnung getragen, was wiederum zu einer hohen Systemkomplexität und hohen Systemkosten führt. Zudem müssen sowohl innermotorische Emissionsminderungsmaßnahmen als auch die Regeneration von Speicherkatalysatoren mit Effizienznachteilen erkauft werden, da von verbrauchsoptimalem Betrieb abgewichen werden muss.

Weiterhin muss aus Gründen der Versorgungssicherheit des knapper werdenden Rohstoffs Erdöl sowie der Notwendigkeit zur Minimierung von CO₂-Emissionen eine Alternative gefunden werden, die zur kurz- bis mittelfristigen Aufrechterhaltung der Mobilität im gewerblichen und privaten Sektor bei deutlich verbesserter CO₂-Bilanz beiträgt.

Synthetische Dieselkraftstoffe können diese Anforderungen erfüllen. Zum einen erlaubt die Synthetisierung von Kraftstoffen eine gezielte Einflussnahme auf die chemischen und physikalischen Eigenschaften mit dem Ziel einen für die dieselmotorische Anwendung optimalen Kraftstoff zu definieren. Zum anderen können nahezu alle kohlenwasserstoffhaltigen Energieträger für die Erzeugung von Synthesegas, dem Edukt der Synthese, dienen. Dies kann im Fall von Erdgas und Kohle erheblich zur Steigerung der Versorgungssicherheit und im Fall von Biomasse zusätzlich zu einer nahezu klimagasneutralen Mobilität beitragen. Die kurz- bis mittelfristige Verwendung von Fischer-Tropsch Kraftstoffen kann dadurch gewährleistet werden, dass das Know-How um die Syntheseprozesse vorhanden ist, sich Anlagen zur Kraftstoffsynthetisierung schon seit einiger Zeit im Aufbau befinden und die vorhandene Infrastruktur zur Versorgung genutzt werden kann. Des Weiteren ist eine sehr gute Mischbarkeit mit konventionellen Kraftstoffen gegeben, und somit zumindest ein partielle Substitution auch schon aus heutiger Sicht möglich [1].

In einer Vielzahl an vorangegangenen Untersuchungen von im Fischer-Tropsch Verfahren hergestellten Kraftstoffen konnten erhebliches Potenzial zur Verringerung von Schadstoff-Rohemissionen und der Verminderung des beim Dieselmotor problematischem Russ-NOX-Tradeoffs nachgewiesen werden ([26], [27], [28], [29] u.v.a.). Dabei waren die Eigenschaften dieser Kraftstoffe zumeist als hauptsächlich paraffinisch, nahezu schwefel- und aromatenfrei und als von hoher Zündwilligkeit spezifiziert.

Nun erlaubt die Fischer-Tropsch Synthese aber die Reaktionsprodukte gezielt zu beeinflussen und einen an die dieselmotorische Verbrennung optimal angepassten Kraftstoff zu definieren. Daraus leitet sich die Fragestellung der vorliegenden Arbeit ab: Die Identifikation der

1

entsprechenden, das Brenn- und Emissionsverhalten kennzeichnenden Kraftstoffparameter, die durch die Prozessführung der Fischer-Tropsch Synthese beeinflussbar sind.

Dazu wurde eine im Rahmen des Forschungsvorhabens "Future Fuels for Diesel Engines", welches durch die Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) beauftragt wurde, eine Kraftstoffmatrix bestehend aus sieben synthetischen Kraftstoffen mit unterschiedlichen, Merkmal prägenden Komponenten definiert. Ergänzt durch einen, zu Vergleichszwecken herangezogenen Referenzkraftstoff (Zertifizierungsdiesel) wurden diese sowohl motorisch als auch hydraulisch und optisch untersucht.

Ziel dieser Abhandlung ist es also, Hinweise auf die optimale Zusammensetzung synthetischer Kraftstoffe für konventionelle Diesel-Brennverfahren zu geben. Dabei werden, unter Zuhilfenahme der Grundlagenuntersuchungen, Erkenntnisse über die Wirkmechanismen dargestellt, die das bei den Motorversuchen dokumentierte, unterschiedliche Verhalten der einzelnen Kraftstoffe beeinflussen.

2 Einführung in Synthetische Kraftstoffe

Brennstoffe können grundsätzlich anhand des zur Herstellung verwendeten Ausgangstoffs in die drei Kategorien fossil, regenerativ und chemisch eingeteilt werden. Eine weitere Kategorisierung ist durch den Aggregatszustand (fest, flüssig, gasförmig) möglich, in dem sich der Brennstoff für den jeweiligen Einsatzzweck befindet. Die Brennstoffe auf chemischer Basis beinhalten den zur Umsetzung benötigten Oxidator bereits und sind deshalb nicht auf weitere Sauerstoffzufuhr angewiesen. Sie finden vorwiegend als Raketentreibstoff oder Sprengstoffe Verwendung. Als Brennstoffe in Feuerungen und Fahrzeugantrieben kommen derzeit überwiegend Kohlenwasserstoffe aus fossilen Quellen in Betracht, die im Laufe von Jahrmillionen aus pflanzlichen und tierischen Ablagerungen entstanden sind. Mittelfristig kann davon ausgegangen werden, dass Brennstoffe auf synthetischer Basis, wie beispielsweise Syngas, Wasserstoff oder Alkohole, als Energieträger bzw. Energiespeicher an Bedeutung gewinnen werden [2].

Als synthetische Kraftstoffe werden im dieselmotorischen Umfeld zumeist flüssige Kraftstoffe bezeichnet, die mittels des ursprünglich in den 1920er Jahren in Deutschland entwickelten Fischer-Tropsch-Verfahrens aus Kohlenmonoxid und Wasserstoff synthetisiert werden. Damals wurde das Verfahren angewandt, um das an Erdöl arme Deutschland in Kriegszeiten mit Treibstoff zu versorgen. Als Rohstoff wurde Kohle verwendet, die in ausreichendem Maß zur Verfügung stand. Aufgrund des im Vergleich zur Raffination von Erdöl unrentablen Verfahrens, wurde die großtechnische Produktion nach dem Ende des 2. Weltkriegs wieder eingestellt. Während der Ölkrise in den 1970er Jahren keimte das Interesse wieder auf, das aber mit dem Fall des Rohölpreises unter 20\$ pro Barrel zu Anfang der 1980er wieder verflachte. Eine Ausnahme stellt Südafrika dar, das aufgrund seiner geringen Ölvorkommen ebenfalls auf Importe angewiesen ist. Hier wurde politisch motiviert 1955 die erste moderne Coal-to-Liquid (CtL) Anlage von SASOL (Suid Afrikaanse Steenkool en Olie) in Betrieb genommen. In den 1980er Jahren wurden weitere Anlagen (Sasol II und III) eingeweiht und der Betrieb um den Rohstoff Ergas (Gas-to-Liquid – GtL) erweitert [3]. Sasol wurde zum Weltmarktführer für XtL-Technologien und erbaute weitere Werke in Katar und China wo sowohl Ottokraftstoffe, Ausgangsprodukte für die chemische Industrie und Kraftstoffe für die Dieselmotorische Anwendung hergestellt werden. Durch den Mineralölkonzern Shell wurde 1993 eine GtL-Anlage in Bintulu, Malaysia in Betrieb genommen wo das von Shell entwickelte SMDS (Shell Middle Destilate Synthesis) Verfahren ebenso wie in der neuesten Anlage in Katar zum Einsatz kommt [4]. Vor dem Hintergrund der schärfer werdenden CO₂-Diskussion und dem Umstand, dass die Ausgangsbasis für das Synthesegas nahezu von jedem Kohlenwasserstoffträger verwendet werden kann, wird vermehrt auch auf Biomasse als Rohstoff gesetzt. Unter Beteiligung der Firmen Daimler AG und Volkswagen AG wurden durch die Firma Choren Pilotanlagen erbaut, in denen Synthesegas durch eine Vergasung von Holzschnitzeln erzeugt. Dieses wird in einem weiteren Schritt mittels des SMDS-Verfahrens zu Biomass-to-Liquid (BtL) Kraftstoffen synthetisiert [5]. Letztgenanntes Verfahren stellt eine besonders interessante Art der Kraftstofferzeugung dar, da die Emissionen von klimarelevanten Gasen auf weniger als 10% der Emissionen bei dem Einsatz von fossilen Kraftstoffen reduziert werden können [1].

2.1 Kohlenwasserstoffverbindungen in Kraftstoffen

Der Fokus der vorliegenden Arbeit liegt auf Brennstoffen, die in Verbrennungskraftmaschinen zur Anwendung kommen und die mit Ausnahme der großmotorischen Anwendung als Kraftstoffe bezeichnet werden [6]. Konventionelle Otto- und Dieselkraftstoffe auf Mineralölbasis sind Gemische aus jeweils mehr als 200 Kohlenwasserstoffverbindungen, wobei die Zusammensetzung, d.h. der Anteil der jeweiligen Kohlenwasserstoffe das motorische Verhalten entscheidend beeinflusst. Die Ursache der Vielfalt der Kohlenwasserstoffverbindungen ist im vierwertigen Kohlenstoff zu finden, der die Fähigkeit besitzt stabile Ketten zu bilden [7]. Dadurch ist eine Vielzahl chemischer Strukturen möglich. Grundlegend werden ketten- und ringförmige Strukturen unterschieden, deren Eigenschaften sich im Weiteren durch die Art der Bindungen und der Verzweigungen maßgeblich unterscheiden. Neben reinen Kohlenwasserstoffen, haben sauerstoffhaltige Verbindungen (Alkohole, Ether, Ester) als Kraftstoffkomponenten an Bedeutung gewonnen und werden im Folgenden gleichfalls dargestellt.

Die **Paraffine** bzw. nach IUPAC benannten Alkane sind kettenförmig aufgebaute Kohlenwasserstoffe, die ausschließlich über Einfach-Bindungen verfügen. Folglich ist in Paraffinen die größtmögliche Anzahl an Wasserstoffatomen gebunden und sind damit gesättigt. Charakteristisch ist die relative Reaktionsträgheit; so reagieren sie aufgrund der unpolaren C-Cund der nur schwach polaren C-H-Bindung nicht mit Säuren, Basen und Reduktionsmitteln. Auch gegenüber vielen Oxidationsmitteln sind sie innert, reagieren aber mit Sauerstoff (Verbrennung) [7]. Es wird zwischen Normalparaffinen (n-Paraffine bzw. n-Alkane) mit unverzweigter Struktur und Iso-Paraffinen (Iso-Alkanen) unterschieden, wobei Position und Anzahl der Verzweigungen die Stoffeigenschaften maßgeblich beeinflussen [6]. Die Alkane C₁ bis C₄ sind bei Raumtemperatur gasförmig, C₅ bis C₁₆ sind flüssig und die höheren Glieder der Reihe liegen als wachsförmige Festsubstanzen vor. Die allgemeine Summenformel der Paraffine lautet C_nH_{2n+2}[7], [8].



Abbildung 2-1: n-Heptan



Abbildung 2-2: 2,2,4 Trimethylpentan (iso-Oktan)

Olefine (bzw. Alkene) besitzen ebenfalls eine kettenförmige Struktur. Sie enthalten C-Atome, die statt wie bei den Paraffinen vier, nur drei Nachbaratome gebunden haben. Die Valenz von vier wird dadurch erreicht, dass ein benachbartes C-Atom doppelt gebunden ist. Da an diesen Doppelbindungen weitere Wasserstoffatome aufnehmen werden können, bezeichnet man Olefine als ungesättigt. Olefine sind im Allgemeinen reaktiver als Paraffine, da der gesättigte Zustand angestrebt wird. Die allgemeine Summenformel lautet $C_nH_{2n+2-2y}$ (mit y = Anzahl der Doppelbindungen), wodurch deutlich wird, dass Olefine ein, in Abhängigkeit der Anzahl der Doppelbindungen, niedrigeres H/C-Verhältnis aufweisen als Paraffine [7]. Analog zu den Paraffinen werden auch bei den Olefinen unverzweigte "n-" und verzweigte "iso-" Spezies unterschieden. Die niederen Alkene mit bis zu vier C-Atomen sind bei Raumtemperatur Gase mit einem charakteristischen durchdringenden Geruch. Bis zu etwa zwölf C-Atomen sind sie farblose Flüssigkeiten.



Abbildung 2-3: Hexen



н—с≡с—н

Abbildung 2-4: 3-Methylbutadien 1,3

Ungesättigte kettenförmige Kohlenwasserstoffe mit Dreifachbindungen werden als **Alkine** oder Acetylene bezeichnet. Die Dreifachbindung ist im Gegensatz zur Doppelbindung nicht sehr stabil. Alkine haben dieselbe Summenformel C_nH_{2n-2} wie Diolefine [9].







Naphtene (bzw. Zyklo-Alkane) sind charakterisiert durch die ringförmige Anordnung der Kohlenstoff-Atome. Da die Kohlenstoffatome einfach gebunden sind, handelt es sich um "gesättigte" Strukturen. Aus der ringförmigen Struktur folgt ein gegenüber den Paraffinen weitaus verbessertes Fließverhalten bei Kälte, während die Zündwilligkeit signifikant niedriger ist. Napthene lassen sich durch Abspalten von Wasserstoffatomen, also durch erzeugen von Doppelbindungen, in ringförmige Olefine verwandeln, die in ihrem chemischen Verhalten den kettenförmig gebauten Olefinen ähneln [10]. Die Summenformel der Napthene lautet C_nH_{2n} [6].





Abbildung 2-7: Zyklopropan

Abbildung 2-8: Zyklohexan

Die Familie der **Aromaten** bzw. der Benzol-Derivate basiert auf einem Ring aus sechs Kohlenstoffatomen, wobei an jedes Kohlenstoffatom des Rings nur ein Wasserstoffatom oder ein Substituent gebunden ist. Die weiteren sechs Valenzelektronen bilden eine sogenannte hybride Bindung ohne festen Ort [2]. Diese wird auch als konjugierte Doppelbindung bezeichnet, da sich Einfach- und Doppelbindungen zwischen den Ringatomen quasi abwechseln und ständig ineinander übergehen. Aufgrund dieser Tatsache und der Kompaktheit des Benzolrings ist dieser sehr stabil – Aromaten haben im Vergleich der Kohlenwasserstoffe die geringste Zündwilligkeit. Benzolringe können zu sogenannten Polyzyklischen Aromaten kombiniert (PAK, PAH) werden und es können zusätzlich Seitenketten angelagert sein [2]. Für die Aromaten existiert keine allgemeingültige Summenformel.





Abbildung 2-9: Benzol

Abbildung 2-10: 1,2 Dimetyhlbenzol

Sauerstoffhaltige Kohlenwasserstoffe sind in herkömmlichen Kraftstoffen auf fossiler Basis nicht enthalten, da fossile Primärenergieträger Produkte anaerober Zersetzung von organischem Material darstellen [8]. Jedoch finden Alkohole seit einiger Zeit Anwendung als Alternativkraftstoff in der ottomotorischen Verbrennung und werden hier in unterschiedlichen Anteilen zugemischt oder sogar als Reinkraftstoffe verwendet. Aktuell steigt das Interesse an der Verwendung von Alkoholen als Kraftstoffkomponente für die dieselmotorische Anwendung, da in naher Vergangenheit günstige Einflüsse auf das Emissionsverhalten von Dieselmotoren dokumentiert wurden [11].

Alkohole sind Kohlenwasserstoffverbindungen, die als funktionelle Gruppe eine oder mehrere OH-Gruppen (Hydroxy-Gruppen) gebunden haben. In Abhängigkeit der Anzahl der gebundenen Hydroxy-Gruppen wird in ein-, zwei- und dreiwertige Alkohole eingeteilt [12]. Aufgrund der hohen Zündunwilligkeit und des niedrigen Flammpunkts kurzkettiger Alkoholmoleküle sind für die dieselmotorische Anwendung langkettige Alkohole vorzuziehen.



Bei **Ethern** handelt es sich um Kohlenwasserstoffverbindungen, die über eine oder mehrere Sauerstoffbrückenbindungen im Molekül verfügen. Sie werden großtechnisch bei der Reaktion von Alkoholen und Olefinen gewonnen und zur Erhöhung der Klopffestigkeit als Zumischkomponente zu Benzin eingesetzt. Die allgemeine Strukturformel ist R-O-R.

Ester stellen eine Stoffgruppe organischer Verbindungen dar, die durch die Reaktion eines Alkohols und einer Carbonsäure unter Abspaltung von Wasser über Kondensation entstehen. Um aus Fetten und Ölen dieselähnliche Kraftstoffe (Biodiesel) zu gewinnen werden diese verestert [2]. Dabei wird vor allem die Viskosität von Pflanzenölen bzw. Fetten herabgesetzt und somit eine motorische Anwendung ermöglicht.

2.2 Physikalisch-chemische Eigenschaften

Das grundlegende Unterscheidungsmerkmal zwischen Otto- und Dieselkraftstoffen ist auf deren ersten Herstellungsschritt, der atmosphärischen Destillation aus Rohöl zurückzuführen. Hierbei werden die Kohlenwasserstoffe anhand ihrer Siedepunkte getrennt. Das entwässerte und entsalzte Rohöl wird auf etwa 400°C erwärmt; die verdampften Anteile kondensieren in Abhängigkeit Ihrer Stoffeigenschaften an den verschiedenen Böden des Turms. Somit sind die Eigenschaften der erhaltenen Kraftstoffe in erster Linie von der Siedetemperatur abhängig. Durch nachgeschaltete Raffinerieprozesse wie dem Hydrofining (HF) und dem Hydro-Cracken sind diese gezielt beeinflussbar. In Abbildung 2-13 sind die Raffinationsprozesse zur Kraftstofferzeugung vereinfacht dargestellt. Daraus wird die für Dieselkraftstoffe verwendete Bezeichnung "Mitteldestillat" verdeutlicht.



Abbildung 2-13: Schematischer Raffinerieprozess nach [13].

Das **Siedeverhalten** ist nun maßgeblich durch die Anzahl der im Molekül gebundenen C-Atome bestimmt während der Molekülaufbau von untergeordneter Bedeutung ist. Eine Ausnahme stellen hier die Polyaromaten dar, die bei gleicher Anzahl an Kohlenstoffatomen signifikant höhere Temperaturen benötigen um in den gasförmigen Zustand überzugehen (siehe Abbildung 2-14). Für konventionelle Dieselkraftstoffe ist ein Siedebereich von 180 – 360°C charakteristisch, d.h. Strukturen im Bereich von 10 – 20 Kohlenstoffatomen pro Molekül.



Abbildung 2-14: Siedetemperatur in Abhängigkeit der Anzahl der im Molekül gebundenen Kohlenstoff Atome [6].

Der **Heizwert** von (Mono-) Aromaten verhält sich anders als der der nicht-aromatischen Kohlenwasserstoffe (Abbildung 2-15): Während der Heizwert der Paraffine, Olefine und Naphtene mit höherer Anzahl an C-Atomen pro Molekül abnimmt, steigt der der Aromaten. Dies ist auf das H/C-Verhältnis zurückzuführen. Mit zunehmender Kettenlänge nimmt der massenbezogene Wasserstoffanteil ab, während bei Monoaromaten mehr C-Atome pro Molekül einen höheren Anteil Seitenketten und damit eine höhere pro Kohlenstoffatom gebundene Anzahl an Wasserstoffatomen bedeutet. Die unteren Heizwerte von flüssigen Kohlenwasserstoffen liegen im Bereich von 40 (Benzol) bis 45 (n-Pentan) MJ/kg [6].

Eine weitere wesentliche Kraftstoffeigenschaft ist die **Dichte**. Dichte und Heizwert definieren den Energiegehalt je Volumeneinheit und damit den Raumbedarf des benötigten Energiespeichers. Generell nimmt die Dichte von Kohlenwasserstoffen der Anzahl an C-Atomen zu. Allerdings ist eine ausgeprägte Abhängigkeit von der Struktur der Moleküle gegeben. Ringförmige Moleküle wie Naphthene und Aromaten haben infolge des kompakten Molekülaufbaus die höchsten Dichten. Die Dichte von Aromaten ist annähernd unabhängig von der Anzahl gebundener Kohlenstoffatome [12], siehe Abbildung 2-16. Niedere Alkohole sind in Bezug auf die Dichte wasserähnliche, leichtbewegliche Flüssigkeiten während höhere Alkohole dickflüssige, den rein-Kohlenwasserstoffen ähnliche Flüssigkeiten sind [14].



Abbildung 2-15: Heizwert von Kohlenwasserstoffen [6].



Die **Zähigkeit** oder auch Viskosität ist die Eigenschaft eines fließfähigen Stoffsystems bei einer Verformung eine Spannung aufzunehmen, die nur von der Verformungsgeschwindigkeit abhängig ist [50]. Es wird zwischen dynamischer Viskosität µ und kinematischer Viskosität unterschieden. Letztere ist der Quotient aus dynamischer Viskosität µ und der Dichte p. Im Allgemeinen nimmt die Zähigkeit eines Kraftstoffes mit steigender Dichte und steigender Anzahl an Kohlenstoffatomen pro Molekül zu. Auswirkung einer zu hohen Viskosität ist eine schlechte Kraftstoffzerstäubung im Brennraum. Der zu viskose Kraftstoff führt zu großen Tröpfchendurchmessern (Sauter Mean Diameter - SMD), die einen lokale schlechte Durchmischung mit Luft (Air Entrainment) zur Folge haben. Eine zu niedrige Viskosität ist speziell bei Dieselmotoren bezüglich der Schmierfähigkeit und Förderbarkeit von Bedeutung [40].

Eine maßgebliche Eigenschaft zur Beurteilung der Eignung eines Kraftstoffs für und das Verhalten in der motorischen Anwendung ist die Neigung des Kraftstoff-Luft-Gemisches zur Selbstzündung, die als **Zündwilligkeit** bezeichnet wird. Diese hängt stark von der Länge der Kohlenwasserstoffverbindungen ab (siehe Abbildung 2-17). Generell nimmt die Zündwilligkeit der Kohlenwasserstoffe mit steigender Kohlenstoffanzahl zu [6]. Während kurzkettige n-Paraffine hohe Zündunwilligkeit auf aufweisen, steigt diese bei längeren Ketten auf Grund der geringeren strukturbedingten Bindungskräfte im Molekül stark an. Besitzen die einfach gebundenen Kohlenstoffanzahl und die Zündneigung sinkt. Olefine haben aufgrund ihrer Doppelbindung eine höhere Stabilität, sodass eine gegenüber vergleichbaren n-Paraffinen niedrigere Zündwilligkeit besteht. Napthene besitzen im Vergleich zu den entsprechenden Paraffinen eine gleichfalls geringere Zündneigung, die der der Olefine ähnlich ist. Den zünd-unwilligsten Charakter der Kohlenwasserstoffe haben die Aromaten. Die kompakte Molekül-

struktur ergibt thermisch sehr stabile Moleküle, die schwer entzündbar sind und eine hohe Zündtemperatur benötigen [50]. Kurzkettige Alkohole sind ebenfalls sehr Zündunwillig was Ihre Eignung für die ottomotorische Anwendung verdeutlicht. Für die konventionelle dieselmotorische Verbrennung sind deshalb langkettige Alkohole vorzuziehen, die eine entsprechend höhere Selbstzündneigung besitzen [11].



Abbildung 2-17: Cetanzahlen von Kohlenwasserstoffen in Abhängigkeit der chemischen Strukturen und der Anzahl der Kohlenstoffatome.

Da die Zündwilligkeit in der motorischen Anwendung physikalisch nicht direkt quantifiziert werden kann, hat sich eine Kennzahl zu deren Beschreibung etabliert. Die Cetanzahl (CZ) wird anhand standardisierter Verfahren in Einzylinder-Zertifizierungsmotoren bestimmt. Dabei kommen zwei Verfahren zum Einsatz: Weltweit wird der CFR-Motor entsprechend ASTM D613-93

[15] bzw. DIN EN ISO 5165 [16] verwendet. In Deutschland findet zudem der BASF-Motor nach DIN 51773 ([17], [18]) Anwendung. Gemein ist beiden Verfahren, dass der Zündverzug als Maß für die Zündwilligkeit herangezogen wird. Die eigentliche Cetanzahl ergibt sich anhand eines Vergleichs mit einem Gemisch aus den Monomeren n-Cetan ($C_{16}H_{34}$, paraffinisch, sehr zündwillig, definitionsgemäß: CZ=100, Abbildung 2-18) und α -Metyhlnaphtalin ($C_{11}H_{10}$, polyaromatisch, schwer entflammbar, definitionsgemäß: CZ = 0, Abbildung 2-19). Benötigt beispielsweise ein Kraftstoff die gleichen Bedingungen zum erreichen einer definierten Zündverzugszeit wie ein Gemisch aus 52 vol.-% Cetan und 48 vol.-% α -Metyhlnaphtalin wird ihm die Cetanzahl 52 zugeordnet.



Abbildung 2-18: n-Hexadekan (Cetan)



Abbildung 2-19: α-Methylnaphtalin

Das CFR- und das BASF-Verfahren unterscheiden sich nun bezüglich der Motorgeometrie, den Untersuchungsbedingungen und der Art, wie die Zündverzugszeit konstant gehalten wird (). Dies stellt auch den gravierendsten Unterschied zwischen beiden Verfahren dar. Während beim CFR-Motor das Verdichtungsverhältnis über eine Änderung des Vorkammervolumens variiert wird, wird beim BASF-Motor die Ansaugluft gedrosselt. Trotz thermodynamisch unterschiedlicher Auswirkungen der beiden Methoden, sind die Unterschiede zwischen den aus den verschiedenen Verfahren bestimmten Cetanzahlen relativ gering.

		Einheit	CFR-Verfahren	BASF-Verfahren
	Norm	-	DIN EN ISO 5165	DIN51773
Motor	Hubraum	CM ³	631	850
	Bohrung	mm	82,6	95
	Hub	mm	114.3	120
	Verdichtung	-	variabel (8-36)	18,2
	Drehzahl	U/min	900	1000
	Ansauglufttemperatur	°C	66	Umgebung
	Einspritzbeginn	°KW v.OT	13	20
iet	Brennbeginn	°KW v.OT	0	0
Setr	Zündverzug	°KW	13	20
	Einspritzdruck	bar	103	124
	Einstellung des Zündverzugs	-	Variation des Verdichtungsverhätnisses	Variation des Startdruck (Ansaugluftdrosselung)

Tabelle 2-1: CFR- und BASF-Verfahren zur Cetanzahlbestimmung.

Da beide Verfahren über, im Vergleich zu modernen Motoren veraltete Brennraumgeometrien, geringe Drehzahlen und nicht mehr aktuelle Einspritzsysteme verfügen, gehen die Meinungen zur Eignung der Charakterisierung von Kraftstoffen für aktuelle motorische Anwendungen anhand den in oben genannten Verfahren gewonnen Cetanzahlen auseinander. Gerade wenn Zündbeschleuniger eingesetzt werden, verhalten sich Kraftstoffe anders als es die Cetanzahl vermuten lässt [50]. Der stöchiometrische **Luftbedarf** ist die Luftmasse die benötigt wird, um eine vollständige Verbrennung des Kraftstoffes zu gewährleisten. Dieser ist definiert durch:

$$\begin{split} L_{st} &= \frac{m_{Lst}}{m_{K}} \end{split} \tag{2.1} \\ \text{Mit} & m_{Lst} & \dots & \text{Luftmasse bei vollständiger Verbrennung} \\ & m_{K} & \dots & \text{Kraftstoffmasse} \end{split}$$

Der stöchiometrische Luftbedarf kann aus den Masseanteilen der im Kraftstoff enthaltenen chemischen Elemente bestimmt werden. Für einen allgemeinen Brennstoff aus Kohlenwasserstoffen oder Alkoholen mit der Zusammensetzung $C_xH_yS_qO_z$ ergeben sich dann folgende Einzelreaktionen mit den Reaktionsprodukten Kohlenstoffdioxid, Wasser und Schwefeldioxid ([19], [52]):

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{C} + \mathbf{x} \cdot \mathbf{O}_2 \to \mathbf{x} \cdot \mathbf{CO}_2 \tag{2.2}$$

$$\frac{y}{2} \cdot H_2 + \frac{y}{4} \cdot O_2 \rightarrow \frac{y}{2} \cdot H_2 O$$
(2.3)

$$q \cdot S + q \cdot O_2 \rightarrow q \cdot SO_2 \tag{2.4}$$

Da trotz großer Anzahl komplexer Zwischenreaktionen die Reaktionsprodukte bei einer vollständigen Verbrennung nahezu identisch sind, kann für die Verbrennung eines beliebigen Kraftstoffs folgende allgemeine Reaktionsgleichung aufgestellt werden ([19], [52]):

$$C_{x}H_{y}S_{q}O_{z} + \left(x + \frac{y}{4} + q - \frac{z}{2}\right)O_{2} = x \cdot CO_{2} + \frac{y}{2} \cdot H_{2}O + q \cdot SO_{2}$$
 (2.5)

Die stöchiometrischen Koeffizienten x, y, q und z können unter Einbeziehung der Molaren Massen M_i aus den prozentualen Anteilen der im Kraftstoff gebundenen Atome Kohlenstoff (c), Wasserstoff (h), Schwefel (s) und Sauerstoff (o) abgeleitet werden:

$$x = \frac{M_{\kappa}}{M_{c}}c$$
 $y = \frac{M_{\kappa}}{M_{H}}h$ $q = \frac{M_{\kappa}}{M_{s}}s$ $z = \frac{M_{\kappa}}{M_{o}}o$ (2.6)

Unter Berücksichtigung des Massenanteils von Sauerstoff in Luft $\xi_{O2, L} = 23,2\%$ [6] ergibt sich der stöchiometrische Luftbedarf zu:

$$L_{st} = \frac{1}{\xi_{o_2,L}} \cdot \frac{m_{O_2,st}}{m_{K}} = \frac{1}{\xi_{O_2,L}} \cdot \frac{M_{O_2}}{M_{K}} \cdot \frac{n_{O_2,st}}{n_{K}}$$
(2.7)

Aus Gleichung (2.5) folgt die benötigte Molzahl $n_{O2,st}$ für die vollständige Umsetzung von einem Mol Kraftstoff (n_{K} =1):

$$n_{O_2,st} = x + \frac{1}{4}y + q - \frac{1}{2}z$$
 (2.8)

Damit ist es möglich den stöchiometrischen Luftbedarf direkt aus den Massenanteilen der jeweiligen im Kraftstoff gebundenen Atome zu berechnen:

$$L_{st} = \frac{1}{0,232} \cdot \left(\frac{M_{O_2}}{M_C} \cdot c + \frac{1}{4} \frac{M_{O_2}}{M_H} \cdot h + \frac{M_{O_2}}{M_S} \cdot s - o \right)$$
(2.9)

$$L_{st} = \frac{1}{0,232} \cdot (2,664 \cdot c + 7,937 \cdot h + 0,998 \cdot s - 0)$$
(2.10)

Aus Gleichung wird ersichtlich, dass das H/C-Verhältnis entscheidenden Einfluss auf den Luftbedarf hat. Je größer der im Kraftstoff gebundene Anteil Wasserstoff, desto mehr Luft bzw. Sauerstoff wird für die vollständige Umsetzung benötigt. Ist Sauerstoff im Kraftstoff enthalten, ist der Bedarf an Luftsauerstoff naheliegender Weise geringer.

Konventionelle Dieselmotoren werden immer überstöchiometrisch betrieben. Allerdings ist die Kenntnis der stöchiometrischen Verhältnisse speziell im Hinblick auf die Russemissionen von entscheidender Bedeutung. Steht zu wenig Sauerstoff zur Verfügung ist eine Nachoxidation des während der Verbrennung gebildeten Russes nicht möglich und der abgasseitige Russausstoß steigt exponentiell an.

2.3 Gesetzliche Anforderungen

Die in Europa geltenden Anforderungen an die Eigenschaften von Kraftstoffen, die unter der Handelsbezeichnung "Diesel" vertrieben werden dürfen, sind in der Norm DIN EN 590 [20] (deutsche Version) spezifiziert. Darin sind Mindestanforderungen an die Kraftstoffqualität aufgeführt, die nicht unter bzw. Überschritten werden dürfen ().

Eine Cetanzahl-Untergrenze von 51 soll das Kaltstartverhalten sicherstellen. Weiterhin haben niedrige Cetanzahlen für ein erhöhtes Verbrennungsgeräusch sowie erhöhte teil- und unverbrannte Emissionen sowie höhere Stickoxidemissionen (bei konventionellen Brennverfahren) zur Folge [50]. Der Cetanindex ist eine alternative Bestimmungsmethode der Zündwilligkeit, die rein rechnerisch auf Basis von empirischen Erhebungen aus Siedeverhalten und Dichte erfolgt. Die Kraftstoffdichte selbst ist in engen Grenzen festgelegt. Dies liegt in der Ursache begründet, dass aktuelle Serieneinspritzsysteme definierte Volumina zumessen und somit Unterschiede in der Dichte zu unterschiedlichen in den Brennraum eingebrachten Kraftstoffmassen führen würden. Konventionelle Kraftstoffe höherer Dichte haben somit eine höhere Motorleistung aber auch höhere Russemissionen zur Folge. Niedrige Dichte hat die gegensätzlichen Auswirkungen. In der letzten Revision der EN 590 wurde die Obergrenze der Dichte von 860 auf 845 kg/m3 herabgesetzt um den Russausstoß zu begrenzen [20]. Synthetische Dieselkraftstoffe auf XtL-Basis unterschreiten üblicherweise die Dichte-Untergrenze, können diesen Nachteil aber aufgrund des höheren H/C-Verhältnisses und des damit verbundenen höheren gravimetrischem Heizwert kompensieren [26].

Eigenschaften	Einheit	Grenzwerte		Prüfverfahren ^a	
		Minimum	Maximum	(Siehe Abschnitt 2)	
Cetanzahl ^o		51,0	-	EN ISO 5165	
Cetanindex		46,0	-	EN ISO 4264	
Dichte bei 15 °C °	kg/m ³	820	845	EN ISO 3675, EN ISO 12185	
Polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe ^{d, e}	% (<i>m/m</i>)	-	11	EN 12916	
Schwefelgehalt ^r	mg/kg	-	350 (bis 2004-12-31) oder 50,0	EN ISO 20846, EN ISO 20847, EN ISO 20884	
			10,0	EN ISO 20846, EN ISO 20884	
Flammpunkt	°C	über 55	-	EN ISO 2719	
Koksrückstand ⁹ (von 10 % Destillationsrück- stand)	% (<i>m/m</i>)	-	0,30	EN ISO 10370	
Aschegehalt	% (<i>m/m</i>)	-	0,01	EN ISO 6245	
Wassergehalt	mg/kg	-	200	EN ISO 12937	
Gesamtverschmutzung	mg/kg	-	24	EN 12662	
Korrosionswirkung auf Kupfer (3 h bei 50 °C)	Korrosions- grad	Klasse 1		EN ISO 2160	
Oxidationsstabilität	g/m³	-	25	EN ISO 12205	
Lubricity, korrigierter "wear scar diameter" (wsd 1,4) bei 60 °C	μm	-	460	EN ISO 12156-1	
Viskosität bei 40 °C	mm²/s	2,00	4,50	EN ISO 3104	
Destillation ^{n,1} % (V/V) aufgefangen bei 250 °C % (V/V) aufgefangen bei 350 °C 95 % (V/V) aufgefangen bei	% (V/V) % (V/V) °C	85	< 65 360	EN ISO 3405	
Fettsäure-Methylestergehalt	% (V/V)	-	5	EN 14078	
ANMERKUNG Fett gedruckte Anf	orderungen stam	men aus der	Europäischen Kraftstof	f-Direktive 98/70/EG [1] einschließlich	
Ergänzung 2003/17/EG [2].					
 Siehe auch 5.6.4 					
° Siehe auch 5.6.2	Siehe auch 5.6.2				
Für die Anwendung dieser Europäischen Norm werden polycyclische aromatische Kohlenwasserstoffe definiert als der Gesamtgehalt an aromatischen Kohlenwasserstoffen abzüglich des Gehaltes an mono-aromatischen Kohlenwasserstoffen, beide Gehalte nach EN 12916 bestimmt.					
EN 12916 kann nicht zwischen polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffen und Fettsäure-Methylestem (FAME) unterscheiden. Falls FAME in Dieselkraftstoff enthalten ist, erzeugt es einen Fehler, der den Wert der polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffe erhöht. Ein verbessertes Prüfverfahren für die Bestimmung der polycyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffe ist bei CEN/TC 19 in Vorbereitung.					
^f Siehe auch 5.6.3	Siehe auch 5.6.3				
⁹ Siehe auch 5.4.2	Siehe auch 5.4.2				
Für die Berechnung des Cetanindex werden ebenfalls die Temperaturangaben für 10 %, 50 % and 90 % (V/V) benötigt.					
Die Destillationsgrenzwerte bei 200 °C und 300 °C geiten für einen dem EU gemeinsamen Zolltant entsprechenden Dieselkraftstoff. FAME muss die Anforderungen nach EN 14214 erfüllen.					
FAMIL muss de Antorderungen nach EN 14214 endien.					

Tabelle 2-2: Anforderungen an die Eigenschaften von Dieselkraftstoffen nach EN 590 [20].

Der Polyaromatengehalt ist begrenzt, da dieser für die Russbildung verantwortlich gemacht wird und die Zündwilligkeit des Dieselkraftstoffes herabsetzt [50].

Die negativen Auswirkungen von im Kraftstoff enthaltenem Schwefel führten ebenfalls zu der Einführung einer Obergrenze, die bei der letzten Überarbeitung nochmals herabgesetzt wurde. Der im Rohöl in unterschiedlichen Konzentrationen enthaltene Schwefel muss entfernt werden, um Schwefeldioxidemissionen, erhöhte Partikelemissionen, Motorölversäuerung und Katalysatorschädigungen zu vermeiden. Problematisch ist die Verschlechterung der Schmierfähigkeit, die auf die ungewollte Entfernung polarer Substanzen bei der Entschwefelung zurückzuführen ist. Diese ist in der dieselmotorischen Anwendung von hoher Bedeutung, da speziell Komponenten des Einspritzsystems moderner Motoren einen hohen Schmierbedarf haben und dieser durch den Kraftstoff sichergestellt werden muss. Daher muss durch entsprechende, die Schmierfähigkeit verbessernde Additive Rechnung getragen werden.

Der Flammpunkt ist in erster Linie eine sicherheitsrelevante Größe. Es handelt sich um die Angabe der niedrigsten Temperatur bei Umgebungsdruck, bei der in einem geschlossenen Gefäß ein durch Fremdzündung entflammbares Gasgemisch entstehen kann. Er hat keine Aussagekraft für die motorische Anwendung. Allerdings begrenzt er den Gehalt an leicht flüchtigen Komponenten, was eine Normung des Siedebeginns überflüssig macht [50]. Dies ist im Besonderen bei der Verwendung von kurzkettigen Alkoholen als Kraftstoffkomponente kritisch zu beurteilen, da diese den Flammpunkt schon in geringer Konzentration signifikant herabsetzen [11].

Die genormten Kriterien Koksrückstand, Aschegehalt, Gesamtverschmutzung und Wassergehalt können unter dem Begriff Reinheit zusammengefasst werden. Durch die Begrenzung der maximalen Verunreinigung sollen hauptsächlich die Fließfähigkeit und die Vermeidung von Verbrennungsnebenprodukten sichergestellt werden [21].

Die Korrosionswirkung auf Kupfer ist insofern problematisch, dass gelöstes Kupfer katalytisch aktiv ist und zur Bildung hochmolekularer Verunreinigungen im Kraftstoff führt. Zur Begrenzung der Korrosivität müssen ebenfalls entsprechende Additive eingesetzt werden [51].

Die Oxidationsstabilität ist im Hinblick auf die Langzeitlagerung von Interesse. Die Oxidation und Polymerisation findet vorzugsweise an ungesättigen Kraftstoffmolekülen (z.B. Olefinen) statt und kann zur Filterverstopfung führen. Durch geeignete Antioxidantien ist dem entgegenzuwirken.

Bezüglich von Viskositätsunterschieden sei auf den vorangegangen Abschnitt (2.2) "Physikalisch-chemische Eigenschaften" hingewiesen.

Weiterhin wird das Siedeende bzw. die Temperatur bei der 95% des Kraftstoffs verdampft ist, begrenzt. Liegt das Siedende bei hohen Temperaturen, kann dies aufgrund schlechter Gemischaufbereitung zu erhöhter Russbildung und Düsenverkokung durch Ablagerungsbildung (chemische Zersetzung schwerflüchtiger Kraftstoffkomponenten an der Düsenkuppe) führen [21].

Aktuell ist der maximal zulässige Biodieselanteil (Fettsäure-Methylester) auf 5 vol.-% begrenzt. Des Weiteren gibt es klimatisch abhängige Anforderungen, die in Abhängigkeit der Jahreszeit die Tiefstemperatur spezifizieren, bei der eine Filtrierbarkeit des Kraftstoffs noch gegeben ist (CFPP – Cold Filter Plugging Point) [20]. Hier ist vor allem die Klasse der Paraffine als problematisch zu sehen, da bereits bei geringen Minusgraden Paraffinkristalle ausfallen können, die die Fließfähigkeit des Kraftstoffs behindern. Wax-Anti-Settling Additive werden eingesetzt um diesem Problem zu begegnen.

2.4 Syntheseprozesse

Als Alternative zu erdölbasierten Kraftstoffe sind synthetische Kraftstoffe seit einiger Zeit Gegenstand des Interesses. Vor dem Hintergrund der Versorgungssicherheit, der Debatte um die Reduzierung von Treibhausgasen und der Forderung nach Schadstoffminderungen können Kraftstoffe auf synthetischer Basis einen Beitrag leisten, diesen Anforderungen zu begegnen. In der vorliegenden Arbeit liegt der Fokus auf dieselähnlichen Kraftstoffen die auf der Fischer-Tropsch Synthese basieren. Für die Herstellung dieser kann auf ein breites Spektrum an Rohstoffen zurückgegriffen werden, da nahezu jeder Kohlenwasserstoffträger zumindest theoretisch in Betracht kommt. Neben fossilen Energieträgern wie Kohle (Coal-to-Liquid – CTL) und Erdgas (Gas-to-Liquid – GTL) ist vergaste Biomasse (Biomass-to-Liquid – BTL) ein vielversprechender Ausgangstoff, da neben dem, unabhängig vom Ausgangsmaterial herstellbaren, hochwertigen Produkt auch die Kohlendioxidbilanz signifikant verbessert werden kann. Weiterhin bietet die Fischer-Tropsch Synthese die Möglichkeit, die für die motorische Verbrennung relevanten chemischen und physikalischen Eigenschaften gezielt zu beeinflussen und somit einen maßgeschneiderten Kraftstoff zu erzeugen [22].

Ausgangsprodukt der Synthese ist das Synthesegas, eine Mischung aus Kohlenmonoxid und Wasserstoff. Die **Synthesegaserzeugung** erfolgt prinzipiell durch partielle Oxidation, also durch Einbringung von Sauerstoff und durch Dampfreformierung mit Hilfe von Wasserdampf der gasförmigen Edukte nach folgenden Reaktionsgleichungen.

$$C_n H_m + \frac{n}{2} \cdot O_2 \rightarrow n \cdot CO + \frac{m}{2} \cdot H_2$$
 (exotherm) (2.11)

$$C_n H_m + n \cdot H_2 O \rightarrow n \cdot CO + \left(n + \frac{m}{2}\right) \cdot H_2$$
 (endotherm) (2.12)

Die Erzeugung kann im Fall von Erdgas und der Pyrolyse von Biomasse autotherm erfolgen, d.h. die erforderliche Energie wird aus dem Prozess selbst oder einem anderen Prozessschritt rekuperiert. Im Fall von Kohle ist die vorgeschaltete Vergasung stark endotherm und fordert einen hohen Energieaufwand, der sich in einer schlechten CO₂-Bilanz niederschlägt [1].



Abbildung 2-20: Schematisches Prinzip der Kraftstoffsynthese.

Am Beispiel des von der Firma Choren patentierten CarboV-Verfahrens (Abbildung 2-21) soll nun die Synthesegaserzeugung aus Biomasse kurz zusammengefasst werden [5], während für eine Erläuterung der Verfahren auf Kohle- oder Erdgasbasis auf [23] verwiesen wird.

- Die klein gehäckselten Holzabfälle werden einem Niederdruckvergaser zugeführt, der die Biomasse bei 400-500°C und 4 bar Druck in teerhaltiges Schwelgas (Kohlenwasserstoffe) und Biokoks(Kohlenstoff) spaltet.
- Unter Zugabe von Sauerstoff und Wasserdampf wird das Schwelgas in die Brennkammer geleitet und dort teiloxidiert. Oberhalb des Ascheschmelzpunktes (1400°C) wird das Gas vorwiegend in H₂ und CO umgewandelt. Die hohen Temperaturen werden durch die dominant stattfindende exotherme Sauerstoffreaktion erreicht.
- Im nächsten Arbeitsschritt wird dem heißen Gasgemisch der zu Brennstaub zermahlene Biokoks zugeführt. Unter endothermer Reaktion mit Wasserdampf und dem Restsauerstoff wird das Gasgemisch auf 800°C abgekühlt und in ein heizwertreiches Rohgas umgewandelt. Die Restwärme wird an einem Wärmetauscher abgegeben und zur Strom- und Wasserdampferzeugung verwendet.
- Das Rohgas wird in weiteren Prozessschritten vom unverbranntem Biokoks befreit, der in den Kreislauf rückgeführt wird. Nach einem mehrstufigen Waschvorgang, der das Gas von Schwefel und anderen Schadstoffen befreit, kann das aufbereitete Synthesegas im Fischer-Tropsch-Verfahren zu Diesel und anderen flüssigen Kohlenwasserstoffen umgewandelt werden.



Abbildung 2-21: Synthesegaserzeugung nach dem CarboV-Verfahren der Firma Choren [5].

Aktuell finden bei der **Kraftstoffsynthetisierung** mittels des Fischer-Tropsch-Prozesses zwei verschiedene Synthesevarianten Anwendung: Der Hochtemperaturprozess (HTFT = High Temperature Fischer-Tropsch) findet bei einer Temperatur von 300-350°C statt und basiert auf einem Eisenkatalysator. Dabei werden hauptsächlich Benzin und kurzkettige Ole-fine hergestellt. Der Niedrigtemperaturprozess (LTFT = Low Temperature Fischer-Tropsch), der bei Temperaturen von 200-240°C stattfindet, wird zur Produktion von Diesel und langkettigen Paraffinen (Wachsen) verwendet und kann sowohl mit Eisen-, als auch mit Cobaltkatalysatoren betrieben werden [22]. Der grundlegende Reaktionsschritt ist die katalytische Hydrierung des Kohlenmonoxids mit Wasserstoff zu "CH₂-Bausteinen" und Wasser unter Drücken von 20 bis 80 bar [3].

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{CO} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{H}_2 \rightarrow \left(-\mathbf{CH}_2 - \right)_{\mathbf{n}} + \mathbf{n} \cdot \mathbf{H}_2 \mathbf{0}$$
(2.13)

Die Methylengruppe (CH2) stellt dabei ein Kettenglied des wachsenden Kohlenwasserstoffmoleküls dar. Daneben tritt vor allem bei der Verwendung von Eisen-Katalysatoren die sogenannte Wassergas-Shift Reaktion (WGS) auf. Dabei reagiert der gebildete Wasserdampf mit nicht verbrauchtem Kohlenmonoxid unter der Bildung von Wasserstoff.

$$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$$
 (2.14)

Die WGS Reaktion geht einen temperaturabhängigen Gleichgewichtszustand ein, der sich auf die benötigte Zusammensetzung der Edukte, also dem Verhältnis von Wasserstoff zu Kohlenmonoxid auswirkt. Als unerwünschte Nebenreaktion findet die Bildung von Methan statt, die aber durch eine geeignete Kombination aus Katalysator und Reaktionsbedingungen, also Druck und Temperatur, minimiert werden kann.

$$CO + 3H_2 \rightarrow CH_4 + H_2O \tag{2.15}$$

Der Prozess des Kettenwachstums und der Abbruchs der Kettenbildung können in Anlehnung an [22] wie folgt illustriert werden (Abbildung 2-22). Die in der Hauptreaktion gebildete Methylengruppe wird entweder schrittweise verlängert (Oligomerisation) oder sie verlässt die Katalysatoroberfläche durch Aufnahme oder Abgabe eines Wasserstoffmoleküls als Paraffin (rechte Seite) bzw. Olefin (linke Seite).



Abbildung 2-22: Kettenwachstum bei der Fischer-Tropsch-Synthese [22].

Die Olefinbildung ist hierbei zwar die dominante Reaktion, die gebildeten Moleküle können aber am Katalysator re-adsorbieren und in einer Folgereaktion zu Paraffin hydrieren oder den Ausgangspunkt einer neuen Kette darstellen. Diese Folgereaktionen sind mit steigender Kettenlänge stärker ausgeprägt. Das bedeutet anschaulich, dass je langkettiger die gebildeten Moleküle sind, desto weniger Olefine finden sich im Endprodukt. In geringen Mengen werden auch sauerstoffhaltige Verbindungen (Alkohole) gebildet.

Die Kettenwachstumswahrscheinlichkeit (α - Abbildung 2-23) wird über den ganzen Prozess hinweg als konstant angesehen. Sie ist entscheidend für die Gesamtproduktverteilung (bei hohen Wahrscheinlichkeiten entstehen langkettige Produkte) und stark von der Katalysatorwahl und den Prozessbedingungen abhängig.



Abbildung 2-23: Produktanteile in Abhängigkeit der Wachstumswahrscheinlichkeit α [24].

Unabhängig von den Reaktionsbedingungen erhält man bei der Fischer-Tropsch-Synthese immer ein breit gefächertes Molekülspektrum (Paraffine, Olefine, Alkohole, Methan und sonstige). Die Haupteinflussfaktoren dabei sind Temperatur, Druck, das Synthesegasverhältnis H₂/CO und die Wahl des Katalysators. Beispielhaft ist in Abbildung 2-24 ein Vergleich der Anteile der gebildeten Kettenlängen in Abhängigkeit der Katalysatorwahl dargestellt. Anhand dieses Vergleichs wird Tendenz zu kurzkettigeren Molekülen bei der Verwendung von Eisen-Katalysatoren und höheren Temperaturen deutlich.



Abbildung 2-24: Massenanteile an verschieden langen Molekülketten bei Eisen- und Kobalt-Katalysatoren [25].

Der Einfluss auf die Kettenwachstumswahrscheinlichkeit der weiteren, oben genannten Prozessparameter ist in Anlehnung an [22] in Tabelle 2-3 zusammengefasst.

	Kettenwachstumswahrscheinlichkeit
Temperatur	-
Prozessdruck	+
Partialdruck CO	+
Partialdruck H2	-
Synthesegasverhältnis H2/CO	+
Fe-Katalysator	-
Co-Katalysator	+

 Tabelle 2-3: Einfluss der FT-Prozessparameter auf das Kettenwachstum.

Die größte Ausbeute an Dieselkraftstoff erhält man nun im LTFT-Verfahren mit dem Ziel der maximalen Wachsbildung, also der Produktion möglichst langkettiger Moleküle. Bei maximal erreichbarer Kettenwachstumswahrscheinlichkeit erhält man etwa 20% direkt verwendbaren Dieselkraftstoff und ca. 45-50% Schweröl und Wachse. Durch "mildes Hydrocracken", einem Verfahren zur Spaltung langkettiger Kohlenwasserstoffe bei hohem Druck und hoher Temperatur in Katalysatoranwesenheit, werden diese zu hochwertigem Dieselkraftstoff umgewandelt. Der restliche Prozessausstoß entfällt auf leichtere Fraktionen wie Naphta (ca. 15%) und sauerstoffhaltige Verbindungen wie etwa langkettige Alkohole (ca. 2%) [22].

Durch nachfolgende konventionelle Raffinerieprozesse wie der Isomerisierung (Erzeugung von Verzweigungen) kann die Struktur der Fischer-Tropsch Kraftstoffe weitergehend beeinflusst werden.

2.5 Einfluss synthetischer Kraftstoffe auf das motorische Verhalten

Im Rahmen einer umfangreichen Studie durch das "National Renewable Energy Laboratory (NRE - USA)" wurden 2003 Fischer-Tropsch Kraftstoffe, zu welchen Veröffentlichungen existierten, bezüglich ihrer Eigenschaften und den Auswirkungen auf das motorische Verhalten verglichen [26]. Berücksichtigt wurden sowohl reine synthetische Kraftstoffe als auch Mischungen mit konventionellem Kraftstoff in unterschiedlichen Verhältnissen, deren Herstellung zumeist auf Erdgas basierte. Die Studie beinhaltet Kraftstoffe aller Firmen (Sasol, PetroSA, Exxon Mobil, Shell, Moosgas, Syntroleum) die aktuell in der großtechnischen Herstellung von Fischer-Tropsch Kraftstoffen tätig sind.

Danach lassen sich Fischer-Tropsch Produkte grundlegend in zwei Gruppen untergliedern: Nahezu Aromaten-freie Kraftstoffe mit sehr hoher Cetanzahl (>74), die üblicherweise über den Pfad der LTFT-Synthese erzeugt wurden und Kraftstoffe mit niedrigem Aromaten Gehalt (≤15%) und moderater Cetanzahl (~60) deren Herstellung zumeist im HTFT-Verfahren erfolgte. Letztgenannte Gruppe stellt dabei eher eine Ausnahme dar, da gerade die hohe Zündwilligkeit und der minimale Aromatengehalt für die günstigen Auswirkungen auf das Emissionsverhalten von synthetischen Kraftstoffen in einer Vielzahl von Publikationen genannt werden ([26], [27], [28], [29], u.v.a.). Unabhängig des Herstellers des jeweiligen synthetischen Kraftstoffs konnten unter verschiedensten Betriebsbedingungen sowohl mit PKW- als auch mit NKW-Motoren verschiedenster Emissionszertifizierungsklassen signifikante Vorteile bezüglich der Schadstoffemissionen dokumentiert werden. Während die hohe Zündwilligkeit von FT-Kraftstoffen für stark verminderte teil- und unverbrannte Emissionen verantwortlich gemacht wird, wird das Partikelreduktionspotenzial laut [26] zumeist durch den geringen Aromatenanteil begründet. Für detailliertere Dokumentationen der Untersuchungsbedingungen und der Ergebnisse sei an dieser Stelle auf die in [26] angeführten Quellen verwiesen.

Exemplarisch sollen hier die Ergebnisse einer aktuellen Publikation gezeigt werden, die in gutem Einklang mit den in [26] zusammengefassten Ergebnissen steht. Hermann et al. zeigten ein hohes Reduktionspotenzial bezüglich teil- und unverbrannter Emissionen und signifikante Russminderungen eines weder in Soft- noch Hardware angepassten PKWs bei Betrieb mit reinem GtL-Kraftstoff bzw. eines Gemischs aus EU-Diesel und GtL im NEFZ [29]. Die Nachteile die sich bezüglich des volumetrischen Kraftstoffverbrauchs ergaben, sind in der geringeren Dichte von typischen FT-Kraftstoffen begründet (Abbildung 2-25).



Abbildung 2-25: Emissionsreduktionspotenzial durch Verwendung von GtL in einem weder soft- noch hardwareseitig angepasstem PKW [29].

Die in Abbildung 2-25 gezeigten Vorteile verdeutlichen die Verwendbarkeit von FT-Kraftstoffen in Fahrzeugen ohne der Notwendigkeit von Anpassungen und der Anwendbarkeit als Beimischkomponente zu konventionellen Dieselkraftstoffen. Dies würde einen kurzfristigen und flächendeckenden Einsatz synthetischer Kraftstoffe gewährleisten um so bereits in naher Zukunft die positiven Eigenschaften von FT-Kraftstoffen zumindest teilweise nutzbar machen.

Durch eine softwareseitige Anpassung kann weiteres Potenzial von FT-Kraftstoffen ausgeschöpft werden, wie Abbildung 2-26 aufzeigt. Durch die hohe Zündwilligkeit ergibt sich eine
erhöhte AGR-Toleranz und somit das Potenzial auch Stickoxidemissionen über das mit konventionellen Kraftstoffen mögliche Maß zu reduzieren.



Abbildung 2-26: Emissionsreduktionspotenzial durch Verwendung von GtL bei einem softwareseitig angepasstem PKW [29].

Wird gleichfalls die Motorhardware an GtL-Kraftstoff angepasst, ist es möglich dessen Eigenschaften vollständig zu nützen. So sind weitere signifikante Vorteile im Russ-NO_X-Tradeoff bei höherer Teillast (Abbildung 2-27 - links) und im HC-NO_X-Tradeoff bei niedriger Teillast (Abbildung 2-27 - rechts) durch Absenkung des Verdichtungsverhältnisses und Optimierung der Einspritzstrategie ersichtlich.



Abbildung 2-27: Emissionsreduktionspotenzial durch Verwendung von GtL bei einem soft- und hardwareseitig angepasstem PKW [29].

Dazu wäre nun aber ein dedizierter Betrieb mit GtL-Kraftstoff erforderlich, da die Verwendung von konventionellem Kraftstoff in einem, für GtL-Betrieb ausgelegtem Fahrzeug gravierende Nachteile mit sich brächte. Der Grund hierfür ist im unterschiedlichen Zünd- und Brennverhalten zu sehen, wie in Abbildung 2-28 dargestellt ist. Bei gleichem Verdichtungsverhältnis und unveränderter Einspritzstrategie führt die Verwendung von GtL im gezeigten Betriebspunkt zu kürzeren Zündverzügen und damit verbundenen höheren Spitzendrücken, die im Umfeld der Stickoxidminimierung kontraproduktiv sind. Aus der besseren Zündqualität folgt aber die Möglichkeit das Verdichtungsverhältnis zu reduzieren, ohne eine Beeinträchtigung des Kaltstartverhaltens befürchten zu müssen. Dies führt zu einer deutlichen Absenkung des Spitzendrucks und damit zu einer signifikanten Verringerung der Stickoxidemissionen. Weiterhin ist es bezüglich der Einspritzstrategie möglich auf die zweite Voreinspritzung zu verzichten und damit die Partikelemissionen nochmals zu verringern.



Abbildung 2-28: Vergleich des Brennverhaltens von konventionellem Kraftstoff und GtL bei unveränderter Hard- und Software (links) und für GtL optimiere Auslegung (rechts) [29].

In Summe ermöglichten die oben gezeigten Veränderungen und der Einsatz von GtL die Erfüllung der stringenten Euro-V Grenze für Stickoxidemissionen ohne den Einsatz einer Stickoxid-bezogenen Abgasnachbehandlung.

Wie zu Anfang dieses Abschnitts beschrieben, basieren die in der Literatur beschriebenen motorischen Ergebnisse auf einer engen Spezifikation von Fischer-Tropsch Kraftstoffen, die sich vornehmlich durch hohe Cetanzahlen und geringen Aromatengehalt auszeichnet. Da aber Syntheseprozesse die gezielte Beeinflussung der Reaktionsprodukte erlauben stellt sich die Frage inwieweit veränderte chemische und physikalische Kraftstoffeigenschaften, das hier gezeigte Brenn- und Emissionsverhalten noch weiter verbessern können. Dies stellt die Fragestellung der vorliegenden Arbeit dar.

3 Untersuchte Kraftstoffe

In Abstimmung mit dem projektbegleitenden FVV-Arbeitskreis wurde eine Kraftstoffmatrix, bestehend aus sieben synthetischen Kraftstoffen sowie einem Referenz-Dieselkraftstoff (nach EN590, Schwefelgehalt < 10ppm, Biodieselfrei) definiert. Basierend auf einem Kraftstoff mit Fischer-Tropsch typischem, hohem Paraffin Anteil [27], [28] wurden sechs weitere Kraftstoffderivate durch Zumischung abgeleitet. Diese sechs Kraftstoffvarianten sind durch Bestandteile gekennzeichnet, die in Abhängigkeit der Prozessführung der Synthese (Reaktor-, Katalysatorwahl, Druck und Temperatur) und der Nachbehandlung und Reformierung [22] bevorzugt gebildet werden können. Die Merkmal prägenden Komponenten sind Naphtene, iso-Paraffine, Olefine, mono-Aromate und langkettige-Alkohole die zu jeweils 20 vol.-% zugemischt wurden. Weiterhin wurde ein Kraftstoff mit niedrigerem Siedebeginn erzeugt, welcher durch einen höheren Anteil kurzkettiger n- und iso-Paraffine erzielt wurde. Alle zu untersuchenden Kraftstoffe wurden vom Institut Francaise du Petrole (IFP) hergestellt und analysiert.

3.1 Gaschromatographische Analysen

Die im Fischer-Tropsch-Basiskraftstoff (**FT-Base** - Abbildung 3-1) enthaltenen Kohlenwasserstoffe haben die Kettenlängen C10 bis C23. Die Art der Struktur ist hauptsächlich paraffinisch, wobei summarisch ca. 48% (Massenprozent) auf n- und ca. 37% auf iso-Paraffine entfallen. Naphtene sind zu rund 13%, mono-Aromaten zu etwa 2% enthalten. Der Anteil an Di-Aromaten, dem unterster Vertreter der polyzyklischen Aromaten, wurde mit <0,1% ermittelt.



Abbildung 3-1: Gaschromatogramm des FT-Basiskraftstoffs (FT-Base).

Durch Zumischung von 20 vol.-% iso-Paraffinen wurde der Kraftstoff **FT-iPar** (Abbildung 3-2) definiert. Die Kettenlänge der zugemischten iso-Paraffine war im Bereich von 10 bis 14 Koh-

lenstoffatomen pro Molekül angesiedelt. Folglich ist der Massenanteil an n-Paraffinen hier mit etwa 38% zu beziffern. Der iso-Paraffinanteil des Kraftstoffs FT-iPar beträgt ca. 50%.



Abbildung 3-2: Gaschromatogramm des Kraftstoffs FT-iPar.

Zur Erzeugung des Kraftstoffs **FT-Olef** wurde der FT-Basiskraftstoff mit einem olefinischen Bestand der Kettenlängen C12 (~23%), C14 (~34%), C16 (~17%) und C18 (~26%) vermengt. Dadurch wurde der Summenanteil der Paraffine ausgehend von etwa 85% beim FT-Basiskraftstoff auf ca. 68% verringert, wobei das Verhältnis von n- zu iso-Paraffinen konstant blieb.



Abbildung 3-3: Gaschromatogramm des Kraftstoffs FT-Olef.

Der gewünschte niedrigere Siedebeginn des Kraftstoffs **FT-IIBP** (Abbildung 3-4) wurde durch die Zumischung von kurzkettigeren n- und iso-Paraffinen dargestellt. So enthält dieser Kraftstoff einen signifikanten Massenanteil an Paraffinen im Bereich C6-C9. Durch diese Komponenten wurde ein Siedebeginn bei 134°C gegenüber den 188°C des FT-Basiskraftstoffs realisiert (vergleiche Tabelle 3-1). Weiterhin ist dadurch ein von 85 auf 87% gesteigerter summarischer Paraffinanteil festgestellt worden.



Abbildung 3-4: Gaschromatogramm des Kraftstoffs FT-IIBP.

Durch Zumischung von 20 vol.-% Mono-Aromaten wurde der Kraftstoff **FT-Arom** (Abbildung 3-5) hergestellt. Die C-Atom-Anzahlen von C9-C11 deuteten darauf hin, dass es sich um niedriger verzweigte Aromaten handelt als dies zu geringen Anteilen im Basiskraftstoff zu finden sind. Der aufsummierte Massenanteil an Mono-Aromaten beträgt hier ca. 22%, während der verbliebene Paraffinanteil im Fall des Kraftstoffs FT-Arom auf 67,5% reduziert wurde.



Abbildung 3-5: Gaschromatogramm des Kraftstoffs FT-Arom.

Zur Erzeugung eines sauerstoffhaltigen Kraftstoffs wurden dem Basiskraftstoff Octanol, Decanol und Dodecanol beigemengt. Diesem wurde die Kurzbezeichnung **FT-Alc** (Abbildung 3-6) zugewiesen. Aus den im Rahmen der ersten Arbeitskreissitzungen definierten Anforderungen an die zu untersuchenden Kraftstoffe folgte eine gewünschte Obergrenze des Sauerstoffgehalts von 2%. Der erzielte Sauerstoffgehalt von 1,8% wurde durch ein Massenanteil von 16,6% der oben genannten langkettigen Alkohole erzielt.



Abbildung 3-6: Gaschromatogramm des Kraftstoffs FT-Alc.

Aufgrund starker Molekülwechselwirkungen zwischen Molekülen war eine gaschromatographische Analyse des Kraftstoffs **FT-Naph** laut IFP nicht möglich. Die in Abbildung 3-7 gezeigten Massenanteile beruhen deshalb auf Ergebnissen von stattdessen durchgeführter massenspektroskopischer Untersuchungen. Da der naphtenische Bestand, der dem Basiskraftstoff ebenfalls zu 20 vol.-% zugemischt wurde, neben 84% Naphtenen auch 10,5% Mono-Aromaten, 1% Poly-Aromaten und rund 4,5% Paraffine enthielt, erhöhten sich entsprechende Anteile des untersuchenden Kraftstoffs im Verhältnis.



Abbildung 3-7: Gegenüberstellung des FT-Basiskraftstoffs und des Kraftstoffs mit erhöhtem Naphtenanteil (FT-Naph).

Der zum Vergleich herangezogene Referenzkraftstoff entspricht den CEC-Anforderungen an einen Zertifizierungskraftstoff und findet üblicherweise in der Zertifizierung neu zugelassener Fahrzeuge (PKW-Bereich) bzw. Motoren (NKW-Bereich) Anwendung.

3.2 Zusammenfassung der Eigenschaften

Aus den in Abschnitt 3.1 dargestellten unterschiedlichen Kraftstoffzusammensetzungen ergeben sich verschiedene, für die motorische Anwendung relevante Eigenschaften, die in Tabelle 3-1 zusammengefasst sind. Die Analysen wurden ebenso vom IFP durchgeführt und zur Verfügung gestellt. Da die für den FT-Basiskraftstoff erhaltene Cetanzahl von 60,8 im weiteren Umfeld der Kraftstoffe aufgrund der chemischen Zusammensetzung und erster motorischer Ergebnisse unplausibel erschien, wurden für diesen Kraftstoff und den Referenzkraftstoff Nachmessungen durch die Firma SGS Speyer beauftragt. Während im Fall des Referenzkraftstoffs das Ergebnis dem des IFP entsprach, war bezüglich des FT-Basiskraftstoffs eine gravierende Abweichung festzustellen. Da aber die von SGS gemessene Cetanzahl von 72,2 die Erwartungen aus der chemischen Zusammensetzung und den motorischen Ergebnissen näher kam, wird diese im Folgenden verwendet.

	Ref fuel	FT1	FT1+20%v	FT1+20%v	FT1+20%v	FT2	FT1+20%v	FT1+20%
Blend Name	RF06-03	60-310	napmens	iso-paramins	olenns	100-3 IU	aromatics	alcohols
Abbreviation	RDF	FT-Base	FT-Naph	FT-iPar	FT-Olef	FT-IIBP	FT-Arom	FT-Alc
Ref Nr	8000	7780	7749	7750	7755	7765	7766	7774
Cetane number (-)	53	72.2*	62.7	63.5	66.7	62.4	57.9	62.1
Density (15°C) (kg/m3)	834.4	788.1	804.6	789.7	786.7	772.1	807	797.7
Sulfur content (mg/kg)	6	17	31	19	22	22	21	20
Flash point (°C)	65	89	92	87	93	39	73	89
HFRR (lubricity) 60 ℃ (µm)	370	334	377	309	342	331	337	424
Kin. viscosity (40°C) (mm2/s)	2.711	2.354	2.501	2.244	2.261	1.654	1.758	2.817
Calorific value, low $er_{(J/g)}$	42900	44061	43730	44093	43841	43853	42905	42778
Carbon content (%(m/m))	86.4	85.2	85.35	84.85	85.23	84.86	86.11	83.29
Hydrogen content (%(m/m))	13.5	15	14.83	15.24	14.91	15.2	13.99	14.9
Oxygen content (%(m/m))	< 0.5	< 0.5	< 0.5	< 0.5	< 0.5	< 0.5	< 0.5	1.80
Nitrogen content (mg/kg)		< 0.5	< 1	< 1	< 1	< 1	< 1	< 1
H/C	1.862	2.098	2.071	2.140	2.085	2.134	1.936	2.132
O/C								0.016
A/F-Ratio	14.540	14.915	14.874	14.957	14.888	14.944	14.674	14.584
Distillation								
IBP(℃)	163	188.4	189.3	173	194.4	134	185.6	193.2
5%(v/v) rec. at (°C)	187	211.1	215.2	192.3	215.4	140	187	213
10%(v/v) rec. at (°C)	198	215.5	222.8	196.9	219.4	159.2	189.4	217
20%(v/v) rec. at (°C)	219	225.7	232.2	200.8	230	182	196.8	228.4
30%(v/v) rec. at (°C)	240	236.4	243.8	231.9	239.4	203.8	209	238.8
40%(v/v) rec. at (°C)	263	247.5	253.8	238.5	248.6	221.8	222.4	248.2
50%(v/v) rec. at (°C)	279	257.3	262.2	251.6	258	236.2	236.4	256.8
60%(v/v) rec. at (°C)	298	265.8	270.8	264.8	267.6	250.4	251	264.4
70%(v/v) rec. at (°C)	311	273.7	279.4	279.7	277.2	264.4	265	271.8
80%(v/v) rec. at (°C)	322	281.9	287.4	295	286.2	277	277.6	280.2
90%(v/v) rec. at (°C)	334	291.3	297	310	294.4	289.2	289.4	291.2
95%(v/v) rec. at (°C)	346	297.6	303.8	318.5	298.4	297.6	297.6	298.8
FBP (°C)	355	303	314	337.1	305.6	306.6	306.6	306.7
%(v/v) rec. at 250°C	34.2	42.5	35.7	53.1	41.6	59.7	59.4	42.1
%(v/v) rec. at 350°C	96	> 98	> 98	> 99	> 98	> 98	>98	n.B.

*) aus Nachmessung durch SGS Speyer

Tabelle 3-1: Zusammenfassung grundlegender Kraftstoffeigenschaften.

3 Untersuchte Kraftstoffe

Erwartungsgemäß liegt die Zündwilligkeit aller FT-Kraftstoffe über der des Referenzkraftstoffs. Mit einer Cetanzahl von 72,2 markiert der Basiskraftstoff (FT-Base) aufgrund des höchsten Anteils langkettiger n- und iso-Paraffine das obere Ende des Cetanzahlbereichs. Die grundsätzlich niedrigere Zündwilligkeit olefinischer Strukturen wird durch die Kettenlänge (C12 – C18) der zugemischten Olefine teilweise kompensiert, so dass die resultierende Cetanzahl relativ hoch ausfällt. Die Kraftstoffe mit gesteigerten Anteilen an Naphtenen, iso-Paraffinen und kurzkettigeren Paraffinen sowie Anteilen langkettiger Alkohole liegen in einem sehr engen Cetanzahlbereich von ~63. Durch die Zumischung von Aromaten wurde die Zündwilligkeit der synthetischen Kraftstoffe aufgrund der hohen Oxidationsstabilität aromatischer Strukturen am stärksten verringert.

Das im Allgemeinen, im Vergleich zum Referenzkraftstoff, höhere Heizwertniveau der synthetischen Kraftstoffe ist wiederum auf höhere paraffinische Anteile zurückzuführen. Durch Zumischung von Aromaten oder langkettigen Alkoholen resultiert ein niedrigeres Heizwertniveau, das dem des Referenzkraftstoffs entspricht.

Keiner der hier analysierten synthetischen Kraftstoffe erfüllt die Mindestanforderung der EN590 bezüglich der Dichte (820 $\leq \rho$ (bei 15°C) \leq 845 kg/m³), was eine typische Eigenschaft von Fischer-Tropsch-Kraftstoffen darstellt. Ursächlich hierfür ist der niedrigere Anteil ringförmiger Kohlenwasserstoffe, was durch die im Vergleich höchsten Dichten der Kraftstoffe FT-Naph mit höherem Naphtengehalt und FT-Arom mit einem höheren Anteil an Aromaten verdeutlicht wird. Aus dem oben beschriebenen, größtenteils höheren Niveau des Heizwerts folgen volumetrische Gemischheizwerte der synthetischen Kraftstoffe, die im Bereich von 2-5% unter denen des Referenzkraftstoffs liegen.

Die gemessenen Schwefelanteile liegen einerseits über denen typischer FT-Kraftstoffe, deren Schwefel-Freiheit oftmals als Kennzeichnungsmerkmal beworben wird [26] und andererseits über dem des Referenzkraftstoffs. Da für keine der durchgeführten Messungen Abgasnachbehandlungssysteme zum Einsatz kamen, war eine Katalysatorvergiftung nicht zu befürchten. Inwieweit das Emissionsverhalten selbst durch den erhöhten Schwefelgehalt beeinflusst wurde, kann an dieser Stelle nicht beantwortet werden.

Der im Fall des Kraftstoffs mit niedrigem Siedebeginn (FT-IIBP) aufgeführte niedrige Flammpunkt würde eine Sicherheitsklassifizierung als Dieselkraftstoff unmöglich machen und eine sicherheitsbezogene Einstufung als Ottokraftstoff notwendig machen.

Die für Einspritzausrüstung moderner Dieselmotoren bedeutsame Schnierfähigkeit musste im Fall der FT-Kraftstoffe durch Additivierung sichergestellt werden, da die in Kraftstoffen auf Erdölbasis vorhandenen polaren Substanzen, die eine ausreichende Schmierwirkung durch den Kraftstoff gewährleisten, in synthetisch erzeugten Kraftstoffen nicht enthalten sind. Durch das im Vergleich zum Referenzkraftstoff höhere Wasserstoff-/ Kohlenstoff-Verhältnis, weisen die synthetischen Kraftstoffe einen höheren Luftbedarf zum Erreichen stöchiometrischer Bedingungen auf. Die Ausnahme bilden hier der durch Mono-Aromaten gekennzeichnete Blend aufgrund des durch den Aromaten-Anteil geringerem H/C-Verhältnisses und der alkoholische Blend, der Sauerstoff im Kraftstoff gebunden hat.

Der FT-Basiskraftstoff hat aufgrund der, im Vergleich zu konventionellem Dieselkraftstoff, geringeren Streubreite der enthaltenen Molekülgrößen und –Strukturen einen engeren Siedebereich von etwa. 190 – 305°C (Abbildung 3-8). Die durch Zumischung von langkettigen Alkoholen, Olefinen und Naphtenen gekennzeichneten Kraftstoffe zeigen ein nahezu analoges Siedeverhalten. Der Kraftstoff mit höherem Mono-Aromaten Anteil weißt zwar nahezu identische Anfangs- und Endpunkte in der Siedekurve auf, zeigt aber im unteren Temperaturbereich höhere Verdampfungsraten, die auf die geringeren C-Atom-Anzahlen der zugemischten Mono-Aromaten zurückgeführt werden können. Die beabsichtigte Absenkung des Siedebeginns durch höhere Anteile kurzkettiger Paraffine führte zu einem IBP von 134°C (Kraftstoff FT-IIBP). Ein ebenfalls niedrigerer Siedebeginn von ca. 170°C folgt für den Kraftstoff mit höherem iso-Paraffin-Anteil. Das für diesen Kraftstoff (FT-iPar) festgestellte hohe Siedeende von ca. 337°C kann hingegen durch die Molekülstruktur nicht begründet werden.



Abbildung 3-8: Siedeverhalten der untersuchten Kraftstoffe.

Die in Tabelle 3-1 verwendeten Abkürzungen und Farbkodierungen wurden durchgängig verwendet. Soweit nicht explizit anderweitig angeben gilt dies für alle folgenden Diagramme.

4 Untersuchungsstrategie

Ziel der motorischen Untersuchungen war es, das Verhalten der betrachteten Kraftstoffe auf Basis eines aussagekräftigen Versuchsumfangs zu charakterisieren. Dazu wurden zunächst repräsentative Betriebspunkte gewählt: einerseits sollte der NEFZ-relevante Betriebsbereich abgebildet werden, andererseits sollte in ergänzenden Betrachtungen das Volllastverhalten evaluiert werden. Es wurden 4 Teillastbetriebspunkte festgelegt, die durch den indizierten Mitteldruck (p_{mi}) und die Drehzahl definiert wurden. Die Volllastuntersuchungen fanden im Bereich maximalen Moments und im Bereich des Nennleistungspunkts statt. In Abbildung 4-1 sind diese dargestellt



Abbildung 4-1: Betriebspunkte der motorischen Untersuchungen.

Neben den Betriebspunkten sind die Betriebsbedingungen von entscheidender Bedeutung. Moderne Dieselmotoren verfügen aufgrund des hochflexiblen Common-Rail Einspritzsystems, der variablen Aufladung und der Abgasrückführung über eine Vielzahl an Freiheitsgraden, die das Brennverhalten beeinflussen. Somit erschien eine Untersuchung ohne Berücksichtigung der Variabilität dieser Parameter nicht sinnvoll. Weiterhin wurden zwei Ansätze verfolgt: Zum einen sollten die grundlegenden Auswirkungen der chemischen und physikalischen Kraftstoffeigenschaften auf das Brenn- und Emissionsverhalten analysiert werden. Zum Anderen sollte die Übertragbarkeit auf realitätsnahen Betrieb moderner Dieselmotoren überprüft werden. Folglich gliedert sich die Strategie der motorischen Untersuchungen in zwei Teile sowie die Untersuchung des Volllastverhaltens. Diese werden im Nachstehenden dargestellt. Grundlage war in allen Fällen ein von der Daimler AG zur Verfügung gestelltes Kennfeld, auf dessen Basis Parametervariationen durchgeführt wurden.

4.1 Versuchsplanung unter Berücksichtigung statistischer Methoden

Einführung in die Methoden der statistischen Versuchsplanung 4.1.1

Sollen Untersuchungen in Abhängigkeit von mehreren Faktoren durchgeführt werden, führt dies in Abhängigkeit von der Anzahl der Faktoren und der Faktorstufen zu einem exponentiellen Anstieg des Messaufwands. So führt zum Beispiel ein 4-dimensionaler Versuchsraum mit 5 Stufen je Faktor zu 5^4 = 625 Faktorkombinationen, die bei einer Rastervermessung untersucht werden müssten. Um diesen Aufwand zu verringern stellen Methoden der statistischen Versuchsplanung (DoE) das geeignete Werkzeug dar. Diese sind eine arbeitseffiziente Methodik zur systematischen Erarbeitung von Versuchsplänen. Ihre Abarbeitung und quantitative Auswertung hat das Ziel der Modellbildung und der Ermittlung relevanter Einflussgrößen bezüglich der Funktionsweise eines Prozesses [30]. Dabei soll ein möglichst hoher Erkenntnisgewinn mit geringem Versuchsaufwand erzielt werden. Die Ergebnisse der Messungen, die anhand von statistischen Gesichtspunkten geplant wurden, werden zur Erstellung einer Regressionsfunktion benutzt, welche im gesamten (beschränkten) Versuchsraum Gültigkeit besitzt. Kann nachgewiesen werden, dass diese Funktion über eine hinreichende Genauigkeit verfügt, kann diese an beliebigen Punkten im Versuchsraum ausgewertet und somit das Systemverhalten in Abhängigkeit der Einflussfaktoren beschrieben werden.

Somit wird unter dem Begriff "Methoden der statistische Versuchsplanung" nicht nur die eigentliche Versuchsplanung verstanden, sondern der vollständige Prozess von der Systembeschreibung bis hin zur Anwendung der Modelle in Optimierungsaufgaben. Die dabei anzuwendende Vorgehensweise soll nachfolgend näher erläutert werden. Dazu müssen an dieser Stelle einige statistische Größen eingeführt werden. Die Literatur zu DoE ist ebenso umfangreich wie die darin vorkommenden Notationen. Die in der vorliegenden Arbeit vorgestellte Notation entspricht der, die im verwendeten Softwarepaket "Model Based Calibration Toolbox" (basierend auf Matlab der Firma Mathworks) Anwendung findet und so auch in dem sehr häufig zitierten Werk "Design and Analysis of Experiments" von D.C. Montgomery [31] verwendet wird.

Symbol	Definition
Ν	Anzahl Messpunkte
р	Anzahl aktuell für das Modell verwendeter Terme
q	Maximale Anzahl für das Modell verwendbare Terme $(q = p + r)$
r	Anzahl aktuell nicht für das Modell verwendeter Terme
<u>У</u>	Vektor des Messergebnisse, Dimension (N \times 1)
X	Regressoren
X	Regressions-Matrix, Dimension $(N \times q)$

|--|

\underline{X}_{p}	Modell-Matrix aller aktuell für das Modell verwendeter Terme, Dim. $(N \times p)$
$\hat{\beta}$	Vektor der Modell-Koeffizienten. $\hat{\beta}_{p} = \{\hat{\beta}_{1}, \hat{\beta}_{2},, \hat{\beta}_{p}\}$ mit der Dimension (p × 1)
ŷ	Vektor der modellierten Ergebnisse. $\underline{\hat{y}} = \underline{X}_p \underline{\hat{\beta}}_p$ mit der Dimension (N×1)
e	Vektor der Residuen. $\underline{\mathbf{e}} = (\underline{\mathbf{y}} - \hat{\underline{\mathbf{y}}})$ mit der Dimension (N × 1)
M	Informationsmatrix. $\underline{M} = (\underline{X}^T \underline{X})$
H	Hut-Matrix (Projektionsmatrix). $\underline{\mathbf{H}} = \underline{\mathbf{X}}^{T} (\underline{\mathbf{X}}^{T} \underline{\mathbf{X}})^{-1} \underline{\mathbf{X}}$
0.05	Sum of Squared Errors – Summe der Fehlerquadrate
SSE	$SSE = \sum e_i^2 = \underline{e}^T \underline{e}$
MSE	Mean Square Error – Mittleres Fehlerquadrat. $MSE = SSE / (N - p)$

Tabelle 4-1: Grundlegende statistische Größen zur Versuchsplanung [31], [32].

Der allgemeine Ansatz zur Beschreibung einer Ergebnisgröße durch ein Polynom lautet wie folgt:

$$\begin{split} \hat{y}_{1} &= \hat{\beta}_{0} + \hat{\beta}_{1} x_{11} + \hat{\beta}_{2} x_{12} + \hat{\beta}_{3} x_{11} x_{12} + \hat{\beta}_{4} x_{11}^{2} + \hat{\beta}_{5} x_{12}^{2} + \ldots + \hat{\beta}_{p} x_{1p}^{m} \\ \ldots \\ \hat{y}_{N} &= \hat{\beta}_{0} + \hat{\beta}_{1} x_{N1} + \hat{\beta}_{2} x_{N2} + \hat{\beta}_{3} x_{N1} x_{N2} + \hat{\beta}_{4} x_{N1}^{2} + \hat{\beta}_{5} x_{N2}^{2} + \ldots + \hat{\beta}_{p} x_{Np}^{m} \end{split}$$
(4.1)

In Matrixform geschrieben ergibt sich:

Ziel der Statistischen Versuchsplanung ist es nun, die Modellkoeffizienten so zu bestimmen, dass die Abweichungen zwischen Messergebnissen y und Modellergebnissen \hat{y} minimal werden. Dabei gilt es die signifikanten Effekte und Wechselwirkungen der Faktoren zu identifizieren und entsprechend zu bewerten. Schlussendlich wird eine Funktion generiert, die es erlaubt mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit Ergebnisse vorherzusagen, solange der Versuchsraum nicht verlassen wird (Extrapolation ist nicht möglich!).

Das Vorgehen stellt sich wie folgt dar:

- 1. <u>Systembeschreibung</u>: Hier gilt es die relevanten Einflussgrößen zu identifizieren, deren Variationsbreite festzulegen und die Zielgrößen zu definieren. Zudem kann es nötig sein, den sich durch Dimension und den Variationsbereich der Einflussfaktoren ergebenden Versuchsraum zu beschränken, da es speziell bei der Anwendung im motorischen Umfeld bei extremen Parameterkombinationen zur Systeminstabilität kommen kann. Dazu ist entweder eine genaue Kenntnis des Systems Voraussetzung, oder vor Versuchsplanerstellung muss eine Grenzwertvermessung durchgeführt werden. Bei der Anwendung von "online"-DoE-Werkzeugen kann eine simultane Versuchsplanung und Durchführung erfolgen, da über die direkte Rückmeldung bei Grenzwertverletzungen eine Reorganisation des Versuchsplans durchgeführt werden kann. Da es sich bei der verwendeten Software allerdings um ein "offline"-DoE-Werkzeug handelt, wurden die Grenzen des Versuchsraums auf Basis von Voruntersuchungen definiert. Die dafür angewandte Methodik ist in Abschnitt 4.1.2 anhand eines konkreten Beispiels dargestellt.
- 2. <u>Versuchsplanung</u>: Diese bildet die Basis für die nachfolgende Modellbildung. Hier wird definiert an welchen Messpunkten, die sich aus Kombinationen der Einflussfaktoren ergeben, Untersuchungen durchgeführt werden. Aus der aus dem vorliegenden Untersuchungsumfeld resultierenden Forderungen nichtlineare Zusammenhänge in einem mehrdimensionalen, beschränkten Versuchsraum abbilden zu können, führen zur Notwendigkeit D-optimale Versuchspläne zu verwenden. Weiterhin ist es bei dieser Versuchsplanart möglich, weitere schon bestehende oder zusätzlich vermessene Versuche einzubinden. Aufgrund dieser Eigenschaften D-optimaler Versuchspläne ist deren Anwendung in der Motorenindustrie seit nunmehr einigen Jahren gängige Praxis ([33], [34]). Ziel des D-optimalen Versuchsplans ist es die Varianzen und Kovarianzen der Parameterschätzung zu minimieren. Mathematisch bedeutet dies, das die Determinante der Informationsmatrix maximiert bzw. die Determinante der inversen Informationsmatrix minimiert werden muss:

$$[\det(\underline{M})] \rightarrow \max \text{ bzw. } [\det(\underline{M}^{-1})] \rightarrow \min$$
 (4.3)

D-optimale Versuchspläne werden also nicht nach vordefinierten Schemata generiert. Vielmehr ist ihre Erstellung ein iterativer Prozess, wobei Austausch-Algorithmen und Randomisierungsverfahren zum Einsatz kommen [35]. Der in der MBC-Toolbox implementierte Algorithmus ist eine Suchfunktion, der durch einen schrittweisen Austausch der Zeilen des zufällig erzeugten Grundversuchsplans die maximale Determinante der Informationsmatrix annähert. Die Iterationsschleife wird durch ein vordefiniertes Abbruchkriterium begrenzt, welches üblicherweise durch eine Untergrenze der Änderung der Determinante definiert ist. Da die Determinante vor allem durch Extremeinstellung der Faktoren erhöht werden kann, ergibt sich eine prinzipbedingte Überbetonung der Randbereiche des Versuchsraums sowie eine Reduktion der Informationsdichte im Inneren des Versuchsraums. Um dem entgegenzuwirken wurde

eine ergänzende Methodik gewählt. Wie oben beschrieben stellen "optimale" Versuchspläne die beste Möglichkeit, dar beschränkte, mehrdimensionale Versuchsräume zu beschreiben. Es ist jedoch möglich einen reduzierten Versuchsraum im ur-

sprünglichen Versuchsraum zu definieren, der aufgrund des Verzichts auf extreme Parameterkombinationen quasi unbeschränkt ist. Dieser kann nun durch klassische Versuchspläne beschrieben werden. In der vorliegenden Arbeit wurde ein Central Composite Design mit außen legenden Sternpunkten gewählt (Abbildung 4-2). Neben der sich dadurch ergebenden hohen Informationsdichte im Inneren des ursprünglichen Versuchsraums, werden neben Wechselwirkungen auch explizit Variationen ausschließlich eines Faktors durchgeführt, die im Weiteren eine Veranschaulichung und eine Plausibilitätsprüfung der generierten Modelle ermöglichen.



Abbildung 4-2: Central Composite Design mit außen liegenden Sternpunkten.

Bei der Erzeugung von Versuchsplänen ist nun der Modellgrad abzuschätzen. Dabei gilt es zu definieren, von welcher Art bzw. von welchem Grad (linear, quadratisch, kubisch, …) der Einfluss der Faktoren auf die Zielgrößen ist. Hier ist stets die Zielgröße maßgebend, deren Modellierung den höchsten benötigten Polynomgrad erwarten lässt. Diese Abschätzung ist von immenser Bedeutung, da einerseits der Messaufwand vorgegeben wird (linear: 2 x-Werte, quadratisch: 3 x-Werte zur Beschreibung von y nötig, …) anderseits aber auch der maximal zur Modellierung mögliche Polynomgrad vorgegeben wird.

Die MBC-Toolbox bietet ein Beurteilungskriterium für die Qualität eines Versuchsplans, die "Prediction Error Variance (PEV)". Diese kann sowohl zur Beurteilung des Versuchsplans (PEV_{Design}) als auch zur Bewertung der Vorhersagegüte erstellter Modelle (PEV_{Model}) verwendet werden. Dabei gilt:

$$\mathsf{PEV}_{\mathsf{Model}} = \mathsf{PEV}_{\mathsf{Design}} \cdot \mathsf{MSE} \tag{4.4}$$

Somit ist die Genauigkeit der Vorhersage durch das Modell abhängig von der PEV_{Design} und den mittleren Fehlerquadraten. Anschaulich bedeutet dies, dass die PEV_{Design} einen Fehlermultiplikator darstellt und deshalb die Fehler im Modellanpas-

sungsprozess für Werte <1 reduziert und für Werte >1 vergrößert werden. Die PEV_{Design} einer Kombination aus Eingangsfaktoren <u>x</u> entspricht der Varianz der vorhergesagten Ergebnisgröße ($var(\hat{y})$). Durch Umformung und Erweitung können PEV_{Model} und PEV_{Design} berechnet werden [32]:

$$\mathsf{PEV}_{\mathsf{Model}}(\underline{\mathbf{x}}) = \mathsf{var}(\hat{\mathbf{y}}) = \underline{\mathbf{x}}(\underline{\mathbf{X}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{X}})^{-1} \underline{\mathbf{x}}^{\mathsf{T}} \cdot \mathsf{MSE}$$
(4.5)

$$\mathsf{PEV}_{\mathsf{Design}}(\underline{\mathbf{x}}) = \underline{\mathbf{x}}(\underline{\mathbf{X}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{X}})^{-1} \underline{\mathbf{x}}^{\mathsf{T}}$$
(4.6)

Ziel ist also immer einen Versuchsplan zu erstellen dessen PEV_{Design} <1 ist bzw. gegen Null tendiert.

- 3. <u>Durchführung der Messungen</u>: Hier ist eine möglichst präzise Einstellung der Variationsparameter bzw. der Eingangsfaktoren bei gleichzeitig konstanten Versuchsbedingungen von entscheidender Bedeutung. Ersteres dient der Einhaltung der Vorhersagegüte, die durch die Erstellung des Versuchsplans erreicht wurde. Konstante Versuchsbedingungen sind nötig um Quereinflüsse ausschließen zu können und damit die Einflüsse der Eingangsfaktoren eindeutig zuordnen zu können. Dies hat hohe Anforderungen an die Versuchsausrüstung zur Folge. Gerade im motorischen Umfeld ist eine Vielzahl an Umgebungsbedingungen, die Einflüsse auf die Ergebnisse haben können, zu beachten. Der in der vorliegenden Arbeit verwendete Versuchsträger, die Messtechnik sowie der Versuchsablauf werden in Kapitel 5.1 näher beschrieben.
- 4. <u>Modellbildung</u>: In dieser Arbeit wurden Polynome zur Beschreibung der Messergebnisse verwendet. Neben diesen sind Splines, Kriging Approxiamtionsmodelle, Radiale Basisfunktionen, Kernel-Modelle und künstliche neuronale Netze gebräuchliche Regressionsmodelle, auf deren nähere Beschreibung im Rahmen dieser Arbeit verzichtet wird. Detaillierte Erläuterungen finden sich u.a. in [36], [37] und [38]. Kernpunkt der Regressionsanalyse ist die Anpassung der Modellkoeffizienten mittels der Methode der kleinsten Fehlerquadrate. Da es sich hier um eine Modellerstellung in Abhängigkeit von mehreren Einflussfaktoren handelt, handelt es sich um eine multiple Regression. Um dies zu ermöglichen ist eine Linearisierung der höherwertigen Modellterme notwendig. Ausgehend von einem allgemeinen Polynommodell, wie es in Gleichung (4.1) dargestellt ist, werden die nichtlinearen Terme durch Ersatzvariablen substituiert und so das Polynom in ein lineares Gleichungssystem umgewandelt [36]:

$$\hat{y}_{N} = \hat{\beta}_{0} + \hat{\beta}_{1}x_{N1} + \hat{\beta}_{2}x_{N2} + \hat{\beta}_{3}x_{N1}x_{N2} + \hat{\beta}_{4}x_{N1}^{2} + \hat{\beta}_{5}x_{N2}^{2} + \dots + \hat{\beta}_{p}x_{Np}^{m}$$
 analog (4.1)

lineare Wechselwirkungen: $X_{N1}X_{N2} \rightarrow X_{N,IW1}$

quadratische Effekte:
$$X_{N1}^2 \rightarrow X_{N,qE1}$$

 $X_{N2}^2 \rightarrow X_{N,qE2}$

usw.

$$\hat{\mathbf{y}}_{N} = \hat{\beta}_{0} + \hat{\beta}_{1}\mathbf{x}_{N1} + \hat{\beta}_{2}\mathbf{x}_{N2} + \hat{\beta}_{3}\mathbf{x}_{N,\text{IW1}} + \hat{\beta}_{4}\mathbf{x}_{N,\text{qE1}} + \hat{\beta}_{5}\mathbf{x}_{N,\text{qE2}} + \dots + \hat{\beta}_{p}\mathbf{x}_{N,\text{kEi}}$$
(4.7)

Für die Bestimmung von $\hat{\beta}$ muss das Modell so an die Daten angepasst werden, dass der Fehler <u>e</u> minimal wird [33]. Dazu muss in einem ersten Schritt der Fehler durch die Messdaten und die Modellkoeffizienten ausgedrückt werden.

$$\underline{\mathbf{y}} = \underline{\mathbf{\hat{y}}} + \underline{\mathbf{e}} \tag{4.8}$$

$$\underline{\mathbf{y}} = \underline{\mathbf{X}}\hat{\underline{\boldsymbol{\beta}}} + \underline{\mathbf{e}} \tag{4.9}$$

$$\underline{\mathbf{e}} = \mathbf{y} - \hat{\mathbf{y}} = \mathbf{y} - \underline{\mathbf{X}}\hat{\boldsymbol{\beta}}$$
(4.10)

Die minimale Summe der Fehlerquadrate (SSE) ist durch Gleichung (4.11) definiert:

$$\frac{\partial \left(\underline{\mathbf{e}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{e}}\right)}{\partial \hat{\boldsymbol{\beta}}} = \mathbf{0}$$
(4.11)

Durch Einsetzen und Umformen ergibt sich die Schätzgleichung für den Koeffizientenvektor $\hat{\beta}$ zu (4.14).

$$\underline{\mathbf{e}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{e}} = \left(\underline{\mathbf{y}} - \underline{\mathbf{X}}\underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}\right)^{\mathsf{T}} \left(\underline{\mathbf{y}} - \underline{\mathbf{X}}\underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}\right) = \underline{\mathbf{y}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{y}} - \left(\underline{\mathbf{X}}\underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}\right)^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{y}} - \underline{\mathbf{y}}^{\mathsf{T}} \left(\underline{\mathbf{X}}\underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}\right) + \underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{X}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{X}}\underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}$$

$$\Rightarrow \underline{\mathbf{e}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{e}} = \underline{\mathbf{y}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{y}} - 2\left(\underline{\mathbf{X}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{y}}\right)\underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}} + \underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{X}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{X}}\underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}$$

$$(4.12)$$

$$\frac{\partial \left(\underline{\mathbf{e}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{e}}\right)}{\partial \underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}} = \mathbf{0} = -2\left(\underline{\mathbf{X}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{y}}\right) + 2\underline{\mathbf{X}}^{\mathsf{T}} \underline{\mathbf{X}} \underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}}$$
(4.13)

$$\underline{\hat{\boldsymbol{\beta}}} = \left(\underline{\boldsymbol{X}}^{\mathsf{T}} \, \underline{\boldsymbol{X}}\right)^{-1} \underline{\boldsymbol{X}}^{\mathsf{T}} \, \underline{\boldsymbol{y}} \tag{4.14}$$

Anhand dieser Gleichung können nun die Koeffizienten des Polynommodells bestimmt werden. Dabei ist es möglich Polynome von verschiedenen Graden bis hin zu dem in der Versuchsplanung definierten, maximalen Grad (z.B. kubisch) zu erzeugen.

5. <u>Modellbewertung und Optimierung</u>: Nun gilt es die generierten Modelle zu bewerten und zu optimieren. Dazu stellt die Statistik eine Reihe von Werkzeugen zu Verfügung. Zunächst werden Beurteilungskriterien benötigt, die diese Bewertung ermöglichen. Dazu müssen den in Tabelle 4-1 vorgestellten statistischen Größen noch einige Weitere hinzugefügt werden:

PRESS	Predicted Error Sum of Squares – Summe der Fehlerquadrate bei Weg- lassen des i-ten Messwerts PRESS = $e_{(i)}^{T} e_{(i)}$
MSE _(i)	MSE der ohne den i-ten Wert der Ergebnisse berechnet wurde (für PRESS) $MSE_{(i)} = \frac{(N-p)MSE - e_i / (1-H_{ii})}{N-p-1}$
RMSE	Root Mean Squared Error – Wurzel der Fehlerquadrate; die Standard- abweichung der Regression RMSE = \sqrt{MSE}
PRESS RMSE	Root Mean Squared Error of Prediction – Wurzel der quadrierten PRESS-Residuen PRESS RMSE = $\sqrt{PRESS / N}$

Tabelle 4-2: Statistische Kennzahlen zur Modellanalyse und -Bewertung

Die zur Modelloptimierung zur Verfügung stehenden Werkzeuge sind die Eliminierung von Ausreißern, die Box-Cox Transformation und die schrittweise Regression zur Identifikation signifikanter Terme der Polynome. Die Bewertung der Modelle erfolgt Anhand der Kennwerte RMSE, PRESS, PRESS RMSE und Validierungs-RMSE. Neben der verbreiteten Nutzung des RMSE als Beurteilung der Modellgüte, ist die Predicted Error Sum of Squares (PRESS) eine nützliche Kenngröße zur Beurteilung der Vorhersagegüte (innerhalb des Versuchsraums) des Modells Zur Berechnung bleibt der i-te Messwert bei der Modellerstellung unberücksichtigt. Der Abstand dieses Messwerts zum Modell ist nun der Vorhersagefehler. Wird dies für jeden Messwert durchgeführt, quadriert und aufsummiert ergibt sich die PRESS. Die Quadratwurzel der PRESS stellt somit die Standardabweichung dar – PRESS RMSE. Zur Validierung werden die zufällig verteilten Validierungsmessungen (vgl. Abschnitt 4.1.2) herangezogen, die generell nicht zur Modellierung verwendet werden. Die Wurzel der quadrierten Residuen stellt den Validierungs-RMSE dar.

Zur Eliminierung von Ausreißern muss durch Betrachtung der jeweiligen Messung die Zulässigkeit der Nichtberücksichtigung dieses Messpunktes überprüft werden. Dazu wird einerseits beurteilt, inwieweit der gemessene Wert fehlerhaft sein könnte und anderseits die Auswirkung der Nichtberücksichtigung auf den Validierungs-RMSE überprüft. Die Box-Cox-Transformation ist ein mathematisches Instrument um bei nicht normalverteilten Residuen eine Stabilisierung der Varianz zu erreichen [37]. Dazu werden die Messdaten anhand folgender Gleichung transformiert [32]:

$$y^{(\lambda)} = \frac{y^{\lambda} - 1}{\lambda \dot{y}^{\lambda - 1}} \quad \text{für } \lambda \neq 0$$

$$y^{(\lambda)} = \dot{y} \ln(y) \quad \text{für } \lambda = 0$$

$$mit \ \dot{y} = exp\left[\frac{\sum_{i=1}^{N} \ln(y_i)}{N}\right] \quad (4.15)$$

Die Bestimmung von λ erfolgt mittels der Maximum-Likelihood-Schätzung (siehe [37], [39]) mit dem Ziel kleinster Fehlerquadratsummen, also einer Minimierung von SSE. Bei der schrittweisen Regression wurden die Modellterme anhand ihrer statistischen Relevanz (T-Test, siehe [37]) bewertet. Bei der schrittweisen Nichtberücksichtigung wenig und nicht signifikanter Terme wird eine Minimierung der PRESS mit dem Ziel einer hohen Vorhersagegüte und einer geringen Sensibilität gegenüber einzelnen Messpunkten durchgeführt.

Die abschließende Modellbeurteilung erfolgt anhand des Vergleichs von RMSE, PRESS RMSE und Validierungs-RMSE. Nur bei entsprechend niedrigen Werten das RMSE kann von einem guten Modellfit ausgegangen werden. PRESS RMSE und Validierungs-RMSE sollten dem RMSE sehr ähnlich sein, da bei zu großen Unterschieden von einer Überanpassung des Modells ausgegangen werden muss, wie in dargestellt ist.



Abbildung 4-3: Überanpassung (Overfitting) bei zu hoch gewähltem Polynomgrad.

4.1.2 Planung der Versuche mit Blockeinspritzung

Üblicherweise werden moderne Dieselmotoren, die über ein Common-Rail Einspritzsystem verfügen, mit Mehrfacheinspritzung betrieben. Dabei werden Voreinspritzungen primär zur Reduktion des Verbrennungsgeräuschs eingesetzt und haben einen starken Einfluss auf die Zündverzugszeit (wird kürzer) und den Brennverlauf (wird flacher). Frühe Nacheinspritzungen dienen zur direkten Reduzierung der Russemissionen, späte NE werden zur Regeneration von Abgasnachbehandlungssystemen appliziert [40]. Da für die Untersuchung grundlegender Auswirkungen chemischer und physikalischer Kraftstoffeigenschaften gerade der Zündverzug, das Brenn- und Emissionsverhalten von zentralem Interesse waren, wurde im ersten Untersuchungsteil auf die Anwendung einer Voreinspritzung verzichtet. Ebenso verhielt es sich mit der Nacheinspritzung, da weder die Rohemissionen durch Optimierung des Brennverfahrens reduziert werden sollten, noch eine Abgasnachbehandlung vorhanden war.

Um die Auswirkungen der verschiedenen chemischen und physikalischen Parameter der zu untersuchenden Kraftstoffe abzubilden, wurden motorische Parameter, die einen maßgeblichen Einfluss auf Gemischzusammensetzung und Gemischaufbereitung haben als variabel definiert. Die Ladelufttemperatur bestimmt bei konstantem Ladedruck die bei Einlass schließt im Zylinder befindliche Luftmasse. Weiterhin wurde durch deren Variation das Verdampfungs- und Zündverhalten des eingespritzten Kraftstoffs beeinflusst. Der Anteil an rückgeführtem Abgas wirkt sich auf den Sauerstoffanteil und die Wärmekapazität der Zylinderladung aus. Durch den veränderlichen Raildruck wurde Einfluss auf die primäre Gemischbildung, d.h. auf Strahlzerstäubung und Spraybildung genommen. Aus der Variation des Ansteuerbeginns der Einspritzung resultieren unterschiedliche Druck- und Temperaturbedingungen beim Eintritt des Kraftstoffs in den Brennraum. Bei konventionellen Dieselbrennverfahren ist der Einspritzbeginn der führende Parameter um den Brennbeginn und die 50%-Umsatz-Lage der Verbrennung zu steuern. Aufgrund der unterschiedlichen Zündwilligkeiten der Kraftstoffe wurde nicht der Variationsbereich des Einspritzbeginns sondern der Bereich der 50%-Umsatz-Lagen (H50) festgelegt. Diese Strategie wurde auf die oben aufgeführten vier Teillastbetriebspunkte angewandt. Die Variationsbereiche der einzelnen Parameter orientieren sich am Kennfeld des Vollmotors. Die unteren und oberen Grenzwerte in Abhängigkeit des Betriebspunkts sind in Tabelle 4-3 aufgeführt.

		Ladelufttemperatur		Abgasrückführrate		Raildruck		50%-Umsatz-Lage	
DZ	PMI	TSR		AGR		pRail		H50	
U/min	bar	o	С	%		bar		°KW nOT	
		min.	max.	min.	max.	min.	max.	min.	max.
1500	2	40	80	0	40	500	700	8	17
2000	2	40	80	0	40	550	750	9	17
2000	6	40	80	0	40	700	900	10	17
2000	10	40	80	0	30	800	1000	16	23

Tabelle 4-3: Betriebsbereiche der Untersuchungen mit Blockeinspritzung.

Durch die als variabel definierten Betriebsparameter wurde ein vierdimensionaler Versuchsraum aufgespannt, der mit Hilfe von Methoden der Statistischen Versuchsplanung (DoE) vermessen wurde. Dadurch war es mit einer, gegenüber einer Rastervermessung, niedrigen Anzahl an Versuchen möglich, die unterschiedlichen Abhängigkeiten der verschiedenen Kraftstoffe von den Variationsparametern aufzuzeigen.

Zur Versuchsplanung und anschließenden Modellierung der Ergebnisgrößen wurde, wie oben erwähnt, die Matlab-basierte Toolbox Model-Based Calibration eingesetzt. Dabei handelt es sich um ein "offline-DoE"-Werkzeug, d.h. die Versuchsplanung erfolgt nach durchgeführter Grenzwertvermessung. Hier wurden pro Betriebspunkt 36 Parametervarianten am Prüfstand untersucht, um die Kombinationen aus den Extremwerten der Verstellbereiche zu finden und deren Fahrbarkeit zu gewährleisten. Die in der Grenzwertvermessung gefundenen Parameterkombinationen bildeten nun die Eckpunkte des Versuchsraums, der im Weiteren durch konvexe Hüllkurven begrenzt wurde. In Abbildung 4-4 ist dies exemplarisch dreidimensional illustriert.



Abbildung 4-4: Beschränkung des Versuchsraums.

Folglich handelt es sich um einen beschränkten Versuchsraum. Zur eigentlichen Versuchsplanung wurde in einem ersten Ansatz ein D-optimaler Plan, wie in Abbildung 4-5 links dargestellt, gewählt, dessen Verteilungsalgorithmus üblicherweise die Randbereiche eines Versuchsraums mit einer hohen Anzahl an Messpunkten belegt und damit hier eine hohe Modellgüte erwarten ließ [34]. Um im Weiteren die zu erwartende Modellgualität im zentralen Versuchsraum zu verbessern und zusätzlich Messpunkte von mathematisch weniger komplexen Zusammenhängen zu erhalten, wurde ein zweiter Ansatz zur Versuchsplanung verfolgt: Im quasi unbeschränkten zentralen Versuchsraum wurde ein klassischer Designtyp, das sphärische Central Composite Design verwendet. Von einem Zentralpunkt ausgehend wurden in der ersten Stufe Sternpunkte (jeweiliger Maximalwert einer Eingangsvariablen bei konstanten weiteren Eingangsvariablen) und in einer zweiten Stufe Eckpunkte bei halbem Verstellweg definiert, siehe Abbildung 4-5 rechts. Der vollständige Versuchsplan wurde additiv aus D-optimalem und Central Composite Design aufgebaut. Da die Modellierung der Ergebnisdaten mit kubischen Polynomen erfolgen sollte, ergab sich eine erforderliche Anzahl von 60 Messpunkten, wobei 35 Punkte auf das D-optimale Design und 25 Messpunkte auf das klassische Design entfallen. Weiterhin wurden im Versuchsraum 10 Messpunkte durch zufällige Verteilung erzeugt, die nicht zur Modellierung der Ergebnisdaten, sondern der Validierung der generierten Modelle dienten.



Abbildung 4-5: Kombination aus D-optimalem und klassischem Design zur Versuchsplanung.

Um entsprechende Parametereinflüsse und Wechselwirkungen wiedergeben zu können, war es notwendig die hier definierten Mess- und Validierungspunkte mit hoher Genauigkeit anzufahren. Dies stellte nicht unerhebliche Anforderungen an die Steuer- und Regelungstechnik des Prüfstands dar.

4.2 Ergänzende Untersuchungsstrategien

4.2.1 Untersuchungen mit Vor- und Haupteinspritzung:

Der Einsatz einer Voreinspritzung beeinflusst das Brenn- und damit das Emissionsverhalten maßgeblich. Durch Temperaturerhöhung und Radikalbildung nimmt der Zündverzug stark ab. Daraus folgt eine geringere Abhängigkeit des Brennverlaufs von der Zündwilligkeit des entsprechenden Kraftstoffs, wie in Abbildung 4-6 für den Kraftstoff mit der niedrigsten (RDF) und der höchsten Cetanzahl (FT-Base) exemplarisch dargestellt.



Abbildung 4-6: Brennverläufe bei Blockeinspritzung (links) und Mehrfacheinspritzung (rechts) in Abhängigkeit der Cetanzahl.

Im Vergleich zum sehr zündwilligen FT-Basiskraftstoff weißt der Referenzdiesel bei Blockeinspritzung einen weit höheren Vormischanteil auf, der maßgeblichen Einfluss auf das Emissionsverhalten hat. Wird hingegen eine Voreinspritzung appliziert, sind die Brennverläufe nahezu identisch. Deshalb war es notwendig die Übertragbarkeit der in den Blockeinspritzuntersuchungen gewonnen Erkenntnisse auf realitätsnähere Betriebsbedingungen moderner Dieselmotoren zu überprüfen.

Dazu wurde an den gleichen vier Teillastpunkten, die in oben beschriebenen Untersuchungen mit Blockeinspritzung betrachtet wurden, eine ergänzende Versuchsstrategie definiert: Die Voreinspritzung wurde für alle Kraftstoffe mit konstantem Energieeintrag (m_B*H_u) und einer Pausendauer von 1ms zwischen dem Ende der elektrischen Ansteuerung der VE und dem Ansteuerbeginn der HE appliziert. Die Variation der Betriebsbedingungen wurde hier auf eine Variation der AGR-Rate beschränkt, die im dieselmotorischen Umfeld den wichtigsten Einflussparameter auf den Russ-NO_X-Tradeoff darstellt. Ladelufttemperatur, Raildruck und H50-Lage wurden konstant gehalten, wobei Letzteres bei Variation der AGR-Rate durch Anpassung der Einspritzlage erreicht wurde. In Tabelle 4-4 sind die Betriebsbedingungen der Untersuchungen mit Voreinspritzung zusammengefasst.

		Ladeluft- temperatur	Abgasrückführrate		Raildruck	50%-Umsatz- Lage	Energieein- trag VE
DZ	PMI	TSR	AGR		pRail	H50	mB*Hu VE
U/min	bar	°C	%		bar	°KW nOT	J/ASP
		konst.	min.	max.	konst.	konst.	konst.
1500	2				660	13	
2000	2	60	0	40	720	13	52 7*
2000	6				950	20	55.7
2000	10		0	30	1050	20	

*) basierend auf 1.5mm3/ASP bei RDF (Hu = 42900J/g)

Tabelle 4-4: Betriebsbedingungen der Untersuchungen mit Vor- und Haupteinspritzung.

4.2.2 Untersuchung des Volllastverhaltens

Abschließend wurde das Volllastverhalten jedes Kraftstoffs bei maximalem Moment und im Nennleistungspunkt evaluiert. Analog der Untersuchungen mit Voreinspritzung wurde beim Volllastbetriebspunkt bei 2000U/min (≈ max. Moment) eine VE mit konstantem Energieeintrag und konstanter Pausendauer zur HE appliziert. Im Nennleistungspunkt (4000U/min) wurde, wie üblich, auf eine Voreinspritzung verzichtet. Abgas wurde bei beiden Volllastbetriebspunkten nicht rückgeführt. Die Werte der Betriebsbedingungen Ladelufttemperatur, Raildruck und 50%-Umsatz-Lage entsprechen denen des von der Daimler AG zur Verfügung gestellten Basiskennfelds und sind in Tabelle 4-5 dargestellt.

		Ladeluft- temperatur	Abgasrückführ- rate	Raildruck	50%-Umsatz- Lage	Energieeintrag VE
DZ	PMI	TSR	AGR	pRail	H50	mB*Hu VE
U/min	bar	°C	%	bar	°KW nOT	J/ASP
		konst.	konst	konst.	konst.	konst.
2000	VL	60	0	1400	16	53.7*
4000	VL	00	0	1600	19	0

*) basierend auf 1.5mm3/ASP bei RDF (Hu = 42900J/g)

Tabelle 4-5: Betriebsbedingungen der Volllastuntersuchungen.

Die in der Haupteinspritzung eingespritzte Kraftstoffmasse wurde bei gleichzeitiger Anpassung der Einspritzlage zur Erzielung gleicher 50%-Umsatz-Lagen, soweit erhöht, bis mechanische (Spitzendruck; Druckanstieg; max. Abgastemperatur) oder vordefinierte verbrennungsspezifische (Luftverhältnis; Schwärzungszahl) Grenzen erreicht wurden. In Tabelle 4-6 sind diese Grenzwerte angeführt.

		Motormechanik	Verbrennung		
Grenzwerte	Spitzendruck Druckanstieg		Abgas- temperatur	Luftverhältnis	Schwärzungs- zahl
Abkürzung	pMax	dp/dφ	Т3	λ	FSN
Einheit	bar	bar/°KW	C°	-	-
Wert	≤145	≤10	≤780	≥1.4	≤3

Tabelle 4-6: Grenzwerte für Volllastuntersuchungen.

4.2.3 Optische Untersuchungen an einer Konstant-Volumen Zelle

Ziel der Grundlagenuntersuchungen, die am LAV der ETH Zürich durchgeführt wurden, war die Charakterisierung des Einflusses der Kraftstoffeigenschaften auf den gesamten Prozessablauf vom Austritt des Kraftstoffs aus der Düse über die Ausbreitung der flüssigen Phase mit und ohne Einfluss der Verdampfung bis hin zur Zündung und Verbrennung des Kraftstoff/Luft Gemischs inklusive Russbildung und Russoxidation in einem kontrollierten Umfeld.

Der Einfluss der Kraftstoffe auf das hydraulische Verhalten des Injektors wurde mit Messungen an einem Einspritzprüfstand erfasst (Abschnitt 4.2.4).

Die optischen Untersuchungen fanden bei unterschiedlichen Betriebsbedingungen, die durch verschiedene Gaszusammensetzungen, Gastemperaturen und –Drucke dargestellt wurden, in einer Hochtemperatur- und Hochdruck-Zelle statt (Abbildung 4-7). Die Temperatur des Punktes A von 400K lag noch unterhalb des Siedebeginns der untersuchten Kraftstoffe und ermöglichte die Untersuchung der Einspritzstrahlausbreitung ohne Verdampfungseinfluss. Bei Punkt B lag die Temperatur (650K) bereits über dem Siedeende aller untersuchten Kraftstoffe. Hier konnte der Einfluss der Verdampfungseigenschaften auf die Ausbreitung des Einspritzstrahls untersuchen werden. Im Betriebspunkt C wurde die Zelle im Unterschied zu den Punkten A und B mit Luft anstelle von Stickstoff betrieben, um die Zündung und Verbrennung des Kraftstoffes zu ermöglichen. Die für den reaktiven Messpunkt definierte Gastemperatur von 950K und der definierte Druck von 55bar entsprechen einem repräsentativen thermodynamischen Zustand im Einzylindermotor zum Zeitpunkt des Einspritzbeginns.



Abbildung 4-7: Betriebsbedingungen für die optischen Messungen in der HTDZ.

Die Gasdichte von 19.4^{kg}/_m³ wurde für alle Messpunkte konstant gehalten um den Einfluss der aerodynamischen Kräfte auf den Strahlaufbruch für die verschiedenen Betriebspunkte konstant zu halten.

Bei den motorischen Untersuchungen wurde die Ansteuerdauer des Injektors angepasst um die für den entsprechenden Betriebspunkt definierte Last in Abhängigkeit des Kraftstoffs zu erreichen. Da bei den optischen Untersuchungen aber vergleichbare Bedingungen für die Einspritzstrahlausbreitung gegeben sein sollten, wurden hier für alle Kraftstoffe identische Ansteuerzeiten festgelegt, die in folgende Untersuchungsmatrix resultierten (Tabelle 4-7):

			Einspritzdruck				
				bar			
			500	1000	1500		
Ansteuerdauer des Injektors	110	500	500 / 500	500 / 1000	500 / 1500		
	μs	1000	1000 / 500	1000 / 1000	1000 / 1500		

Tabelle 4-7: Einspritzparameter der optischen Messungen.

4.2.4 Einspritzratenmessung

Zur Quantifizierung des Kraftstaufeinflusses auf das hydraulische Verhalten des Injektors, also Einspritzrate und Einspritzmenge in Abhängigkeit von Ansteuerdauer und Raildruck wurden am LAV umfangreiche Untersuchungen mit einem Injection Analyzer der Firma IAV GmbH (vgl. Abschnitt 5.2) durchgeführt. Die Einspritzparameter bestanden einerseits aus den für die optischen Messungen definierten Kombinationen aus Ansteuerdauer und Einspritzdruck und andererseits aus allen Minimal- und Maximalwerten der in Abhängigkeit des Kraftstoffs und des Betriebspunkts resultierenden Ansteuerdauern uns Raildrücken aus den motorischen Untersuchungen.

Neben der Bestimmung des Kraftstoffeinflusses auf das hydraulische Injektorverhalten, dienten diese Daten zur Bestimmung des hydraulischen Verzugs und ermöglichten so eine Quantifizierung der Zündverzugszeit vom Eintritt des Kraftstoffs in den Brennraum bis zur Wärmefreisetzung durch die Verbrennung (vgl. Abschnitt 6.1.1).

5 Versuchsträger und Versuchsdurchführung

5.1 Einzylinderaggregat und Motorprüfstand

Die motorischen Untersuchungen fanden an einem Einzylinderaggregat statt. Dies bietet im Gegensatz zur Verwendung eines Vollmotors den Vorteil einer sehr exakten Bestimmung des Luftverhältnisses im Zylinder. Weiterhin ist es möglich alle, für die Verbrennung relevanten Umgebungsbedingungen zu beeinflussen und in weiten Grenzen zu variieren. Durch die Konditionierung aller Betriebsmedien war eine größtmögliche Reproduzierbarkeit der Messbedingungen während der Untersuchung aller Kraftstoffe gegeben.

5.1.1 Motor

Das von der Daimler AG zur Verfügung gestellte Aggregat ist vom 4-Zylinder PKW Motor der Baureihe OM646 Evo abgeleitet. Der 4-Ventil-Zylinderkopf des Vollmotors baut auf ein universelles Kurbelgehäuse auf. Mittels speziell gefertigter Kurbelwelle und Zylinderadapter sind die geometrischen Eigenschaften des Vollmotors exakt abgebildet. Somit ist eine Verwendung des Serienkolbens (ω-Mulde) und des Serienpleuls möglich. Weiterhin konnten die Nockenwellen des Vollmotors verwendet werden, wobei nur die Ventile des ersten Zylinders betätigt werden. Der Verringerung der Drehungleichförmigkeit erfolgt gegenüber dem Vollmotor, der über einen Lanchester-Ausgleich verfügt [41], konstruktionsbedingt über ein Schwungrad mit hohem Trägheitsmoment. Speziell gefertigte Flansche erlauben die Verbindung der, für den Betrieb nur eines Zylinders modifizierten Luft- und Abgaskrümmer an den prüfstandseitigen Luft- und Abgaspfad. Die Öl- und Wasserkanäle des Zylinderkopfs wurden bearbeitet, um eine Versorgung im Einzylinderbetrieb zu gewährleisten. Einen geänderter (Versuchsmotoren-) Gusskern ermöglicht die Applikation eines zentralen, brennraumbündigen Hochdruckaufnehmers.

Im Gegensatz zum Serienmotor wird ein Common-Rail-Einspritzsystem der Firma Robert Bosch GmbH verwendet. Es verfügt über eine zentrale Injektorlage und wird durch eine vom Kurbeltrieb angetriebene 3-Stempel Hochdruckpumpe gespeist, die Einspritzdrücke von bis zu 1600bar erlaubt. Durch das von Moment- und Mengenstruktur freigeschnittene ETK-Steuergerät können Ansteuerbeginn, -dauer und Raildruck der einzelnen Einspritzungen direkt vorgegeben werden. Die dafür verwendete Applikationssoftware INCA-PC stammt von der Firma ETAS GmbH.

Die grundlegenden Daten des Einzylinderaggregats sind in Tabelle 5-1 zusammengefasst.

	Bezeichnung	Einheit	
	Hersteller / Baureihe	-	Mercedes-Benz / OM646 Evo
	Hubraum	CM3	537.4
	Bohrung	mm	88
anik	Hub	mm	88.4
cha	Pleullänge	mm	147
Me	Verdichtung (geom.)	-	16.7
	Spitzendruck	bar	145
	max. Druckanstieg	bar/°KW	10
	Anzahl	-	4
	Ø Einlass	mm	28.7
	Ø Auslass	mm	26.2
-Qe	Winkel Einlass	0	9.22
Itri	Winkel Auslass	0	9.98
enti	max. Hub (E/A)	mm	7.9
≫	Einlass öffnet (0mm)	°KW v.OT	10.0
	Einlass schließt (0mm)	°KW n.UT	52.5
	Auslass öffnet (0mm)	°KW v.UT	38.6
	Auslass schließt (0mm)	°KW n.OT	23.9
p	Injektor	-	CRI 2.2 (Magnetventil), Robert Bosch GmbH
zur	- Düse –		Minisackloch
orit:	- Spritzlöcher	-	7, ø 0.136mm
INS	Hochdruckpumpe	-	CPS3, Robert Bosch GmbH
Ш	Max. Raildruck	bar	1600

Tabelle 5-1: Daten des Einzylinderaggregats.

5.1.2 Prüfstandsaufbau

Die motorischen Untersuchungen fanden im Umfeld eines speziell für den Einzylinderbetrieb ausgerüsteten Prüfstands statt. Oberste Zielsetzung beim Aufbau war die größtmögliche Reproduzierbarkeit der Messbedingungen. Dies ist gerade deshalb notwendig, da eine Bewertung der verschiedenen Kraftstoffe nur auf deren Vergleich basieren kann, und somit die Ergebnisse nur von den unterschiedlichen Kraftstoffeigenschaften abhängig sein dürfen. So stellt die exakte Konditionierung des Druckes und der Temperatur aller Betriebsmedien, namentlich Luft, rückgeführtes Abgas, Kraftstoff, Schmieröl und Kühlwasser die größte Herausforderung des Aufbaus dar.

Luft und Abgaspfad:

Da eine Abgas-Turbo-Aufladung, wie sie beim Vollmotor zum Einsatz kommt, bei Betrieb nur eines Zylinders nicht praktikabel ist, wurde die Ladeluft durch einen externen Kompressor verdichtet. Als Regelgröße diente der im Saugrohr gemessene, integrale Absolutdruck. Um den Ladungswechsel den Gegebenheiten des Vollmotors anzunähern, wurde auf der Abgasseite ein thermisch hoch belastbares Gleitschieberventil eingesetzt und dadurch eine Regelung des Abgasgegendrucks ermöglicht. Das Gleitschieberventil wurde stromabwärts eines Dämpfungsbehälters verbaut um trotz der, aufgrund des Einzylinderbetriebs, hohen Druckschwingungen eine stabile Regelung zu gestatten. Regelgröße war hier der integrale Absolutdruck im Auslasskrümmer. Besonderes Augenmerk wurde auf eine präzise Regelung der Ladelufttemperatur bzw. der Temperatur des Gemisches aus Ladeluft und rückgeführtem Abgas gelegt. Die vom Verdichter kommende, gekühlte Ladeluft wurde beim Durchströmen einer elektrisch heizbaren Wabenstruktur (Katalysatorheizung) auf die gewünschte Zieltemperatur geregelt. Um Temperaturänderungen zu vermeiden wurden die Luft führenden Bauteile stromabwärts der Ladeluftheizung ebenfalls thermisch konditioniert. Das ladeluftseitig verbaute Dämpfungsfass wurde durch einen Wassermantel, die folgende Luftstrecke bis zum Einlasskrümmer durch ein Heizband beheizt.

Abgasrückführstrecke:

Das Abgas wurde direkt im Krümmer entnommen. In Abhängigkeit des Betriebspunkts traten hier sehr hohe Temperaturen auf, die durch einen ersten Gegenstrom-Wasserkühler (Kühlwassertemperatur 15°C, variabler Durchfluss) bedarfsgerecht reduziert wurden. Über ein nachgeschaltetes Ventil wurde die gewünschte Abgasrückführrate geregelt. Ein zweiter Gegenstromwasserkühler, der vom selben Wasserkreislauf versorgt wurde wie das luftseitige Dämpfungsfass, sorgt für eine, der Ladeluft ähnliche Temperatur des rückgeführtem Abgases bevor dieses in das Dämpfungsfass eingeleitet wurde.

Kraftstoffzufuhr:

Primäre Anforderungen an das Kraftstoffsystem war eine präzise Messung des Kraftstoffmassenstroms. Weiterhin sollte die eingespritzte Kraftstoffmasse in Abhängigkeit der Ansteuerdauer des Injektors so konstant wie möglich sein. Dazu wurde eine Kraftstoffkonditionierung der Firma AVL, Typ 753C eingesetzt. Diese wurde einerseits für die Temperaturregelung (25°C) und andererseits für eine definierte Vorverdichtung (4bar) des Kraftstoffs eingesetzt. Ein weiterer Vorteil dieser Konditionierung ist die automatische Dampfblasenerkennung, die für eine präzise Kraftstoffmassenmessung unerlässlich ist. Zur Zufuhr wurde eine pneumatische Pumpe installiert, die den Kraftstoff aus Behältern im Prüfstand zur Kraftstoffwaage förderte. Dies gewährleistete ein geringes Spülvolumen und somit einen geringen Kraftstoffverlust beim Kraftstoffwechsel.

Schmieröl- und Kühlwasserversorgung:

Da der Einzylindermotor über keinerlei Nebenaggregate verfügt, mussten auch das Motoröl sowie das Kühlwasser prüfstandsseitig zur Verfügung gestellt werden. Dies erfolgte mit Konditioniereinrichtungen durch die sowohl Druck als auch Temperatur bedarfsgerecht geregelt werden konnten. Die Solltemperaturen von Öl und Kühlwasser wurden bei 80°C festgelegt. Das Schmieröl wurde dem Motor über drei Wege zugeführt: Die Nockenwellen und die Kolbenspritze wurden konstant mit je 3,2 bar, die Kurbelwelle mit 3,5 bar versorgt.

Leistungsbremse:

Zur Aufnahme der vom Verbrennungsmotor abgegebenen Leistung kam eine Gleichstrompendelmaschine zum Einsatz. Neben dem Generatorbetrieb war auch der Betrieb als Motor und somit ein Schleppen des Einzylinderaggregats möglich.

Zentrale Schnittstelle, Steuer- und Regeleinheit ist das auf der Programmierumgebung LabVIEW basierende Prüfstandautomatisierungssystem Autotest2000 der Firma Technogermasystems. Hier sind alle Reglerstrukturen hinterlegt und parametriert, soweit diese nicht in den Geräten selbst integriert sind. Des Weiteren wird der Ablauf der Messroutine gesteuert, die Messgrößen werden erfasst und dokumentiert.

Der schematische Aufbau des Prüfstands ist Abbildung 5-1 in dargestellt.



Abbildung 5-1: Schematischer Prüfstandsaufbau.

5.1.3 Messtechnik

Indizierung:

Den Kern der Messtechnik bildet die Brennraumdruckindizierung, die mittels eines brennraumbündigen Quarz-Drucksensors der Firma Kistler (6061B) dargestellt wurde. Um eine Ladungswechselanalyse durchführen zu können, wurde zudem eine Niederdruckindizierung appliziert. In beiden Einlasskanälen (Füllungskanal, Drallkanal) sowie im Auslasskanal kamen piezoresistive Absolutdrucksensoren (Kistler 4045A) zum Einsatz. Die online-Auswertung der gemessenen Brennraumdrücke erfolgte mittels des Software IndiGO des FKFS.

Luftmassenmessung:

Zur Luftmassenmessung wurde ein Heißfilm-Anemometer mit definierter Beruhigungsstrecke verwendet (Firma ABB, Sensyflow P). Aufgrund des weiten Betriebsbereichs von sehr niedrigen Drehzahlen und Ladedrücken bis zum Nennleistungspunkt, wurden zwei Massenstrommesser mit verschiedenen Messbereichen eingesetzt um die Auflösung speziell bei Betriebspunkten niedriger Teillast zu erhöhen.

Kraftstoffmassenmessung:

Der Kraftstoffmassenstrom wurde gravimetrisch mittels der Kraftstoffwaage 733S der Firma AVL bestimmt. Da alle Messungen stationär durchgeführt wurden, war es möglich eine quasistationäre Kraftstoffmassenmessung mit Zeitnormal durchzuführen. Dazu wurden der mittlere Verbrauch während einer Zeit von 10s und die Standardabweichung dokumentiert. Letztere stellte ein Stabilitätskriterium für eine erfolgreiche Messung dar. Bedingt durch den relativ niedrigen Verbrauch des Einzylinderaggregats konnte ein kleiner Messbereich mit hoher Auflösung und Genauigkeit gewählt werden.

Messung der Abgasbestandteile:

Zur Bestimmung der Konzentration der Abgasbestandteile Kohlendioxid, Kohlenmonoxid, Kohlenwasserstoffe, Stickoxide und Restsauerstoff wurde eine Abgasmessanlage AMA2000 der Firma Pierburg eingesetzt. Dazu wurde das heiße Abgas direkt nach dem Krümmer entnommen und der Messanlage über eine beheizte Entnahmeleitung zugeführt um ein Auskondensieren speziell von Kohlenwasserstoffen zu verhindern. Wie bei der Abgasanalyse der Verbrennung flüssiger Kohlenwasserstoffe üblich wurde Propan (C3H8) als Äquivalent angenommen. Zur Russquantifizierung wurde die Papierschwärzungsmethode gewählt. Das hierfür eingesetzte Messgerät 415S verfügte über eine separate Entnahmeleitung, die nach einem abgasseitigen Dämpfungsbehälter installiert wurde.

Weiterhin wurde eine Vielzahl von integralen Temperatur- und Druckmessstellen appliziert, die zur Überwachung der Betriebs- und Messbedingungen dienten, im Detail aber hier nicht näher aufgeführt werden. Die wichtigsten Messgrößen stellten Temperatur und Druck im Saugrohr und im Auslasskrümmer dar, da diese als Istgrößen in die Reglerstrukturen der Ladeluft- und Abgasregelung einflossen.

5.1.4 Versuchsablauf

Wie oben beschrieben wurden die Betriebspunkte als Kombination der Parameter Drehzahl, Last (p_{mi}), Temperatur im Saugrohr, Abgasrückführrate, Raildruck und 50%-Umsatz-Lage (H50) definiert. Daraus ergab sich die Methodik des Anfahrens der Betriebspunkte: Nach dem Erreichen der Solldrehzahl im Schleppbetrieb wurde die Ladelufttemperatur bei gegebenem Ladedruck eingeregelt. Die Einspritzung wurde mit dem Sollwert des Raildrucks an einem stabilen Referenzpunkt in Betrieb genommen. Anhand der Rückmeldung der Größen p_{mi} und H50 durch die Indiziersoftware wurden, durch Variation des Ansteuerbeginns und der Ansteuerdauer der Einspritzung, die entsprechenden Sollwerte eingestellt. Bei Betrieb mit AGR wurde nun das AGR-Ventil schrittweise bis zum Erreichen des Sollwerts geöffnet. Währenddessen konnten die Parameter Temperatur im Saugrohr, p_{mi} und H50 gegebenenfalls nachjustiert werden. Vor dem Start der Messroutine wurde die Erfüllung der Stabilitätskriterien überprüft. Diese sind in Tabelle 5-2 dargestellt.

	Drehzahl	Last	TSR	AGR	H50
Kennwert	σ_N/N	σ_pmi/pmi	absolut	absolut	absolut
Einheit	-	-	°C	%	°KW
Zulässige Abweichung	0,003	0,01	+/- 0,5	+/- 2	+/- 0,3

Tabelle 5-2: Stabilitätskriterien für die Zulässigkeit einer Messung.

Die Messdatenerfassung während der Messroutine erfolgte durch zwei Rechner. Das Indiziersystem erfasst 300 Arbeitsspiele in Grad Kurbelwinkel aufgelöst, die sowohl einzeln aufgezeichnet wurden als auch in einer gemittelten Datei. Die gemittelten Indizierkennwerte wurden zusätzlich an das Prüfstandssystem übertragen. Mit Beginn der Messroutine wurden auch die Abgasanalyse, die Russmessung und die Kraftstoffmassenmessung gestartet. Das Prüfstandautomatisierungssystem speichert nach einer definierten Vorlaufzeit für die Abgasmessung während 60 Sekunden zu jeder Sekunde den aktuellen Messwert der Luftmasse, der Abgaskonzentrationen und aller integralen Druck- und Temperatur-Messstellen. Sowohl die Routine zur Kraftstoffmassenmessung als auch zur Russbestimmung waren in den jeweiligen Messgeräten hinterlegt. Die Kraftstoffmasse wurde zeitbasiert gemessen, d.h. ein über 10s ermittelter Wert wurde erfasst. Während der Messroutine wurden 10 Messungen aufgezeichnet und der gemittelte Wert zur Dokumentation an das Prüfstandsautomatisierungssystem übergeben. Die Schwärzungszahl wurde pro Messablauf zweimal ermittelt und der daraus resultierende Mittelwert dokumentiert.

5.2 IAV Injection Analyzer

Die Bestimmung des hydraulischen Einspritzbeginns sowie der Einspritzrate und der Einspritzdauer in Abhängigkeit des untersuchten Kraftstoffes erfolgte mit einem Injection Analyzer der Firma IAV GmbH am LAV der ETH Zürich. Um die Hochdruckpumpe des Einspritzprüfstands nicht durch unterschiedliche Schmiereigenschaften der Kraftstoffe zu belasten, und um den Verbrauch der speziellen Kraftstoffe möglichst niedrig zu halten, wurde der zu untersuchende Kraftstoff mit einem Medientrenner vom Standard-Prüföl des Einspritzprüfstands getrennt (siehe Abbildung 5-2).



Abbildung 5-2: Einspritzratenmessung unter Verwendung eines Medientrenners (Kolben trennt Kraftstoff vom Hochdrucksystem des Prüfstands).

Die Wirksamkeit der Trennung zwischen dem Prüföl und dem untersuchten Kraftstoff im Medientrenner wurde durch eine Kontrollmessung der Kraftstoffzusammensetzung mit einem Gaschromatographen bestätigt.

Um den Einfluss der untersuchten Kraftstoffe auf die Eigenschaften der Einspritzdüse feststellen zu können, wurden möglichst identische Messbedingungen durch einen standardisierten Ablauf der Messreihen (mit Warmlaufphasen und Kontrollmessungen zu Beginn und am Ende jeder Messreihe) angestrebt. Die Präzisionswaage am Rücklauf aus dem Einspritzindikator ermöglichte eine zusätzliche Kontrolle der vom Injection Analyzer berechneten eingespritzten Kraftstoffmasse.

5.3 Hochtemperatur- / Hochdruckzelle

5.3.1 Zusammenfassung der Eigenschaften der HTDZ

Die konstant-Volumen Hochtemperatur- und Hochdruckzelle (HTDZ) des LAV besteht aus einem Brennraum von 110mm Durchmesser und 40mm Tiefe (Abbildung 5-3). Auf der einen Seite der Kammer befindet sich die zentrale Einbauöffnung für die Einspritzdüse sowie die Gaswechselorgane und weitere Öffnungen für Sensoren. Auf der anderen Seite erlaubt ein großes Saphirfenster mit Ø90mm freier Sichtweite die Beobachtung der Einspritzstrahlen bzw. der Verbrennung. Rundherum können bis zu vier kleinere Fenster (mit Ø48mm freier Sichtweite) eingebaut werden. Der verwendete Common-Rail Injektor entspricht dem Injektor der in den motorischen Untersuchungen eingesetzt wurde (siehe Tabelle 5-1). Die Ansteuerung erfolgte hier mittels eines "Fi2re" Steuergeräts der Firma IAV GmbH. Für die Messungen in der Hochdruckzelle wurde der notwendige Einspritzdruck über einen pneumatischen Druckwandler erzeugt (HAWE).

Die Zelle und das zugeführte Gas (Stickstoff oder Luft) können elektrisch auf bis zu 750K erwärmt werden, wobei der maximale Fülldruck der Zelle vor der Verbrennung bei 100bar liegt. Der Injektor wird bis zur Düsenspitze von einem Wassermantel umgeben um ihn vor den hohen Wandtemperaturen des Zellkörpers zu schützen.



Abbildung 5-3: Hochtemperatur- und Hochdruckzelle des LAV mit dem Aufbau für die optische Erfassung der Einspritzstrahlen.

Um Untersuchungen bei Temperaturen von bis zu 1000K durchführen zu können, wurde die Zelle zusätzlich mit einer Wasserstoffvorverbrennung ausgerüstet. Das hierbei realisierte Konzept sieht vor, dass der Wasserstoff und die Luft (oder ein beliebiges sauerstoffhaltiges Gasgemisch) in separaten Zylindern bereitgestellt werden. Ein großer Luftzylinder komprimiert die Gase auf einen hohen Druck und entlässt sie (bei Vorverbrennungsbeginn) in eine in der Zelle eingebaute Vorbrennkammer, wo sich die Gase mischen und an einer glühenden Platindrahtwendel entzünden. Die resultierende Flamme gelangt über die mit CFD Rechnun-

gen optimierte Düse [42] in die Zelle und wärmt das dort bereits vorhandene, vorgeheizte Gas weiter auf.

Einen kompletten Zellenzyklus zeigt Abbildung 5-4. Die Zelle wurde zu Beginn des Zyklus mit Luft unter 25bar Druck gefüllt. Nach dem Schließen des Einlassventils erfolgte die sehr schnell ablaufende Vorverbrennung, wodurch der Zelldruck auf 80bar und die Zelltemperatur auf etwa 1350K anstieg. Durch die Wandwärmeverluste sank die Gastemperatur in der Zelle rasch ab, bis die gewünschten Messbedingungen von 55bar und 950K erreicht wurden. Die Auslösung der Kraftstoff-Einspritzung erfolgte auf Basis des Zelldrucks.



Abbildung 5-4: Kompletter Zellenzyklus mit Vorverbrennung, Diesel-Einspritzung und Verbrennung.

Ein ausreichender zeitlicher Abstand zwischen der Vorverbrennung und der Injektion ist zur Homogenisierung der Temperaturverteilung in der Zelle und zur Abschwächung der aus der Verbrennung resultierenden Turbulenz nötig. Abschätzungen wurden dazu anhand von CFD Berechnungen angestellt [42].

Im hier vorgestellten Fall wurde die Vorverbrennung mit Wasserstoff und normaler Luft betrieben. Dadurch sank der Sauerstoffgehalt in der Zelle nach der Vorverbrennung auf etwa 70% des Ausgangswertes, was aber die Verfügbarkeit von Sauerstoff für die Kraftstoffverbrennung aufgrund des hohen Zellvolumens kaum einschränkte.

5.3.2 Bei Untersuchungen in der HTDZ eingesetzte Messtechnik

Die Brennkammer der HTDZ ist standardmäßig mit einem piezoelektrischen Drucksensor von der Firma Kistler ausgerüstet. In der Gaszuführung vor dem Einlassventil befindet sich zusätzlich ein Absolutdrucksensor von Kistler. Die Gastemperatur in der Zelle wird mit einem oder mehreren Thermoelementen gemessen, schnelle Temperaturgradienten können aber bedingt durch die Trägheit der Thermoelemente nicht erfasst werden.

Für die optische Erfassung der Ausbreitung der flüssigen Phase der Einspritzstrahlen unter nicht reaktiven, verdampfenden und nicht verdampfenden Bedingungen wurde eine Hochgeschwindigkeitskamera des Typs High Speed Star 6 von LaVision eingesetzt. Diese kann bei einer Bildgrösse von 1024x1024 Pixel (12 Bit Graustufenauflösung) bis zu 5400 Bilder pro Sekunde aufnehmen. Bei den Messungen der Einspritzstrahlausbreitung wurde die Bildgrösse auf 512x384Pixel reduziert um eine höhere Bildfrequenz von 27 kHz zu erreichen (zeitlicher Bildabstand 37µs), wobei nicht alle Einspritzstrahlen abgebildet wurden.

Die Einspritzstrahlen wurden dazu durch die vier seitlichen Fenster der Zelle mit Halogenlampen möglichst gleichmässig beleuchtet. Abgebildet wurde das von den Tröpfchen und anderen flüssigen Strukturen im Einspritzstrahl gestreute Licht (Mie Streuung). Die Intensität dieses Streulichts ist hauptsächlich abhängig von der Dichte der Streuzentren (Tröpfchendichte) und der von der Kameraseite her gesehenen "Schichtdicke" der Streuzone (Einspritzstrahlausdehnung in Kamerarichtung). Im mittleren Bereich der Einspritzstrahlen ist die Streulichtintensität am höchsten und fällt dann gegen den Rand des Strahls auf den Wert der (unvermeidbaren) Hintergrund-Streulichtintensität ab.

Für die Messungen der OH-Chemilumineszenz unter reaktiven Bedingungen wurde die Kamera mit einem UV-empfindlichen Hochgeschwindigkeits-Bildverstärker (IRO) von LaVision ergänzt. Die Chemilumineszenz-Emission des OH Radikals bei etwa 312nm wurde mittels eines schmalbandigen Interferenzfilters (Zentralwellenlänge 311,7nm, Halbwertsbreite 5,3nm) herausgefiltert. Für die Abbildung wurde ein speziell für den UV-Wellenlängenbereich entwickeltes Objektiv von Sodern eingesetzt. Bei diesen Messungen wurde der maximal sichtbare Bereich der Einspritzstrahlen (Ø90mm) mit einer Bildgrösse von 512x512 Pixel abgebildet, dies ermöglicht eine Bildfrequenz von 20kHz (50µs Bildabstand).

Die Intensität des Russleuchtens für die Dreifarbenpyrometrie wurde mittels einer optischen Sonde (Optical Light Probe, OLP) durch das grosse Fenster der Zelle erfasst und bei den Wellenlängen von 680nm, 790nm und 903nm gemessen und ausgewertet (Abbildung 5-3). Die optische Sonde stammte aus einem laufenden Projekt (KTI 10604.1 PFNM-NM) des LAV, in dem zusammen mit zwei Schweizer Industriepartnern (Firma Kistler aus Winterthur und Sensoptic aus Losone) ein miniaturisierter Russsensor für Messungen im Motor entwickelt wird.

6 Datenauswertung

6.1 Definition von Kennwerten

Zur Beurteilung der Kraftstoffe aus motorischer Sicht wurden mehrere Verbrennungs-, Verbrauchs- und Emissionskennwerte gewählt, siehe Tabelle 6-1. Dazu mussten die am Prüfstand gewonnen Daten nachbearbeitet, analysiert und ausgewertet werden.

Verbrennungskennwerte		Verbrauchskennwerte		Emissionskennwerte	
Name	Abkürzung	Name	Abkürzung	Name	Abkürzung
Zündverzug	ZV [ms]	Spezifischer Verbrauch	bi [g/kWh]	Spezifische Kohlenmonoxid- emissionen	CO_P [g/kWh]
50%-Umsatz-Lage auf Heizverlaufbasis	H50 [°KW n.OT]	Energieeintrag	mB*Hu [J/ASP]	Spezifische Kohlenwasserstoff- emissionen	HC_P [g/kWh]
50%-Umsatz-Lage auf Brennverlaufbasis	B50 [°KW n.OT]	Spezifische Kohlendioxid- emissionen	CO2_P [g/kWh]	Spezifische Stickoxidemissionen	NOX_P [g/kWh]
Brenndauer: Brenn- beginn bis 50%- Umsatz	BDBB50 [ms]			Spezifische Russemissionen	Russ_P [mg/kWh]
Brenndauer: 50%- bis 90% -Umsatz	BD5090 [ms]				
Brenndauer: Brenn- beginn bis 90%- Umsatz	BDBB90 [ms]				

Tabelle 6-1: Verbrennungs-, Verbrauchs- und Emissionskennwerte zur Beurteilung der Kraftstoffe aus motorischer Sicht.

6.1.1 Bestimmung der Verbrennungskennwerte

Grundlage der Verbrennungskennwerte waren die am Prüfstand gemessenen, Grad Kurbelwinkel aufgelösten Druckverläufe aus Hoch- und Niederdruckindizierung. Während die direkte Betrachtung am Prüfstand lediglich eine Beurteilung des Heizverlaufs erlaubte, wurden im Nachgang (offline) Druckverlaufsanalysen unter Berücksichtigung der Wandwärmeverluste durchgeführt. Zur Ermittlung der Brennverläufe wurden mittels der Software Tiger der Firma EnginOS Gesamtanalysen (d.h. sowohl Analysen des Hochdruckteils als auch des Ladungswechsels) durchgeführt. Die dabei essentielle Nulllinienfindung basiert dabei auf der Referenzdruckmethode, wobei die Druckreferenz durch den Drucksensor im Drallkanal im Bereich von 15°KW vor bis 5°KW nach GUT dargestellt wurde. Zur Ermittlung der Wandwärme wurde ein Wandwärmemodell nach Hohenberg verwendet.

Für die Bestimmung des Zündverzugs (siehe Abbildung 6-1) war die Kenntnis von zwei Größen notwendig: Zum einen wurde der hydraulische Einspritzbeginn benötigt, der um den hydraulischen Verzug später auftritt, als die elektrische Ansteuerung der Einspritzung. Dieser wurde in umfangreichen Messreihen mittels eines IAV Injection Analyzers am LAV für alle
Kraftstoffe unter verschiedensten Bedingungen ermittelt (vgl. Abschnitt 4.2.4). Zum anderen musste der Brennbeginn ermittelt werden. Dies geschah in einem ersten Ansatz mit der Nulldurchgangsmethode. Das heißt der Brennbeginn wurde definiert als $dQ_b = 0$ nach dem Wärmeentzug durch die Verdampfungsenthalpie des eingespritzten Kraftstoffs. Der Zündverzug ist nun die Differenz aus hydraulischem Einspritzbeginn und Brennbeginn.



Abbildung 6-1: Definition des Zündverzugs.

Wie bereits erwähnt, handelte es sich bei der Bestimmung des Brennbeginns mittels der Nulldurchgangsmethode um einen ersten Ansatz. Dieser wies zwar bei der Auswertung der Brennverläufe aus Blockeinspritzuntersuchungen durchweg zufriedenstellende Ergebnisse auf, war allerdings bei der Auswertung von mit Mehrfacheinspritzung erzielten Messdaten teilweise nicht anwendbar. Der Grund hierfür liegt in der zum Teil aufgetretenen Überlagerung der Wärmefreisetzung durch die Voreinspritzung und dem Wärmeentzug durch die Verdampfung des in der Haupteinspritzung eingespritzten Kraftstoffs. Die Folge ist in Abbildung 6-2 veranschaulicht: Nach dem Wärmeentzug durch die Verdampfungsenthalpie wurde die Nulllinie nicht in jedem Fall durchschritten und somit war dieses Kriterium nicht mehr anwendbar.



Abbildung 6-2: Nulllinenmethode zur Bestimmung des Brennbeginns bei Mehrfacheinspritzung.

Deshalb musste ein Kriterium entwickelt werden, das sowohl für Untersuchungen mit als auch ohne Voreinspritzung anwendbar ist. Es wurden zwei Punkte im Brennverlauf gewählt, die durch das Maximum und 50% des Maximums der 1. Ableitung des Brennverlaufs definiert sind. Durch diese beiden Punkte wurde eine Tangente gelegt, deren Nulldurchgang dann stellvertretend den Brennbeginn ausweißt, wie dies Abbildung 6-3 illustriert ist.



Abbildung 6-3: Bestimmung des Brennbeginns nach der Tangentenmethode.

Somit war ein Nulldurchgang des Brennverlaufs nach dem Wärmeentzug durch die Verdampfungsenthalpie für die Bestimmung des Brennbeginns nicht mehr notwendig. Ein Vergleich der gefundenen Brennbeginne mit Nulldurchgangs- und Tangentenmethode der Untersuchungen mit Blockeinspritzung zeigte sehr gute Übereinstimmung der Werte. Folglich war es möglich das Tangentenkriterium durchgängig anzuwenden. Bei der Bestimmung des Zündverzugs bei Untersuchungen mit Mehrfacheinspritzung wurde der zeitliche Abstand zwischen Haupeinspritzung und Wärmefreisetzung durch die Hauptverbrennung herangezogen, d.h. die Wärmefreisetzung durch die Voreinspritzung wurde als "Konditionierung" des Brennraums definiert.

Die 50%-Umsatz-Lagen wurden in beiden Fällen, d.h. sowohl auf Basis des Heizverlaufs als auch auf Basis des Brennverlaufs als Lage (Kurbelwinkel) von 50% der umgesetzten Energie definiert. Dazu war in einem ersten Schritt die Summe bzw. der summarische Verlauf der umgesetzten Energie zu berechnen, die folgendem Integral (Gleichung (6.1) entspricht:

$$Q = \int_{\phi_{BB}}^{\phi_{BE}} \frac{dQ}{d\phi} \cdot d\phi$$
 (6.1)

Zur Berechnung der Kennwerte war eine auf die umgesetzte Energie normierte Betrachtung obiger Gleichung sinnvoll. Damit ergaben sich die Kurbelwinkel der 50%-Umsätze aus Heizverlauf (H50, Q = Q_h) und Brennverlauf (B50, Q = Q_b) wie folgt ((6.2, (6.3):

$$X(\phi) = \frac{Q(\phi)}{Q_{UM}}$$
 (6.2) 50% - Umsatzlage = $\phi(X = 0.5)$ (6.3)

Die Berechnung der Brenndauern erfolgte unter Berücksichtigung des, wie im Obigen beschrieben, ermittelten Brennbeginns, wobei:

- "BDBB50" der Zeit zwischen Brennbeginn und 50%-Umsatzlage,
- "BD5090" der Zeit zwischen 50 und 90%-Umsatzlage,
- "BDBB90" der Zeit zwischen Brennbeginn und 90%-Umsatzlage

entspricht. Die Umsatzlagen wurden auf Basis des Brennverlaufs mittels der Gleichungen (6.2) und (6.3) bestimmt.

6.1.2 Berechnung der spezifischen Verbrauchs- und Emissionsgrößen

Wie in Abschnitt 4 erläutert, erfolgte die Einstellung aller Betriebspunkte p_{mi}-basiert. Folglich wurden alle spezifischen Größen auf die indizierte Leistung (P_i, Gleichung (6.4)) bezogen. D.h. der Reibmitteldruck bzw. die Reibleistung fand keine Berücksichtigung.

$$\mathbf{P}_{i} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{mi} \cdot \mathbf{V}_{H} \cdot \mathbf{n} \tag{6.4}$$

Die Kraftstoffmasse wurde zeitbasiert gemessen, folglich ergibt sich der spezifische Kraftstoffverbrauch zu:

$$b_{i} = \frac{m_{B,Messung}}{P_{i}}$$
(6.5)

Zur Ermittlung des Energieeintrags war die Kenntnis der pro Arbeitspiel eingespritzten Kraftstoffmasse erforderlich, die sich anhand Gleichung (6.6) berechnet. Diese wurde weiterhin mittels der stöchiometrischen Verhältnisse auf Plausibilität überprüft (Gleichung (6.7)).

$$m_{B,ASP} = \frac{m_{B,Messung}}{n}$$
(6.6)
$$m_{B,ASP} = \frac{m_{L,ASP}}{L_{st} \cdot \lambda_{Brettschneider}}$$
(6.7)

Dazu musste das stöchiometrische Verhältnis berechnet werden. Die als Gleichung (6.8) angeführte Brettschneider-Gleichung basiert auf einer Bilanzierung der gemessenen Abgaskomponenten [43].

$$\lambda = \frac{21}{(21+50\mu\chi \frac{[CO]/[CO_2]}{K+[CO]/[CO_2]})}$$

$$\cdot \frac{[CO_2] + \frac{[CO]}{2} + [O_2] + (\frac{H_{CV}}{4} \cdot \frac{K}{K+[CO]/[CO_2]} - \frac{O_{CV}}{2}) \cdot ([CO_2] + [CO]) + \frac{[NO]}{2})}{(1 + \frac{H_{CV}}{4} - \frac{O_{CV}}{2}) \cdot ([CO2] + [CO] + [HC])}$$

$$- \frac{\frac{W_{CV}}{2} \cdot \frac{[CO]/[CO_2]}{K+[CO]/[CO_2]} \cdot ([CO_2] + [CO] + [HC])}{(1 + \frac{H_{CV}}{4} - \frac{O_{CV}}{2}) \cdot ([CO_2] + [CO] + [HC])}$$
(6.8)

Die Berechnung der spezifischen Emissionsgrößen erfolgte gemäß der EWG-Richtlinie 2005/55/EG

[44]. Darin ist die Umrechnung gemessener Konzentrationen von Abgasbestandteilen für das Rohabgas von Dieselmotoren beschrieben. Bezogen auf die indizierte Leistung ergaben sich folgende Berechnungsvorschriften:

$$CO_{2} P = \frac{0,001518 \cdot [CO_{2}] \cdot (m_{L} + m_{B})}{P_{i}}$$
(6.9)

$$CO_P = \frac{0,000966 \cdot [CO] \cdot (m_{L} + m_{B})}{P_{i}}$$
(6.10)

$$HC_P = \frac{0,000479 \cdot [HC] \cdot c_{FID} \cdot (m_{L} + m_{B})}{P_{i}}$$
(6.11)

$$NO_{X} P = \frac{0,001587 \cdot [NO_{X}] \cdot (m_{L} + m_{B})}{P_{i}}$$
(6.12)

Zur Berechnung der spezifischen Russemissionen mussten die nach der Filterpapiermethode gemessenen Schwärzungszahlen durch eine empirisch ermittelte Korrelation nach [45] in einem ersten Schritt in Russkonzentrationen umgerechnet werden.

$$[\text{Russ}] = \frac{1}{0,405} \cdot \text{FSN} \cdot 5,32 \cdot \exp(0,3062 \cdot \text{FSN}) \cdot \frac{\text{R}_{\text{S}} \cdot \text{T}_{\infty}}{\text{p}_{\infty}} \qquad (6.13)$$

Folglich ergaben sich die spezifischen Russemissionen zu:

$$Russ_P = \frac{[Russ] \cdot (m_{L} + m_{B})}{P_{i}}$$
(6.14)

6.1.3 Beurteilung der optischen Untersuchungen

Die **Einspritzstrahlausbreitung** wurde anhand der Aufnahmen der Mie-Streuung analysiert. Daraus können unmittelbar zwei Messgrössen entnommen werden [47]: Zum Einen kann die Eindringtiefe des Strahls in Abhängigkeit der Zeit gemessen werden. Zum Anderen stellt die Projektion der dreidimensionalen Spray-Wolke auf die Bildebene die vom Spray erfasste Fläche dar. Da die Signalintensität innerhalb eines Bildes im Prinzip kontinuierlich vom Maximum bis zu Null abnehmen kann, wird ein Schwellwert für die Signalstärke festgelegt. Ist das Signal kleiner als dieser Schwellwert, gibt es per Definition keine flüssige Phase mehr. Bei den Messungen wurde die Beleuchtungsstärke jeweils so eingerichtet, dass die maximale Signalintensität noch im dynamischen Bereich des Detektors (0 - 4095 Signal-"counts") liegt. Als Schwellwert wurde dann für sämtliche Messungen 200 counts festgelegt, was ~5% des dynamischen Bereichs entsprach. Mit diesem einheitlichen Kriterium werden nun die Kraftstoffe bei "nicht-verdampfenden" und "verdampfenden" Zellenbedingungen verglichen. Da das Kriterium "Eindringtiefe" nicht geeignet war, um zwischen den Kraftstoffen zu differenzieren, wurden Anhand der Flächen des Sprays Unterschiede zwischen den Kraftstoffen sichtbar gemacht.

Die **OH-Chemilumineszenz** ist ein geeigneter Indikator für die Zündung und die Ausbreitung von Flammen. Aus den zeitaufgelösten Aufnahmen dieser Chemilumineszenz können also

65

Zündzeitpunkt, Ort der Zündung im Einspritzstrahl und die räumliche Entwicklung der Flammenstruktur ermittelt werden. Der Flächenanteil von aktiven Reaktionszonen an der Gesamtfläche ermöglicht eine (zumindest qualitative) Beurteilung der Verbrennungsintensität (Umsatzrate), die mit der aus der Prozessrechnung bestimmten Energiefreisetzungsrate (siehe unten) verglichen werden kann. Da die Hochgeschwindigkeitskamera für die Wellenlängen nicht empfindlich ist, bei denen die Chemilumineszenz des OH-Radikals beobachtet wird, muss für diese Messungen ein UV-empfindlicher Bildverstärker eingesetzt werden. Das Flammenleuchten und insbesondere die intensive breitbandige Russ-Emission wurden mit einem geeigneten Interferenzfilter unterdrückt. Testmessungen mit einem zusätzlichen UV-Bandpassfilter haben gezeigt, dass das benutzte Interferenzfilter das Flammenleuchten im sichtbaren und UV-nahen Bereich sehr effizient blockiert. Ein gewisser Nachteil des Bildverstärkers besteht darin, dass das räumliche Auflösungsvermögen der Bilder weniger gut war als bei den Messungen der Mie-Streuung, d.h. feinere Details wurden verwaschen abgebildet.

Die Energiefreisetzungsraten bei der Verbrennung in der HTDZ wurden basierend auf dem Einspritzverlaufs und dem Druckverlauf in der Zelle mit dem LAV-eigenen **Prozessrech-nungswerkzeug WEG** [46] bestimmt. Das Programm wurde durch ein spezielles Wandwärmeübergangsmodell an die Bedingungen der Versuchskammer angepasst.

Russmessungen wurden mittels pyrometrischer Methoden durchgeführt. Die optische Sonde, mit der das Russleuchten erfasst wurde, liefert ein räumlich gemitteltes Signal der Russstrahlung bei drei Wellenlängen im roten und nahen infraroten Spektralbereich, welches zur Dreifarbenpyrometrie verwendet wird. Das Signal wurde zusammen mit dem Druckverlauf auf einem Transientenrekorder mit hoher zeitlicher Auflösung aufgezeichnet. Die Auswertung der gemessenen Russleuchtintensitäten bei den drei Wellenlängen erfolgte ebenfalls im LAV-eigenen Prozessrechnungsprogramm WEG. Die Berechnung der Russtemperatur und des KL Faktors als Mass für die Russ-Konzentration wurde durch in mehreren am LAV vorangegangenen Projekten validiert [48], [49]. Die ermittelte Russtemperatur, d.h. näherungsweise die Gastemperatur der Reaktionszone, konnte wiederum mit der aus der Prozessrechnung ermittelten Temperatur in der verbrannten Zone verglichen werden. Der zeitliche Verlauf des KL-Faktors und der Zeitpunkt der maximalen Russkonzentration tKL-Max erlaubten Rückschlüsse auf die ablaufenden Prozesse in der Phase der Russbildung und der Russ-Oxidation. Zudem wurden aus der WEG-Rechnung wichtige Kenngrössen wie Zündverzug, relative Anteile von vorgemischter und diffusiver Verbrennung sowie die Brenndauer und die Lage des 50% Umsatzpunktes erhalten.

6.2 Modellierung, Validierung und Auswertung der DoE-Daten

6.2.1 Modellierung und Validierung der Daten aus Blockeinspritzuntersuchungen

Die Planung der Versuche mit Blockeinspritzung erfolgte unter statistischen Gesichtspunkten (vgl. Abschnitt 4.1) mit dem Ziel, die Ergebnisse als Funktion der Variationsparameter beschreiben zu können und somit das Verhalten der Kraftstoffe zu charakterisieren.

Dazu wurden die gewählten Ergebnisgrößen der pro Betriebspunkt und Kraftstoff vermessenen 60 Messpunkte zur Modellierung und der weiteren 10 Validierungspunkte in die MBC-Toolbox eingelesen. Die Zuordnung erfolgte für die verschiedenen Kombinationen der Eingangsgrößen Ladelufttemperatur, Abgasrückführrate, Raildruck und Ansteuerbeginn der Haupteinspritzung. Durch einen in der Toolbox implementierten Dateneditor war zudem eine letzte Überprüfung der Genauigkeit der Übereinstimmung der am Prüfstand eingestellten Parameterkombinationen mit den vordefinierten Versuchsplänen möglich.

Die eigentliche Modellierung erfolgte unter Verwendung von Polynomansätzen bis zum dritten Grad, d.h. es wurde in einem ersten Ansatz für jede Ergebnisgröße jeweils ein lineares, ein quadratisches und ein kubisches Modell erzeugt. Nachfolgend wurde jedes dieser Modelle mit den in Abschnitt 4.1.1 vorgestellten Werkzeugen (Elimination von Ausreißern, Box-Cox Transformation, und schrittweise Regression) optimiert. Das Modelloptimierungsverfahren ist dabei ein iterativer Prozess, d.h. die Optimierungswerkzeuge müssen verschieden kombiniert werden um letztendlich eine bestmögliche Annäherung des Modells an die gemessenen Modelldaten unter Berücksichtigung der Validierungsdaten zu erreichen. Im letzten Schritt gilt es dann, das Polynom als endgültiges Modell zu wählen, dass die beste Übereinstimmung mit Mess- und Validierungsdaten aufweist. Anhand der Modellierung der Zündverzugszeit des Kraftstoffs FT-Naph bei 2000U/min und 10bar p_{mi} soll dies nun veranschaulicht werden.

In Abbildung 6-4 sind die Residuen sowie die Modellkennwerte PRESS RMSE, RMSE und Validierungs-RMSE für das lineare, das quadratische und das kubische Polynommodell nach erfolgter Bestimmung der Modellkoeffizienten (Gleichung (4.14) dargestellt. Alle Modellterme des jeweiligen Polynoms (linear: 5 Terme, quadratisch: 15 Terme, kubisch: 35 Terme) werden berücksichtigt und die Ergebnisgrößen wurden nicht transformiert (Box-Cox: λ =1). Dies stellte nun die Basis für nachfolgend durchgeführte Modelloptimierungen dar. In einen ersten Schritt wurde die Normalverteilung der Residuen graphisch anhand der Darstellung über dem vorhergesagten Ergebnis (Abbildung 6-5) überprüft. Durch eine Box-Cox-Transformation kann nun eine Stabilisierung der Varianz erreicht werden, d.h. die Ergebnisgröße wurden mittels Gleichung (4.15 transformiert um die Residuen einer Normalverteilung anzunähern. Die Normalverteilungsannahme der Residuen bildet die notwendige Grundlage

vieler statistischer Tests, da diese eine zumindest approximierte Normalverteilung voraussetzen [39].



Abbildung 6-4: Residuen und Kennwerte von Polynommodellen vor durchgeführter Modelloptimierung.



Abbildung 6-5: Stabilisierung der Varianz nicht normalverteilter Residuen durch eine Box-Cox-Transformation. Nachfolgend wurde die Signifikanz der einzelnen Modellterme der Polynome bewertet. Das Verfahren der schrittweisen Regression stützt sich auf den T-Test, der die Abweichung von der statistischen Nullhypothese (Einfluss auf die Ergebnisgröße ist nicht vorhanden) bewertet [37]. Zielwert dieser schrittweisen Optimierung (schrittweisen Nichtberücksichtigung einzelner Modellterme) ist die Minimierung der PRESS mit dem Ziel einer hohen Vorhersagegüte (vgl. Abschnitt 4.1.1).

Zur Identifikation von Ausreißern wurde nun die Darstellung der studentisierten Residuen (für deren Herleitung wird auf [37] verwiesen) gewählt. Diese können aber nur die übermäßige Abweichung einzelner Messergebnisse identifizieren und nicht deren Ursache belegen. Deshalb ist es vor der Eliminierung von Ausreißern hinsichtlich der Verbesserung der Modellierungskennwerte von großer Bedeutung die Sinnhaftigkeit dieser zu überprüfen. Das geeignete Kriterium hierfür ist der Validierungs-RMSE: Wird dieser durch die Nichtberücksichtigung einzelner Messerergebnisse vergrößert, ist davon auszugehen, dass es sich nicht um einen Ausreißer handelt.



Abbildung 6-6: Residuen und Kennwerte von Polynommodellen nach durchgeführter Modelloptimierung.

In Abbildung 6-6 sind die Residuen und Kennwerte der Polynommodelle nach durchgeführten Optimierungen dargestellt. Es konnten signifikante Verbesserungen der Modellgüte (RMSE) und der Vorhersagefähigkeit der Modelle (PRESS RMSE) erreicht werden, wie ein Vergleich mit den in Abbildung 6-4 gezeigten Kennzahlen verdeutlicht. Die höchste Modellgüte und Vorhersagefähigkeit wurde mit dem kubischen Polynom erzielt, wobei RMSE und PRESS RMSE gute Übereinstimmung zeigten. Demnach wurde dieses Modell als "Best" definiert.

Eine abschließende Überprüfung erfolgte anhand der Validierungsdaten (Abbildung 6-7). Da hier eine sehr gute Übereinstimmung des Modells an allen Validierungspunkten gefunden wurde, konnte das optimierte kubische Modell exportiert und zum Vergleich mit den weiteren Kraftstoffen herangezogen werden.



Abbildung 6-7: Exemplarische Modellbewertung anhand von Validierungsdaten.

6.2.2 Entwicklung eine Auswertewerkzeugs

Ausgangspunkt der Entwicklung eines eigenen Werkzeugs zur Auswertung der mittels der MBC-Toolbox erzeugten Polynommodelle war einerseits die Notwendigkeit mehrere Modelle (von verschiedenen Kraftstoffen) miteinander zu vergleichen, die das erwerbbare Softwarepaket nicht beinhaltet. Andererseits war es das Ziel, die Ergebnisgrößen nicht nur als Funktion der Eingangsgrößen zu betrachten, sondern gegebenenfalls als Funktion einer weiteren Ergebnisgröße. Dies soll weiter unten anhand eines Beispiels verdeutlicht werden. Weiterhin sollte ein Werkzeug verfügbar sein, das es erlaubt aus der Vielzahl an Modellen auf effiziente und anschauliche Weise Vergleiche zwischen den Kraftstoffen anstellen zu können.

Zur Veranschaulichung der Ergebnisse wurde eine zweidimensionale Darstellung gewählt, d.h. drei der vier Eingangsgrößen mussten mit einem festen Wert innerhalb des jeweiligen Variationsbereichs belegt werden. Die Auswertung des Polynoms erfolgte dann über eine Punkt-zu-Punkt Berechnung bei einer vordefinierten Schrittweite der als Laufvariable definierten vierten Eingangsgröße.

Da der Wirkungsgrad und die Emissionen sehr stark von der 50%-Umsatzlage abhängen, ist es sinnvoll diese Ergebnisgrößen in Abhängigkeit von H50 anstelle des Ansteuerbeginns der Haupteinspritzung darzustellen. Da die Umsatzlage aber von allen Eingangsgrößen abhängig ist (exemplarisch für zwei Eingangsgrößen in Abbildung 6-8 illustriert), musste das jeweilige H50-Modell in einem ersten Schritt ausgewertet werden. Als anzupassender Parameter wurde die Einspritzlage aufgrund des am stärksten ausgeprägten Einflusses auf die 50%-Umsatzlage gewählt. Sollten beispielsweise die spezifischen Kohlenmonoxidemissionen in Abhängigkeit der Abgasrückführrate bei konstanter Umsatzlage dargestellt werden, wurde in einem ersten Schritt für jedes AGR-Inkrement (Schrittweite z.B. 0:0,1:40% AGR \Rightarrow 401 Inkremente) ein Ansteuerbeginn der Haupteinspritzung berechnet, für den das H50-Modell den gewünschten Wert erreicht. Mittels der Kombination aus AGR- und berechneten ABHE-Inkrementen wurde dann das CO-Polynom ausgewertet. Bei Wahl der Ladelufttemperatur oder des Raildrucks als Laufvariable wurde analog verfahren. Somit konnte die eigentliche Ergebnisgröße 50%-Umsatzlage für die Betrachtung von Verbrauch und Emissionen als vierte Eingangsgröße gewählt werden.



Abbildung 6-8: 50%-Umsatzlage in Abhängigkeit der Eingangsgrößen AGR und ABHE.

6 Datenauswertung

Für eine komfortable und effiziente Bedienung wurde eine graphische Benutzeroberfläche programmiert, die in Abbildung 6-9 dargestellt ist. Hier können die zu betrachtenden Kraftstoffe, der Betriebspunkt, die Ergebnisgröße sowie die Laufvariable und die Werte der statischen Variablen gewählt werden. Des Weiteren wurden gleichfalls die Ergebnisse aus den Untersuchungen mit Voreinspritzung als auch die der Volllastuntersuchungen integriert. Neben der graphischen Darstellung können auch numerische Ergebnisse betrachtet werden. Das Programm wurde als selbstständig lauffähig konzipiert, d.h. weder das zugrunde liegenden Programm MATLAB noch die MBC-Toolbox müssen auf dem ausführenden Rechner vorhanden sein.



Abbildung 6-9: Graphische Benutzeroberfläche zur Darstellung der Ergebnisse der motorischen Untersuchungen.

Dieses Auswertewerkzeug wird in Anlage zu der vorliegenden Arbeit zur Verfügung gestellt, um detailliertere Einblicke in die Ergebnisse aus den motorischen Untersuchungen zu erlauben, als dies im Rahmen dieses Berichts möglich ist. Eine ausführliche Beschreibung der Bedienung findet sich im Anhang, Abschnitt 10.2.

6.3 Kumulierte Tabellen / Gewichtungsfunktion

Um in abschließenden Betrachtungen eine Bewertung der Kraftstoffe aus motorischer Sicht zu erlauben wurde eine Gewichtungsfunktion (Gleichung (6.15) eingeführt. Ziel der Einführung dieser Funktion war es, durch eine Zusammenfassung der motorischen Ergebnisse eine Abschätzung des Potenzials der verschiedenen Kraftstoffblends und damit der einzelnen Merkmal prägenden Kraftstoffkomponenten tätigen zu können.

Als Bewertungsgrößen wurden der spezifische Kraftstoffverbrauch, der Energieeintrag sowie alle spezifischen Emissionsgrößen gewählt. Die Bezugsgrößen stellten naheliegender Weise die Ergebnisse des Referenzkraftstoffs dar. Nachdem die zu betrachtenden Messpunkte gewählt wurden, wurden die prozentualen Unterschiede des jeweiligen Kraftstoffs zum Referenzkraftstoff mit dem Ergebniswert des Referenzkraftstoffs multipliziert und auf den arithmetischen Mittelwert aller für die Kumulation berücksichtigten Messwerte bezogen. Durch dieses Vorgehen wurde erreicht, dass Unterschiede bei Messpunkten mit hohen Verbrauchsbzw. Emissionswerten des Referenzkraftstoffs mit hohem Gewicht in die Bewertung eingehen. Somit wurden wenig relevante Unterschiede bei absolut gesehen niedrigen Emissionen auch mit geringem Gewicht berücksichtigt.

Diese gewichtete Kumulation wurde in verschieden Umfängen angewandt. Zum Einen wurden lediglich Messungen mit Blockeinspritzung berücksichtigt, zum Anderen die Messungen mit Voreinspritzung. Weiterhin wurde auch eine Zusammenfassung beider Untersuchungsstrategien durchgeführt.

Zur Bewertung wurden die kumulierten prozentualen Unterschiede mittels einer Umwandlung in Symbole abstrahiert. Die dazu verwendeten Grenzen sind in Tabelle 6-2 aufgeführt. Diese wurden so gewählt, dass einerseits eine übersichtliche Beurteilung der gefundenen Unterschiede zum Referenzkraftstoff möglich ist und andererseits die gefundenen Abweichungen adäquat abgedeckt werden. Unter diesem Gesichtspunkt wurden die verschiedenen Grenzen zur Abstrahierung der Verbrauchs- (denen auch die Kohlendioxidemissionen zugeteilt wurden) und Emissionsunterschiede definiert.

	Symbol		-	0	+	++	+++	++++
Abstrahierung		[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]	[%]
	bi	≥+2.5	+2.4 +0.5	+0.40.4	-0.52.4	-2.54.4	-4.56.4	≤ -6.5
	mBxHu	≥+2.5	+2.4 +0.5	+0.40.4	-0.52.4	-2.54.4	-4.56.4	≤ -6.5
	CO2_P	≥+2.5	+2.4 +0.5	+0.40.4	-0.52.4	-2.54.4	-4.56.4	≤ -6.5
	CO_P	≥+16	+15 +5.0	+4.94.9	-5.015	-1630	-3150	≤ -51
	HC_P	≥+16	+15 +5.0	+4.94.9	-5.015	-1630	-3150	≤ -51
	NOx_P	≥+16	+15 +5.0	+4.94.9	-5.015	-1630	-3150	≤ -51
	Russ_P	≥+16	+15 +5.0	+4.94.9	-5.015	-1630	-3150	≤ -51

Tabelle 6-2: Grenzwerte zur Abstrahierung der kumulierten motorischen Ergebnisse.

7 Ergebnisse

7.1 Diskussion der Ergebnisse

7.1.1 Kraftstoffeinflüsse auf das hydraulische Injektorverhalten

Trotz der unterschiedlichen Viskositäten von 1.65mm²/s (FT-IIBP bei 40°C) bis zu 2.82mm²/s (FT-Alc bei 40°C) und der verschiedenen Schmiereigenschaften von 309µm (FT-iPar bei 60°C) und 424µm (FT-Alc bei 60°C; bestimmt nach der HFRR-Methode) waren am LAV nur geringe Unterschiede im hydraulischen Injektorverhalten messtechnisch erfasst worden.

Unabhängig vom eingestellten Einspritzdruck und der gewählten Einspritzdauer war ein nahezu identischer hydraulischer Verzug beobachtet worden, d.h. der hydraulische Einspritzbeginn erfolgte annähernd konstant 284µs (Standardabweichung 11 µs) nach der elektrischen Ansteuerung des Injektors ohne erkennbaren Einfluss des untersuchten Kraftstoffs und der Einspritzbedingungen (siehe Abbildung 7-1). Im Fall der maximalen Einspritzmenge (Abbildung 7-1 - links) waren weiterhin der Anstieg der Einspritzrate und der "konstante" Teil der Rate ohne nennenswerten Kraftstoffeinfluss. Lediglich bezüglich des Einspritzendes fallen die Kraftstoffe FT-iPar, FT-Olef und FT-IIBP aus dem Rahmen: Die Düse schließt deutlich früher als bei den anderen Kraftstoffen (Einspritzmassen etwa 5% geringer). Bei der minimalen Einspritzrate war ein ähnliches Verhalten ersichtlich. Das wiederum früheste Einspritzende (Abbildung 7-1 - rechts) war bei den Kraftstoffen FT-iPar, FT-Olef und FT-IIBP beobachtet worden, wobei hier aufgrund des ballistischen Betriebs der Düsennadel keine konstante Phase im Einspritzverlauf zu finden war und damit der festgestellte Unterschied in der eingespritzten Kraftstoffmasse größer war (bis zu 20%).



Abbildung 7-1: Am LAV gemessene Einspritzraten aller Kraftstoffe; links bei max. Einspritzmenge (p_{inj} =1500bar, t_{inj} =1.0ms) und rechts bei min. Einspritzmenge (p_{inj} =500bar, t_{inj} =0.5ms).

Es war jedoch nicht möglich die unterschiedlichen Endpunkte und die daraus resultierenden Unterschiede in der eingespritzten Kraftstoffmasse mit den unterschiedlichen Kraftstoffeigenschaften bezüglich Viskosität und Schmierfähigkeit eindeutig zu korrelieren. In Abbildung 7-2 sind die bei einer elektrischen Ansteuerdauer von 1.0ms und verschiedenen Einspritzdrücken ermittelten eingespritzten Kraftstoffmassen gegenüber der kinetischen Viskosität und der Schmierfähigkeit relativ dargestellt. Hierzu muss erwähnt werden, dass die Ergebnisse aus zwei unterschiedlichen Messkampagnen stammen (Ergebnisse aus der zweiten Kampagne sind mit einem * markiert) und es somit nicht ausgeschlossen werden kann, dass die Unterschiede durch (nicht erkannte) Veränderungen zwischen den beiden Messkampagnen verursacht worden sind.



Abbildung 7-2: Einfluss der kinematischen Viskosität und der Schmierfähigkeit (HFRR) auf die Einspritzmasse bei einer Einspritzdauer von 1.0ms. (* Kraftstoffe wurden in einer anderen Messkampagne vermessen.)

Die hier gefundenen Differenzen in den eingespritzten Kraftstoffmassen konnten nicht direkt mit den motorischen Ergebnisse verglichen werden, da bei den motorischen Untersuchungen durch eine Anpassung der Ansteuerdauer angestrebte indizierte Mitteldrücke eingestellt wurden und die Ansteuerzeit somit eine variable Größe war (vgl. Abschnitt 4). Weiterhin sind Heizwert und Brennverhalten für das motorische Verhalten entscheidende Größen, die in der Analyse des Injektorverhaltens keine Berücksichtigung finden konnten. Gleichwohl wurden die ermittelten hydraulischen Einspritzverzüge herangezogen um die Zündverzüge zu berechnen (siehe Abschnitt 6.1.1).

7.1.2 Einspritzstrahlausbreitung

Bezüglich der Ausbreitung der Einspritzstrahlen unter verdampfenden und nicht verdampfenden Bedingungen konnten bezüglich der axialen Ausbreitung nur sehr geringe Differenzen zwischen den betrachteten Kraftstoffen festgestellt werden, wie Abbildung 7-3 zeigt. Obwohl die Unterschiede zwischen den Kraftstoffen die gleiche Größenordnung wie die der Messunsicherheit besaßen, wurde der tendenzielle Einfluss des Siedebereichs der Kraftstoffe abgebildet. Während der Referenzkraftstoff (RDF, Siedebereich 163 ... 355°C) am tiefsten in den Brennraum eindringt, war die Eindringtiefe der Kraftstoffe mit tieferem Siedebereich, wie zum Beispiel der Kraftstoff FT-Arom (186 ... 307°C) oder FT-IIBP (134 ... 307°C) erkennbar geringer.



Abbildung 7-3: Axiale Einspritzstrahlausbreitung aller Kraftstoffe in der HTDZ unter verdampfenden Bedingungen; Einspritzdruck $p_{inj} = 1000$ bar, $t_{inj} = 1.0$ ms.

Die projizierte Strahlfläche, als Maß für das eingespritzte Volumen, konnte als eindeutigere Größe zur Beurteilung der Einspritzstrahlausbreitung herangezogen werden. Unter verdampfenden Bedingungen war ein direkter Zusammenhang der projizierten Flächen der flüssige Phase der Einspritzstrahlen mit dem Siedebereich der Kraftstoffe ersichtlich (Abbildung 7-4). Die am deutlich schnellsten stattfindende Verdampfung des Kraftstoffs mit niedrigem Siedebeginn (FT-IIBP) zeigte sich in der deutlich kleinsten projizierten Strahlfläche und korrelierte gleichfalls mit einer als Kenngröße heranziehbaren Vergleichstemperatur T₅₀ (50 vol.-% des Kraftstoffsverdampft), die beim Kraftstoff FT-IIBP 236°C betrug. Analog den Betrachtungen der axialen Eindringtiefe, zeigte der Referenzkraftstoff (RDF - T₅₀=279°C) die längste Verweilzeit in der flüssigen Phase, wobei die Verdampfung hier, im Gegensatz zu den synthetischen Kraftstoffen, auch 1ms nach Einspritzende nicht abgeschlossen war. Die weiteren synthetischen Kraftstoffe zeigten ein ähnliches Verhalten, das die enge Variationsbreite des Siedebereichs dieser Kraftstoffe (T₅₀: 250...260°C) wiedergab. Eine Ausnahme bildete hier der durch Aromaten gekennzeichnete Kraftstoff (FT-Arom), dessen T₅₀ der des Kraftstoffs FT-IIBP entsprach, jedoch eine, den weiteren synthetischen Kraftstoffen ähnliche Verweilzeit in der flüssigen Phase aufwies.



Abbildung 7-4: Projizierte Einspritzstrahlflächen aller Kraftstoffe bei verdampfenden Bedingungen in der HTDZ; Einspritzdruck $p_{inj} = 1000$ bar, $t_{inj} = 1.0$ ms.

7.1.3 Brennverhalten

Die **Zündverzugszeit** ist ein wesentliches Merkmal der dieselmotorischen Verbrennung. Bezüglich des Wirkungsgrads, der Schadstoffemissionen, des Verbrennungsgeräuschs und der Bauteilbelastung hat der zeitliche Abstand zwischen dem hydraulischen Einspritzbeginn und dem Brennbeginn entscheidende Bedeutung. Die Zündverzugszeit bestimmt maßgeblich den Anteil des Gemisches, welches sich bis zur Zündung bilden kann. Sie ist neben den thermodynamischen Zuständen im Brennraum, d.h. dem Druck und den lokalen Temperaturen sowie der lokalen Dampfkonzentration vor allem von der Zündwilligkeit des untersuchten Kraftstoffs abhängig [50].

In den durchgeführten motorischen Untersuchungen konnten in Abhängigkeit der Versuchsbedingungen starke Unterschiede der betrachteten Kraftstoffe beobachtet werden. Erwartungsgemäß sind diese bei niedrigen Lasten, d.h. einem vergleichsweise niedrigen Druck und Temperaturniveau im Bereich des Einspritzbeginns und Untersuchungen ohne Voreinspritzung am signifikantesten ausgeprägt. In Abbildung 7-5 sind die Zündverzüge der verschiedenen Kraftstoffe in Abhängigkeit der 4 Variationsparameter Ladelufttemperatur, Abgasrückführrate, Raildruck und dem Ansteuerbeginn der Haupteinspritzung bei 1500U/min, 2bar p_{mi} und Blockeinspritzung dargestellt. Der Kraftstoff FT-Base zeigte unter allen Rahmenbedingungen die geringste Zündverzugszeit, welche auch mit der im Vergleich höchsten Cetanzahl korreliert. Durch eine Zumischung von Olefinen (CZ = 66,7) wurde dieses Verhalten nicht beeinflusst. Bei den Kraftstoffen FT-Alc (CZ = 62.1), FT-IIBP (CZ = 62.4), FT-iPar (CZ = 63,5) und FT-Naph (63.7) waren unter allen Rahmenbedingungen sehr ähnliche Zündverzugszeiten zu beobachten. Die Zumischung von mono-Aromaten (FT-Arom – CZ = 57.9) resultierte in den stärksten Auswirkungen auf die Zündwilligkeit. Die dokumentierten Verzugszeiten erreichten hier das Niveau des Referenzkraftstoffs (RDF – CZ = 53.0). Somit konnte die Schlussfolgerung, dass die Zündverzüge zwar qualitativ gut mit der Cetanzahl korrelierten, jedoch quantitative Aussagen allein über die Cetanzahl nicht möglich waren, angestellt werden. Die betrachteten Variationsparameter führten jeweils zu einer Parallelverschiebung der Zündverzüge: Durch höhere Ladelufttemperaturen wurde diese ebenso verkürzt wie durch geringere Abasrückführraten, höhere Raildrücke und frühere Einspritzzeitlagen, wobei die stärksten Gradienten aus veränderten Einspritzlagen resultierten.



Abbildung 7-5: Zündverzüge bei 1500U/min, 2bar p_{mi} in Abhängigkeit von TSR, AGR, pRail und ABHE.

Mit höheren Lasten und einem damit verbundenen höheren Druck- und Temperaturniveau war ein analoges Verhalten der Kraftstoffe beobachtet worden. Zwar war das Niveau der bestimmten Zündverzugszeiten niedriger, die Rangfolge blieb aber analog der Betrachtungen von Betriebspunkten niedriger Teillast, wie in Abbildung 7-6 in Abhängigkeit von TSR und ABHE dargestellt, bestehen.



Abbildung 7-6: Zündverzüge bei 2000U/min, 10bar p_{mi} in Abhängigkeit von TSR und ABHE.

Bei Mehrfacheinspritzungen führt die von der Voreinspritzung freigesetzte Wärme zu einem gesteigerten Druck- und Temperaturniveau sowie dem Auftreten von Radikalen zu Beginn der Haupteinspritzung [50]. Dies hatte sowohl eine starke Abnahme der Zündverzugszeiten als auch der Unterschiede zwischen den Kraftstoffen zur Folgen. Dies war sowohl bei Betriebspunkten niedriger als auch höherer Teillast zu beobachten und ist in Abbildung 7-7 dargestellt. Allerdings muss an dieser Stelle wiederholt werden, dass die Messungen bei konstanten Schwerpunktagen durchgeführt wurden, die durch eine Anpassung der Einspritzlage erzielt wurde (vgl. Abschnitt 4.2.1). Aus den daraus resultierenden unterschiedlichen Bedingungen bei Einspritzbeginn ist eine direkte Vergleichbarkeit zu obigen Betrachtungen nicht gegeben. Nichtsdestotrotz war analog zu den Betrachtungen mit Blockeinspritzung ersichtlich, dass die Beimengung von Mono-Aromaten zum FT-Basiskraftstoff die signifikantesten Auswirkungen hatte und dadurch ein dem Referenzkraftstoff nahezu identisches Zündverhalten bewirkte.



Abbildung 7-7: Zündverzüge bei 1500U/min, 2bar p_{mi} (links) und 2000U/min, 10bar p_{mi} (rechts), Mehrfacheinspritzung in Abhängigkeit der AGR-Rate.

Die **50%-Umsatzlage** stellt einen der wichtigsten Kennwerte bei der Beurteilung der Verbrennung dar, der im direkten Zusammenhang mit dem Wirkungsgrad, dem Verbrennungsgeräusch und den Emissionen zu sehen ist. Dabei ist zu unterscheiden, auf welcher Basis die 50%-Umsatzlage berechnet wurde: Zum einen kann der direkt errechnete Heizverlauf zugrunde gelegt werden. Folglich würde die dem Brennraum entzogene Wandwärme keine Berücksichtigung finden. Diese wurde im Nachhinein basierend auf einem phänomenologischen Modell nach Hohenberg berechnet. Der resultierende Brennverlauf stellt die zeitliche Umsetzung der im Kraftstoff gebundenen chemischen Energie in Wärme dar. Die auf Basis des Brennverlaufs berechnete 50%-Umsatzlage war in der Regel 0,5 - 1,5 °KW später zu finden als die auf Basis des Heizverlaufs, was durch die nach der Verbrennung weitaus höhere Massenmitteltemperatur und dem damit verbundenen höheren Wandwärmesstrom zu begründen ist. Im Folgenden werden die kraftstoffbedingten Einflüsse auf die 50%-Umsatzlage auf Basis des Brennverlaufs (B50) diskutiert.

Im Allgemeinen ist die Umsatzgeschwindigkeit bei der konventionellen dieselmotorischen Verbrennung von der Art der Verbrennung, also vorgemischt oder diffusiv, sowie der Reaktionswilligkeit des Kraftstoffs abhängig. Beides hängt wiederum sehr stark von den Betriebsbedingungen ab, was eine differenzierte Betrachtung notwendig machte. Anhand der Brenndauern vom Brennbeginn bis zur 50%-Umsatzlage konnte der Einfluss der Last und damit des Temperatur- und Druckniveaus verdeutlicht werden. Bei niedriger Teillast hatte eine Steigerung der Ladelufttemperatur (Abbildung 7-8 links) nur marginalen Einfluss auf die Brenndauer der betrachteten synthetischen Kraftstoffe. Die Ausnahme bildete der aromatische Blend: Bei geringen Ladelufttemperaturen waren weitaus längere Brenndauern dokumentiert worden. Weiterhin war eine ausgeprägte Abhängigkeit von der Ladelufttemperatur ersichtlich. Eben dieses Verhalten wurde auch beim Referenzkraftstoff beobachtet. Da die Brennverläufe hier keine signifikanten Unterschiede im Vormischanteil aufwiesen, lässt sich folgern, dass bei niedrigen Lasten die Reaktionswilligkeit des Kraftstoffs maßgeblich ist und in Analogie zu den Betrachtungen der Zündverzüge aromatische Komponenten einen ausgeprägten Einfluss besitzen.

Erst bei höherer Teillast waren die dieseltypischen Phasen der Verbrennung klar ausgeprägt. Hier hatte der Anteil der vorgemischten Verbrennung zunehmend wesentlichen Einfluss. Steigende Ladelufttemperaturen hatten durchwegs längere Brenndauern zur Folge (Abbildung 7-8, rechts), was auf eine Abnahme der Zündverzugszeit und damit der Zeit zur Vormischung des Gemisches zurückzuführen war. Bemerkenswert war dabei der Umstand, dass die Umsatzdauern der Kraftstoffe FT-Arom und RDF gegensätzlich zu den Betrachtungen bei niedriger Teillast nun am kürzesten waren.

81



Abbildung 7-8: Brenndauern (BB - B50) in Abhängigkeit der Ladelufttemperatur bei 1500U/min, 2bar p_{mi} (links) und 2000U/min, 10bar p_{mi} (rechts).

Neben der Ladelufttemperatur war bei niedriger Teillast weiterhin eine, im Gegensatz zu den weiteren Kraftstoffen, überproportionale Abhängigkeit der Brenndauern der Kraftstoffe FT-Arom und RDF von den Variationsgrößen Abgasrückführrate und Ansteuerbeginn der Haupteinspritzung zu verzeichnen (Abbildung 7-9). Dies war ein weiteres Indiz für den starken Einfluss mono-aromatischer Strukturen auf die Reaktionswilligkeit des untersuchten Brennstoffs. Im Gegensatz dazu wiesen die sehr zündwilligen Kraftstoffe FT-Base und FT-Olef eine nur minimale Empfindlichkeit gegenüber hohen AGR-Raten und späten ABHEs auf. Bemerkenswert war weiterhin die Tatsache, dass der alkoholische Blend trotz einer Cetanzahl von 62.1, also im Bereich der Kraftstoffe FT-Naph, FT-iPar und FT-IIBP, geringere Brenndauern zeigte als die weiteren eben genannten Kraftstoffe.



Abbildung 7-9: Brenndauern (BB - B50) bei 2000U/min, 2bar p_{mi} in Abhängigkeit von AGR und ABHE.

Dieser starke Einfluss der Abgasrückführrate bzw. des Ansteuerbeginns der Einspritzung war bei höherer Last und bei Untersuchungen mit Voreinspritzung nicht mehr beobachtet worden, da hier durch ein erhöhtes Druck- und Temperaturniveau die Reaktionswilligkeit des Kraftstoffs an Bedeutung verliert. Eine Erhöhung des Raildrucks hatte aufgrund der verbesserten Gemischaufbereitung unabhängig des betrachteten Kraftstoffs und der gefahrenen Last eine leichte Verkürzung der Umsatzzeiten zur Folge.

Die in Abbildung 7-10, Abbildung 7-11 und Abbildung 7-12 dargestellten 50%-Umsatzlagen waren nun die Konsequenz aus den oben dargestellten Zündverzügen und Brenndauern. Bei niedriger Teillast (hier 2000U/min, 2bar p_{mi}) trat der Unterschied zwischen den Kraftstoffen mit hohem Aromatengehalt (FT-Arom, RDF) besonders deutlich zu Tage. Signifikant waren sowohl die späteren Lagen des 50%-Umsatzpunktes bei gleichen Betriebsbedingungen als auch der stärkere Einfluss der Parameter Ladelufttemperatur und Abgasrückführrate.



Abbildung 7-10: 50%-Umsatzlagen bei 2000U/min, 2bar $p_{\rm mi}$ in Abhängigkeit von TSR, AGR, pRail und ABHE.

Eine Steigerung der Last hatte nun zur Folge, dass die Wechselwirkung aus Homogenisierungsgrad, also des Anteils sehr schneller Umsetzung aufgrund vorgemischter Verbrennung und einer erhöhten Reaktionswilligkeit durch ein gesteigertes Temperatur- und Druckniveau für die Lage des 50%-Umsatzpunkts entscheidend waren.

Bei einer Last von 6bar p_{mi} (Abbildung 7-11) bewirkte eine Anhebung der Ladelufttemperaturen durch eine Verringerung des Zündverzugs und damit des Vormischanteils bei Betrachtung der synthetischen Kraftstoffe spätere 50%-Umsatzlagen. Die Ausnahme bildeten wiederum der mono-aromatische Blend und der Referenzkraftstoff. Die Zündverzugszeiten dieser beiden Kraftstoffe lagen bei 80°C Ladelufttemperatur in etwa auf dem Niveau der weiteren synthetischen Kraftstoffe bei 40°C, woraus auf einen vergleichbaren Homogenisierungsgrad geschlossen werden konnte. Somit konnte gefolgert werden, dass die bei den aromatenhaltigen Kraftstoffen bei diesem Lastpunkt der Einfluss der Temperatur auf die Reaktionswilligkeit überwog, während die weiteren synthetischen Kraftstoffe eher vom Vormischanteil abhängig waren. Eine Steigerung der Abgasrückführrate hatte bei allen Kraftstoffen spätere 50%-Umsatzlagen zur Folge, wobei die Kraftstoffe FT-Arom und RDF ab etwa 10% AGR einen überproportionalen Anstieg aufwiesen.



Abbildung 7-11: 50%-Umsatzlagen bei 2000U/min, 6bar p_{mi} in Abhängigkeit von TSR und AGR.

Bei p_{mi}=10bar (Abbildung 7-12) führte die Ladelufttemperatursteigerung bei moderaten AGR-Raten stets zu späteren 50%-Umsatzlagen. Folglich wurde die Steigerung der Reaktionswilligkeit durch höhere Ladelufttemperaturen nunmehr bei allen Kraftstoffen durch den Einfluss auf den Homogenisierungsgrad überlagert. Ein extrem hoher Vormischanteil wurde bei diesem Betriebspunkt bei hohen AGR-Raten beim Referenzkraftstoff dokumentiert. Hier wurde im Gegensatz zu allen synthetischen Kraftstoffen eine Vorverlagerung des 50%-Umsatzpunktes beobachtet. Diese Beobachtung wurde von einer, mit steigender AGR-Rate, starken Abnahme der Russemissionen des Referenzkraftstoffs bestärkt, was im Weiteren noch näher diskutiert wird.



Abbildung 7-12: 50%-Umsatzlagen bei 2000U/min, 10bar p_{mi} in Abhängigkeit von TSR und AGR.

Bei Untersuchungen mit Voreinspritzung waren sowohl die beobachteten Umsatzzeiten vom Brennbeginn bis zum 50%-Umsatzpunkte als auch die 50%-Umsatzlagen für alle Kraftstoffe annähernd identisch, was durch den Umstand zu erklären ist, dass die 50%-Umsatzlage als Zielwert definiert wurde (vgl. Abschnitt 4.2.1) und die verschiedenen Zündwilligkeiten durch eine Anpassung der Einspritzlage ausgeglichen wurden.

Aufgrund der sehr schwierigen Definition des Brennendes bei der dieselmotorischen Verbrennung wurde an dieser Stelle auf eine weitere Diskussion der Umsatzdauern von der 50%-Umsatzlage bis zum Brennende an dieser Stelle abgesehen, da hieraus auch keine weiteren Schlüsse bezüglich des Verbrauchs- oder Emissionsverhaltens gezogen werden konnten. Die Ergebnisse sind dennoch im angehängten Auswertewerkzeug beinhaltet.

Die nachfolgend zum Vergleich herangezogenen Ergebnisse aus der HDTZ wurden unter reaktiven Bedingungen durchgeführt (Messpunkt C: 950K, 55bar, Luft mit 25% AGR sauerstoffbezogen- vgl. Abschnitt 4.2.3). Trotz bezüglich Temperatur und Druck ähnlichen Zuständen bei Beginn der Einspritzung bei Motor und HDTZ, waren die weiteren Randbedingungen stark unterschiedlich: Aufgrund der sehr niedrigen Strömungsintensität in der Zelle findet kein Kraftstofftransport aus den Einspritzstrahlen statt, was lokal eher fettere Gemische als im Motor zur Folge hatte. Demgegenüber ist das Zellvolumen weit größer als das des Brennraums im Motor, was ein weitaus höheres globales Luftverhältnis ($\lambda = 7 \dots 80$) nach sich zog. Entsprechend wurden in der HDTZ maximal 80 – 90% des eingespritzten Kraftstoffs umgesetzt, obwohl die Temperaturen wegen der hier nicht stattfindenden Volumenexpansion länger auf einem sehr hohen Niveau verweilen.

In Abbildung 7-14 sind die aus Messungen in der HDTZ ermittelten **Zündverzüge** aller Kraftstoffe in Abhängigkeit der Cetanzahl dargestellt. Grundsätzlich war der erwartete Zusammenhang zwischen Cetanzahl und Zündverzugszeit ersichtlich, was durch Regressionsgeraden für die drei Einspritzdrücke 500, 1000 und 1500bar verdeutlicht ist. Im Gegensatz zu den motorischen Untersuchungen fiel hier der Referenzkraftstoff RDF (CZ = 53) mit im Vergleich kurzen Zündverzugszeiten auf, die auch deutlich kürzer waren, als die des durch Mono-Aromaten gekennzeichneten Kraftstoffs. Weiterhin, bezogen auf seine Cetanzahl kurze Zündverzugszeiten wies der von langkettigen Alkoholen gekennzeichnete Kraftstoff (FT-Alc) auf, eher lange Zündverzugszeiten zeigten die Kraftstoffe FT-IIBP und FT-iPar.



Abbildung 7-13: Zündverzüge (HDTZ) in Abgängigkeit der Cetanzahl und der Einspritzparameter.

Unabhängig vom betrachteten Kraftstoff hatte die Variation des Einspritzdrucks hier größeren Einfluss auf die Zündverzugszeiten als die unterschiedlichen Kraftstoffeigenschaften.

Die **Brennverläufe** aller Kraftstoffe, bei einem Einspritzdruck von 1500bar und einer Ansteuerzeit von 0.5ms (Diagramm links) und 1.0ms (Diagramm rechts), sind in Abbildung 7-14 dargestellt. Obwohl auch bei einer Einspritzung von 0.5ms die Verbrennung noch vor dem Ende der Einspritzung stattfand, waren vorgemischte und diffusive Phase nicht so klar ausgeprägt als bei einer Ansteuerzeit von 1.0ms.

Der Vergleich der maximalen Brennraten ließ eine Grobe Kategorisierung in zwei Gruppen zu: Die höheren max. Brennraten wurden bei den Kraftstoffen RDF, FT-Arom, FT-IIBP und FT-iPar beobachtet. Dies ist in engem Zusammenhang mit den bei diesen Kraftstoffen festgestellten längeren Zündverzugszeiten zu sehen. Zudem wiesen die Kraftstoffe FT-IIBP und FT-Arom die niedrigsten 50%-Verdampfungspunkte auf, was den bei Brennbeginn vorgemischten Kraftstoffanteil erhöhte. Der zweiten Gruppe waren die Kraftstoffe FT-Naph, FT-Olef, FT-Alc und FT-Base zuzuordnen, die die kürzesten Zündverzugszeiten aufwiesen.



Abbildung 7-14: Brennverläufe aller Kraftstoffe bei einem Einspritzdruck von 1500bar und Ansteuerdauern von 0.5ms (links) und 1.0ms (rechts).

Die hier gewonnenen Erkenntnisse konnten mit guter Übereinstimmung auf das motorische Verhalten der Kraftstoffe übertragen werden, wo qualitativ sehr ähnlich Ergebnisse zu beobachten waren.

7.1.4 Verbrauch und Emissionen

Wie in Abschnitt 6.2.2 erläutert wurde den Betrachtungen der Verbrauchs- und Emissionskennwerte neben der Ladelufttemperatur, der Abgasrückführrate und des Raildrucks die 50%-Umsatzlage als vierter Eingangsparameter zugeordnet. Diesem war in den folgenden Auswertungen zumeist der größte Einfluss zuzuschreiben, weshalb sich die Darstellungen zumeist auf die Auswirkungen verschiedener 50%-Umsatzlagen beziehen.

Große Unterschiede waren im indizierten, spezifischen **Kraftstoffverbrauch** bei niedrigen Lasten und Blockeinspritzuntersuchungen zu beobachten (Abbildung 7-15, links). Das günstigste Verhalten wies hier der FT-Basiskraftstoff auf, der vorwiegend aus sehr zündwilligen paraffinischen Strukturen bestand. Der olefinische Blend und der Kraftstoff mit alkoholischen Komponenten hatten ein geringfügig höheres Verbrauchsniveau. Die Merkmal prägenden Komponenten isomerisierte (FT-iPar) bzw. kurzkettigere (FT-IIBP) Paraffine führten zu weiteren Nachteilen. Der Kraftstoff FT-Naph, der durch einen höheren Anteil naphtenischer Strukturen charakterisiert war, zeigte nochmals höhere Verbrauchswerte. Am oberen Ende des beobachteten Verbrauchsbereichs lagen der durch einen exponierten aromatischen Anteil gekennzeichnete Blend und der Referenzkraftstoff. Die dokumentierten Verbrauchswerte waren hier im Mittel um über 10% höher als die des FT-Basiskraftstoffs. Bemerkenswert war

die Tatsache, dass das Verhalten aller synthetischen Kraftstoffe in Abhängigkeit der 50%-Umsatzpunktlage lediglich zu einer Parallelverschiebung der Verbrauchswerte führte, während der Referenzkraftstoff zu späten 50%-Umsatzlagen hin, einen höheren Anstieg des spezifischen Kraftstoffverbrauchs aufwies. Im höheren Teillastbetrieb waren diese großen Differenzen nicht länger zu beobachten. Die grundsätzlich auf einem weit niedrigeren Niveau angesiedelten Verbrauchswerte wiesen eine sehr viele geringere Streubreite auf, die allerdings die gleiche Rangfolge der betrachteten Kraftstoffen zeigte, wie sie bei Untersuchungen bei niedriger Teillast beobachtet worden waren (siehe Abbildung 7-15, rechts).



Abbildung 7-15: Spez. Kraftstoffverbrauch (bi) in Abhängigkeit der 50%-Umsatzlage bei 1500U/min, 2bar p_{mi} (links) und 2000U/min, 10bar p_{mi} (rechts).

Zur Interpretation soeben formulierter Beobachtungen mussten weitere Ergebnisse herangezogen werden. Die in Abbildung 7-16 links für niedrige Teillast dargestellten Kohlendioxidemissionen waren bemerkenswerter Weise für den betrachten Variationsbereich der 50%-Umsatzlage von einer annähernd konstanten Höhe. Dies ist als starkes Indiz für die Annahme zu bewerten, dass die große Streubreite der dokumentierten Verbrauchsunterschiede durch eine unvollständige Umsetzung der Kraftstoffe zu begründen ist. Untermauert wurde diese Annahme einerseits durch die Auswertung der teil- und unverbrannten Emissionen, die weiter unten noch näher betrachtet werden und andererseits durch die geringere Streubreite des Kraftstoffverbrauchs bei einem höheren Druck- und Temperaturniveau im Brennraum. In Abbildung 7-16 rechts sind die Kohlendioxidemissionen bei höherer Teillast dargestellt. Hier war der zu erwartende Zusammenhang zwischen gemessen Verbrauchs- und CO2-Werten unter Berücksichtigung der unterschiedlichen Kraftstoff spezifischen H/C-Verhältnisse klar ersichtlich.



Abbildung 7-16: Spez. Kohlendioxidemissionen in Abhängigkeit der 50%-Umsatzlage bei 1500U/min, 2bar p_{mi} (links) und 2000U/min, 10bar p_{mi} (rechts).

Durch die Applikation einer Voreinspritzung wurde auch bei niedriger Teillast die Brennraumtemperatur zu Beginn der Haupteinspritzung erhöht. Die resultierenden Verbrauchswerte sind in Abhängigkeit der AGR-Rate in Abbildung 7-17 denen der Untersuchungen mit Blockeinspritzung gegenübergestellt. Auch hier ist eine signifikant geringere Streubreite der Verbrauchsunterschiede auf einem insgesamt deutlich niedrigeren Verbrauchsniveau ersichtlich.



Abbildung 7-17: Spez. Kraftstoffverbrauch (bi) in Abhängigkeit der AGR-Rate bei 1500U/min, 2bar p_{mi} bei Untersuchungen mit Blockeinspritzung (links) und mit Voreinspritzung (rechts).

Bei höherer Teillast waren die Auswirkungen der Applikation einer Voreinspritzung auf den spezifischen Verbrauch bei weitem weniger signifikant. Da bereits bei Blockeinspritzuntersuchungen eine weitestgehend vollständige Umsetzung der Kraftstoffe beobachtet wurde (vgl. Betrachtungen zu teil- und unverbranntem Emissionen) hatte das durch eine Voreinspritzung erzielte nochmals gesteigerte Temperaturniveau nur minimalen Einfluss. Die bei Volllastuntersuchungen beobachteten Verbrauchswerte wiesen nur noch marginale Unterschiede auf, die unter Berücksichtigung der Messgenauigkeit keinerlei Differenzierung der Kraftstoffe zulassen.

Zusammenfassend lässt sich folgern, dass große Verbrauchsunterschiede vor allem im Betriebsbereich von niedrigen Temperaturen und Drücken aufgetreten sind und zu einem großen Teil auf unvollständige Umsetzung der Brennstoffe zurückzuführen waren. Die Unterschiede zwischen den Kraftstoffen selbst waren auf ihre Zündwilligkeit zurückzuführen, wodurch sich eine Rangfolge in Analogie zu den Cetanzahlen ergab. Diese stellen allerdings nur ein qualitatives Maß zur Beurteilung dar. Einzelne Komponenten hatten einen stärkeren Einfluss als dies in den verschiedenen Cetanzahlen zu finden war.

Wie soeben beschrieben, war das Verhalten des spezifischen Kraftstoffverbrauchs bei niedriger Teillast zu einem signifikanten Anteil durch eine unterschiedlich stark ausgeprägte unvollständige Verbrennung gekennzeichnet. Dies wurde durch die Ergebnisse der spezifischen **teil- und unverbrannten Emissionen** bestätigt. Bei 1500U/min und 2bar p_{mi} (gleichfalls bei 2000U/min, 2bar p_{mi}) wurden CO- und HC-Emissionen beobachtet, die eine den Verbrauchswerten ähnliche Einteilung der Kraftstoffe erlauben. Die in Abbildung 7-18 dargestellten teil- und unverbrannten Emissionen waren wiederum für die zündwilligsten Kraftstoffe FT-Base und FT-Olef am niedrigsten. Nahezu identische CO- und HC Emissionen wurden für die Kraftstoffe des mittleren Cetanzahlbereichs dokumentiert. Auch hier hatten aromatische Strukturen die schwerwiegendsten Auswirkungen und führten zu weit höheren CO- und HC-Emissionen auf dem Niveau des Referenzkraftstoffs.



Abbildung 7-18: Spez. teil- (CO - links) und unverbrannte (HC - rechts) Emissionen bei 1500U/min, 2bar p_{mi} in Abhängigkeit der 50%-Umsatzlage.

Durch energetische Betrachtungen, d.h. einer Bilanzierung der Unterschiede bezüglich der eingebrachten Energiemenge und der durch die CO- und HC-Emissionen ungenutzten Ener-

giemenge¹ konnte gezeigt werden, dass die Verbrauchsunterschiede bei niedriger Last zu 30 – 65% auf Unterschiede in den teil- und unverbrannten Emissionen zurückzuführen sind.

Mit gesteigerter Last nahmen einerseits die Relevanz dieser Emissionsgruppe und andererseits die Streubreite der teil- und unverbrannten Emissionen zwischen den verschiedenen Kraftstoffen stark ab. Zwar ist zu späten Schwerpunktlagen hin noch ein Trend analog der Untersuchungen bei niedriger Last ersichtlich, jedoch sind die Unterschiede zwischen den Kraftstoffen bei Weitem schwächer ausgeprägt (Abbildung 7-19).



Abbildung 7-19: Spez. teil- (CO - links) und unverbrannte (HC - rechts) Emissionen bei 2000U/min, 10bar p_{mi} in Abhängigkeit der 50%-Umsatzlage.

Auch durch die Wärmefreisetzung der Voreinspritzung wurde das Niveau des Ausstoßes teilund unverbrannter Emissionen bei niedriger Last signifikant verringert (Abbildung 7-20). Allerdings waren die Unterschiede zwischen den Kraftstoffen analog zu den Untersuchungen mit Blockeinspritzung weiterhin stark ausgeprägt.

¹ Grundlage der Anteilsberechnung: Heizwert von CO: 10,1 kJ/kg, Heizwert von HC: 46,3kJ/kg (Propan-Äquivalent)



Abbildung 7-20: Spez. teil- (CO - links) und unverbrannte (HC - rechts) Emissionen bei 1500U/min, 2bar p_{mi} und Mehrfacheinspritzung in Abhängigkeit der AGR-Rate.

Da bei höheren Lasten die CO- und HC-Emissionen ohnehin nur noch in geringfügigen Massen dokumentiert wurden, waren die Auswirkungen einer Voreinspritzung marginal. Weiterhin war hier eine Differenzierung der Kraftstoffe nicht länger möglich. Somit lässt sich schließen, dass teil- und unverbrannte Emissionen ähnlich wie die oben beschriebenen Verbrauchswerte nur im Niedriglastbereich entscheidend waren, dort dann aber eng mit diesen zusammenhingen. Das Verhalten der Kraftstoffe wurde hier wiederum maßgeblich durch deren Zündwilligkeit beeinflusst wobei der mono-aromatische Blend zu Konsequenzen führte, die quantitativ über die Aussagekraft der Cetanzahl hinausgehen.

Grundsätzlich haben chemische Kraftstoffeigenschaften keinen direkten Einfluss auf die bei dessen Verbrennung resultierenden **Stickoxidemissionen** solange im Kraftstoff selbst kein Stickstoff gebunden ist [53]. Dies war bei keinem der untersuchten Kraftstoffe der Fall. Somit kann angenommen werden, dass 90 – 95% der motorischen Stickoxide auf eine thermische Bildung zurückzuführen waren [51]. Die weiteren 5-10%, die als Prompt-NO gebildet wurden, waren aus den vorliegenden motorischen Ergebnissen aufgrund der Komplexität des Bildungsmechanismus nicht beurteilbar. Folglich ist die Temperatur im Verbrannten das maßgebliche Unterscheidungsmerkmal.

Unabhängig von Last und Drehzahl waren die Abgasrückführrate und die 50%-Umsatzlage die Variationsparameter, die den größten Einfluss auf den Stickoxidausstoß aufwiesen (Abbildung 7-21). Mit steigenden Abgasrückführraten respektive durch spätere 50%-Umsatzlagen nahmen die spezifischen Stickoxidemissionen bei allen betrachteten Kraftstoffen ab. Als Ursache sind hierfür die höhere Wärmekapazität des rückführten Abgases, die die Spitzentemperaturen innerhalb des Brennraums senken und das ebenfalls geringere Verbrennungstemperaturniveau bei späteren Einspritzbeginnen zu nennen. Beides hatte somit eine geringere Bildung von thermischem NO zur Folge [52].

92



Abbildung 7-21: Spezifische Stickoxidemissionen bei 1500U/min, 2bar p_{mi} in Abhängigkeit der AGR-Rate und der 50%-Umsatzlage.

Der Einfluss des Raildrucks war im betrachteten Variationsbereich bei allen Betriebspunkten minimal. Bei Variation der Ladelufttemperatur wurden dagegen bei niedriger Last mit steigender Ladelufttemperatur höhere Stickoxidemissionen verzeichnet. Bei hoher Teillast war dieser Einfluss nicht mehr direkt zu beobachten (Abbildung 7-22).



Abbildung 7-22: Spez. Stickoxidemissionen bei 1500U/min, 2bar p_{mi} (links) und 2000U/min, 10bar p_{mi} (rechts) in Abhängigkeit der Ladelufttemperatur.

Allerdings wurde bei der Betrachtung von hohen Teillastpunkten ohne Abgasrückführung ein signifikanter Ladelufttemperatureinfluss bei Variation der 50%-Umsatzlage beobachtet (Abbildung 7-23). Bei niedrigen Ladelufttemperaturen war zu späten 50%-Umsatzlagen hin bei den Kraftstoffen FT-Arom und RDF ein Anstieg der Stickoxidemissionen ersichtlich während bei höheren Ladelufttemperaturen ein, bei allen Kraftstoffen ähnliches Verhalten dokumentiert wurde.



Abbildung 7-23: Spez. Stickoxidemissionen bei 2000U/min, 10bar p_{mi} in Abhängigkeit der 50%-Umsatzlage und verschiedenen Ladelufttemperaturen.

Die in Abschnitt 7.1.3 beschriebenen langen Zündverzüge bei niedriger Ladelufttemperatur und späten 50%-Umsatzlagen führten speziell bei den Kraftstoffen FT-Arom und RDF zu hohen Anteilen vorgemischter Verbrennung. Ein höherer Anteil vorgemischter Verbrennung führt laut Sun et al. [53] zu hohen Temperaturen bei Beginn der Diffusionsverbrennung und damit zu höheren Reaktionstemperaturen während der diffusiven Verbrennung und letztend-lich zu höheren Temperaturen hinter der Flammenfront (NO-Bildungszone).

Weiterhin war ersichtlich, dass die Rangfolge der Kraftstoffe bezüglich der Stickoxidemissionen stark von der Last abhing (Abbildung 7-22 und Abbildung 7-24). Zeigte der durch hohen Mono-Aromaten Anteil gekennzeichnete Kraftstoff bei niedrigen Lasten noch den geringsten Stickoxidausstoß, war dieser bei höherer Teillast auf dem Niveau des Referenzkraftstoffs, der nahezu durchgängig das ungünstigste Verhalten aufwies. Gegensätzlich dazu hatten der der naphtenische und der olefinische Blend, die bei niedrigen Lasten hohe spezifische Stickoxidemissionen hatten, bei höherer Last einen, im Vergleich, günstigen Stickoxidausstoß.



Abbildung 7-24: Spez. Stickoxidemissionen bei 2000U/min, 2bar p_{mi} (links) und 2000U/min, 10bar p_{mi} (rechts) in Abhängigkeit der Abgasrückführrate.

Die bei Untersuchungen mit Voreinspritzung beobachteten Stickoxidemissionen wiesen eine, den Blockeinspritzuntersuchungen analoge Rangfolge der Kraftstoffe auf, wobei auch die Unterschiede zwischen niedrigen und höheren Lasten wieder gespiegelt wurden (Abbildung 7-25). Das hier verzeichnete, generell niedrigere Niveau der spezifischen Stickoxidemissionen bestätigt die Annahme, dass geringere Vormischanteile zu niedrigen Temperaturen im Verbrannten führen. An dieser Stelle soll auf den generellen Unterschied zu HCCI-Brennverfahren hingewiesen werden, wo Stickoxidbildung durch lokal geringere Flammentemperaturen vermieden wird. Dazu ist es notwendig, eine nahezu vollständige Homogenisierung des Luft-Kraftstoffgemischs zu erzielen, d.h. den Kraftstoff vollständig vorgemischt umzusetzen [54]. Da aber bei vorliegenden Betrachtungen der höheren Teillast immer auch diffusive Verbrennung stattfand, konnten Gesetzmäßigkeiten der reinen homogenen Verbrennung hier keine Anwendung finden.



Abbildung 7-25: Spez. Stickoxidmissionen bei 1500U/min, 2bar p_{mi} (links) und 2000U/min, 6bar p_{mi} (rechts) bei Mehrfacheinspritzung in Abhängigkeit der AGR-Rate.

Die beobachteten sehr geringen **Russemissionen** aller Kraftstoffe bei niedriger Teillast und Blockeinspritzung konnten auf zwei Ursachen zurückgeführt werden. Zum Einen wurde der Kraftstoff vollständig während der Zündverzugszeit eingespritzt und ermöglichte so eine gute Durchmischung des Kraftstoffsprays mit Luft. Zum Anderen war selbst bei maximaler Abgasrückführrate das globale Luftverhältnis $\lambda \ge 2,8$ und somit ausreichend Sauerstoff vorhanden.

Trotz des sehr niedrigen Russemissionsniveaus waren bei niedrigen Lasten einige aufschlussreiche Ergebnisse festgehalten worden. Der gemessene Russausstoß des Referenzkraftstoffs lag unter allen Betriebsbedingungen signifikant höher als die Russemissionen der synthetischen Kraftstoffe, die durchwegs ähnlich waren (Abbildung 7-26). Leichte Nachteile waren für den durch naphtenische Anteile gekennzeichneten Blend ersichtlich. Eine Steige-

7 Ergebnisse

rung der Ladelufttemperatur führte bei allen Kraftstoffen zu einer Erhöhung der Russemissionen, die beim Referenzkraftstoff am deutlichsten ausgeprägt war. Bemerkenswerterweise hatte eine Steigerung der Abgasrückführrate nur geringe Auswirkungen oder im Fall des Referenzkraftstoffs abnehmende Russemissionen zur Folge. Durch eine Steigerung der Raildrucks wurde die Gemischaufbereitung durch eine Verringerung des Tröpfchendurchmessers beim Austritt aus der Düse verbessert. Dadurch war schon bei niedrigen Lasten eine Abnahme der Russemissionen zu beobachten. Die Abnahme des Russausstoßes zu späten 50%-Umsatzlagen kann eventuell, ebenso wie bei hohen AGR-Raten durch die hier verzeichneten langsamen Wärmefreisetzungen begründet werden, die längere verfügbare Zeiten für die lokale Durchmischung des Kraftstoffs mit Sauerstoff zur Folge haben.



Abbildung 7-26: Spez. Russemissionen bei 1500U/min, 2bar p_{mi} in Abhängigkeit der Ladelufttemperatur, der AGR-Rate, des Raildrucks und der 50%-Umsatzlage.

Bei höherer Teillast wurde ein Russemissionsniveau dokumentiert, das um mehr als eine Zehnerpotenz über dem der niedrigen Teillast lag (Abbildung 7-27). Die sich auf die Zündverzugszeit und damit den Homogenisierungsgrad auswirkende Steigerung der Ladelufttemperatur hatte bei allen Kraftstoffen steigende Russemissionen zur Folge. Dabei war die ge-
genüber dem Referenzkraftstoff geringere Sensibilität der synthetischen Kraftstoffe auf die Variation der Ladelufttemperatur augenfällig. Ab einer Rate von ca. 15% an rückgeführtem Abgas war ein steiler Anstieg des Russaustoßes zu beobachten, der einerseits auf eine Abnahme des Luftüberschusses und damit des zur Russoxidation zur Verfügung stehenden Sauerstoffs und andererseits auf die höhere Wärmekapazität der Inertgase CO₂ und H₂O und dem damit verbundenen frühren "Einfrieren" der Russoxidation zurückzuführen war. Höhere Raildrücke führten analog zu den Betrachtungen bei niedriger Teillast zu geringeren Russemissionen bei allen hier untersuchten Kraftstoffen. Von hohem Informationsgehalt war die Betrachtung der Variation der 50%-Umsatzlage. Hier nahmen die Russemissionen des Referenzkraftstoffs zu späten Umsatzlagen ab, während die der synthetischen Kraftstoffe leicht anstiegen bzw. konstant blieben. Als Ursache ist die zu späten 50%-Umsatzlagen hin stark ausgeprägte Homogenisierung in Verbindung mit hohen Anteilen vorgemischter Verbrennung zu nennen, die so nur beim Referenzkraftstoff beobachtet wurde (vgl. Abschnitt 4.2.1, Abbildung 4-6).



Abbildung 7-27: Spez. Russemissionen bei 2000U/min, 10bar p_{mi} in Abhängigkeit der Ladelufttemperatur, der AGR-Rate, des Raildrucks und der 50%-Umsatzlage.

7 Ergebnisse

Folglich ist bei der Bewertung der Ergebnisse aus Untersuchungen mit Blockeinspritzung stets zu berücksichtigen, dass starke Wechselwirkungen zwischen den aus verschiedenen Zündverzugszeiten resultierenden Homogenisierungsgraden und den Auswirkungen der chemischen und physikalischen Kraftstoffeigenschaften auf Russbildung und Oxidation auftreten. Bezüglich der Unterschiede zwischen den Kraftstoffen überraschten die niedrigen Russemissionen des durch Mono-Aromaten gekennzeichneten Blends, da dies auch keine Entsprechung in den Ergebnissen aus den Messungen an der Hochdruck-/ Hochtemperaturzelle fand. Allerdings wies dieser Kraftstoff sehr kurze Umsatzdauern vom Brennbeginn bis zur 50%-Umsatzlage auf (vgl. Abschnitt 7.1.3, Abbildung 7-9 rechts), was ebenfalls auf hohe Vormischanteile hindeutete. Die Ursache für die vergleichsweise hohen Russemissionen der Kraftstoffe FT-Naph und FT-Alc können eventuell auf die in der HD/HT-Zelle gefundene und im Vergleich zu den weiteren Kraftstoffen langsamere Degeneration des KL-Wertes, welche die Russoxidation beschreibt, zurückgeführt werden, da die maximalen KL-Werte dieser Kraftstoffe durchwegs auf einem niedrigen Niveau waren (vgl. Abbildung 7-30).

Untersuchungen mit Voreinspritzung zeigten bei niedriger Teillast ähnliche Ergebnisse wie sie bei Blockeinspritzuntersuchungen dokumentiert wurden (Abbildung 7-28, links). Höhe Abgasrückführraten führten zu einer Abnahme der Russemissionen, wobei diese aufgrund der im Vergleich zu Untersuchungen mit lediglich einer Einspritzung geringeren Homogenisierung ein höheres Niveau hatten. Den weiterhin höchsten Russausstoß hatte der Referenzkraftstoff, der deutlich über dem der synthetischen Kraftstoffe lag. Die Ergebnisse aus den Untersuchungen der höheren Teillast waren, im Unterschied zum Betrieb mit Blockeinspritzung, nunmehr weit weniger stark von unterschiedlichen Anteilen Vormischverbrennung abhängig (Abbildung 7-28, rechts).



Abbildung 7-28: Spez. Russoxidmissionen bei 1500U/min, 2bar p_{mi} (links) und 2000U/min, 10bar p_{mi} (rechts) bei Mehrfacheinspritzung in Abhängigkeit der AGR-Rate.

Der Referenzkraftstoff "profitierte" nicht länger von der höheren Gemischhomogenisierung folglich waren große Vorteile der synthetischen Kraftstoffe, speziell bei hohen Abgasrückführraten, festzustellen. Der nahezu aromatenfreie FT-Basiskraftstoff hatte bei 30% rückgeführtem Abgas einen um rund 60% geringeren Russausstoß als der Referenzkraftstoff. Weitere Vorteile waren für den Kraftstoff mit niedrigerem Siedebeginn (FT-IIBP) und dem durch langkettige Alkohole gekennzeichneten Kraftstoff (FT-Alc) ersichtlich, die bei 30% AGR um rund 70% geringere Russemissionen aufwiesen. Dabei sind die Vorteile des früher siedenden Kraftstoffs wohl auf die kürzeren Verweilzeiten in der flüssigen Phase zurückzuführen, die in Untersuchungen am LAV dokumentiert wurden (vgl. Abschnitt 7.1.2, Abbildung 7-4). Als Ursache für die niedrigen Russemissionen des alkoholischen Blends kann die von Hottenbach et al. beschriebene starke Bindung von Sauerstoff an Kohlenstoff gesehen werden, welche die Bildung von Russvorläufern verhindert [55]. Dafür sprechen auch die bereits oben erwähnten niedrigsten Maxima der KL-Werte aus Untersuchungen in der HD/HT-Zelle. Höhere Anteile iso-paraffinische bzw. olefinische Komponenten hatten motorisch kaum Auswirkungen auf das Russverhalten. Die Kraftstoffe FT-iPar und FT-Olef zeigten Russemissionen die denen des FT-Basiskraftstoffs nahezu identisch waren. Sowohl bei Betrieb ohne als auch mit Voreinspritzung waren negative Auswirkungen durch naphtenische Komponenten zu verzeichnen. Da die physikalischen Eigenschaften dieses Blends denen des FT-Basiskraftstoffs sehr ähneln, muss der Einfluss in der chemischen Struktur zu finden sein. Nakakita et al. berichteten über ein 2-3 mal höheres Aufkommen an Russvorläufersubstanzen wie Acetylen, Butadien, Benzen und Toluen bei Untersuchung eines naphtenhaltigen, aromatenfreien Kraftstoffs im Vergleich zu einem aromatenhaltigen Kraftstoff in einem Strömungsreaktor [56].

Die bei Volllast und 2000U/min beobachteten Russemissionen waren aufgrund des hohen Raildrucks, der frühen 50%-Umsatzlage und des Betriebs ohne Abgasrückführung trotz eines Luftverhältnisses von $\lambda \approx 1,4$ auf einem niedrigen Niveau (Abbildung 7-29, links). Dennoch war eine Rangfolge der Kraftstoffe analog der soeben diskutierten Ergebnisse der Untersuchungen bei hoher Teillast und Betrieb mit Voreinspritzung ersichtlich. Ein wiederum herausragend hoher Russausstoß war für den naphtenischen Kraftstoff dokumentiert worden. Im Nennleistungspunkt (Abbildung 7-29, rechts) war einerseits das Russemissionsniveau generell höher. Andererseits waren die Unterschiede zwischen den Kraftstoffen deutlicher ersichtlich, wobei diese die Ergebnisse der Untersuchungen bei 2000U/min, 10bar p_{mi} mit VE nochmals bestätigten.



Abbildung 7-29: Spezifische Russemissionen bei 2000U/min (links) und 4000U/min, Volllast.

Für den Vergleich mit dem in der Hochdruck-/Hochtemperaturzelle beobachteten Russverhalten, sind an dieser Stelle einige Vorbemerkungen nötig. Der aus den motorischen Untersuchungen ermittelte Russausstoß wurde durch Messungen aus dem Abgas ermittelt und stellt somit die Summe aus den, während der Verbrennung ablaufenden Russ-bildenden sowie den Russ-oxidierenden Prozessen dar. Die Russbildung findet hauptsächlich in der Diffusionsphase der Verbrennung statt, die durch lokalen Luftmangel und hohe Temperaturen gekennzeichnet ist. Russ entsteht aus unverbranntem Kraftstoff unter Ausbildung einer festen Phase. Die Russoxidation ist abhängig von der lokalen Temperatur und dem Sauerstoff-Angebot [57]. Da das globale Sauerstoffangebot bei der überstöchiometrisch betriebenen dieselmotorischen Verbrennung genügend hoch ist und bei ausreichend zur Verfügung stehender Zeit auch lokal keine Begrenzung der Russoxidation darstellt, ist der Temperaturverlauf der entscheidende Faktor, der die Bedingungen in HDTZ und Motor unterscheidet. Die Expansion des Brennraumvolumens führt im Motor zu einer schnellen Abnahme der Gastemperatur und damit zu schnellen Verminderung des Oxidationsprozesses – die im Zylinder noch vorhandene Russmenge "friert" ein und gelangt in das Abgassystem. In der HTDZ bleibt die Gastemperatur dagegen über eine vergleichsweise lange Zeit auf einem hohen Niveau, der Russ-Oxidationsprozess ist länger aktiv. Daher können Ansätze, die die Russkonzentration im Abgas des Motors mit den KL-Werten im Zylinder der HDTZ am Ende des Oxidationsprozesses vergleichen [58], hier nicht zur Anwendung kommen.

Stellvertretend für alle Messungen in der HDTZ sind in Abbildung 7-30 die Verläufe des KL-Werts, als Maß für die Russkonzentration, für alle Kraftstoffe bei mittleren Betriebsparametern (Raildruck = 1000bar, Ansteuerzeit = 1.0ms) dargestellt. Die Russkonzentrationen der verschiedenen Kraftstoffe unterschieden sich sowohl hinsichtlich des Beginns der Russbildung, des Maximums, sowie in den Bildungs- und Oxidationsraten. Am Ende der Verbrennung (hier 7.0ms nach dem Ansteuerbeginn des Injektors) waren demgegenüber nur noch sehr geringe Unterschiede in den Russkonzentrationen ersichtlich, da die Temperaturen in der HDTZ lange auf einem hohen Niveau verweilen.



Abbildung 7-30: Verlauf der KL-Werte und Brennverläufe (gepunktete Linien) aller Kraftstoffe bei pRail=1000bar und ADHE=1.0ms.

Das Russverhalten des Referenzkraftstoffs RDF und das des von Mono-Aromaten gekennzeichneten Blends FT-Arom waren bei Untersuchungen in der HDTZ durchwegs sehr ähnlich. Sowohl die am frühesten beginnende Russbildung als auch die höchsten Konzentrationsmaxima waren bei diesen Kraftstoffen beobachtet worden. Allerdings waren bei beiden Kraftstoffen auch die höchsten Oxidationsraten ersichtlich, die im Fall des Kraftstoffs FT-Arom ab etwa 3.2ms nach ABHE zu niedrigeren Russkonzentrationen führten als beim Referenzkraftstoff.

Gegenüber den beiden genannten Kraftstoffen, wies der FT-Basiskraftstoff bei später einsetzender Russbildung um etwa 30% niedrigere Maxima des KL-Wertes auf. Die Russoxidationsrate war mit der des Referenzkraftstoffsvergleichbar. Der von Olefinen gekennzeichnete Blend (FT-Olef) zeigte eine nahezu identisches Verhalten, höhere Anteile iso-parafinischer Strukturen (FT-iPar) führten zu geringfügig höheren KL-Maxima und einem etwas später stattfindenden Abnahme des KL-Wertes. Bei dem durch niedriger siedende Komponenten gekennzeichnete Kraftstoff FT-IIBP wurden leicht niedrigere Russkonzentrationsmaxima beobachtet, während die Oxidationsrate der des Basiskraftstoffs entsprach. Generell konnten bei den vier soeben beschriebenen Kraftstoffen nur minimale Unterschiede im Russverhalten bei Messungen in der HDTZ festgestellt werden. Signifikant war dagegen die unter allen Betriebszuständen beobachtete geringere Degeneration des KL-Werts beim Kraftstoff FT-Naph. Dieser wies zwar ähnliche maximale Werte der Russkonzentration auf wie die des FT-Basiskraftstoffs, doch war ein deutlicher Einfluss der naphtenischen Strukturen auf Intensität des Oxidationsprozesses ersichtlich. Dieser kann ursächlich für die in motorischen Untersuchungen beobachteten, vergleichsweise hohen Russemissionen dieses Kraftstoffs gesehen werden.

Die von Hottenbach et al. vertretene These, dass im Kraftstoff gebundener Sauerstoff zur Minderung von Russvorläufern führt [55], scheint sich in den Ergebnissen der Untersuchungen des Kraftstoffs FT-Alc zu bestätigen: Charakteristisch für diesen Kraftstoff waren sowohl der am spätesten einsetzende Anstieg der Russkonzentration als auch die niedrigsten Konzentrationsmaxima im Vergleich aller untersuchten Kraftstoffe. Die Intensität des Oxidationsprozesses hingegen scheint (ähnlich wie bei FT-Naph) niedriger zu sein, als bei den anderen Kraftstoffen.

Da die Endwerte der Russkonzentration aufgrund der beschriebenen hohen Verweilzeit der Gastemperaturen auf hohem Niveau in der HDTZ nicht mit den im Motorabgas gemessenen Russwerten verglichen werden können, wurde die Abhängigkeit der Russkonzentration von Maximalwert und Oxidationsrate durch Betrachtung von mehreren Zeitschnitten dargestellt. Tabelle 7-1 zeigt die Rangfolge der Russkonzentrationen im jeweiligen Maximalwert und 4.0, 5.0 und 6.0ms nach Einspritzbeginn. Zu frühen Zeitpunkten war das Konzentrationsmaximum bestimmend für die aktuelle Russkonzentration, zu späteren die Oxidationsrate. Eine Ausnahme stellte der naphtenische Kraftstoff dar, der trotz geringem Maximum im KL-Wert schon bei dem 4.0ms-Vergleichspunkt die nahezu höchste Russkonzentration aufwies.

	_			Somernment	ie ne-wen			
Maximale KL-Werte:	RDF	FT-Arom	FT-iPar	FT-Base	FT-Olef	FT-IIBP	FT-Naph	FT-Alc
4.0ms nach SOI:	RDF	FT-Arom	FT-Naph	FT-iPar	FT-Olef	FT-Base	FT-IIBP	FT-Alc
5.0ms nach SOI:	RDF	FT-Naph	FT-Arom	FT-Alc	FT-Olef	FT-iPar	FT-Base	FT-IIBP
6.0ms nach SOI:	FT-Naph	RDF	FT-Alc	FT-Arom	FT-Olef	FT-iPar	FT-Base	FT-IIBP

Tabelle 7-1: Übersicht über die Rangfolge der KL-Werte (Russkonzentrationen) bei mehreren Zeitschnitten.

Somit lässt sich folgern, dass der Temperaturverlauf im Motor entscheidend zum Russausstoß beiträgt und nicht der Kraftstoff mit der höchsten gebildeten Russmasse zwingenderweise zu einem Maximum an Russemissionen führt.

7.2 Summarische Kraftstoffbewertung

Um aus obigen Betrachtungen der motorischen Ergebnisse eine Bewertung der untersuchten Kraftstoffe ableiten zu können wurde die in Abschnitt 6.3 vorgestellte Gewichtungsfunktion verwendet. Wie beschrieben, war es das Ziel anhand kumulierter, gewichteter Unterschiede der Ergebnisse der synthetischen Kraftstoffe im Vergleich zum Referenzkraftstoff, die Auswirkungen und das Potenzial der einzelnen Merkmal prägenden Komponenten zusammenfassend darzustellen. Dafür wurden die Verbrauchs- und Emissionswerte als Bewertungskriterien herangezogen.

Diese Zusammenfassung wurde in zwei Schritten durchgeführt. Im ersten Schritt wurden die Ergebnisse der zwei hauptsächlichen Untersuchungsstrategien, die der Untersuchungen mit Blockeinspritzung und die der Untersuchungen mit zusätzlicher Voreinspritzung separat kumuliert. Da diese in einem zweiten Schritt zusammengefasst werden sollten, wurden aus den Untersuchungen mit Blockeinspritzung nur diejenigen Betriebsbedingungen berücksichtigt, die auch mit Voreinspritzung untersucht wurden.

In Tabelle 7-2 sind kumulierten, gewichteten Ergebnisse der Untersuchungen mit Blockeinspritzung dargestellt. Bezüglich des Kraftstoffverbrauchs resultieren die größten Vorteile aus Ergebnissen von Kraftstoffen mit vorwiegend langen geradkettigen Strukturen, die eine hohe Zündwilligkeit aufwiesen (FT-Base, FT-Olef). Kurzkettigere Anteile (FT-IIBP – niedriger Siedebeginn) sowie verzweigte Strukturen (FT-iPar – iso-Paraffine) führen zu einem geringeren Verbrauchsvorteil. Naphtenische Strukturen wirken sich hierbei negativ aus. Am gravierendsten war jedoch die Beimengung von Mono-Aromaten, die zu einem dem Referenzkraftstoff nahezu identischem Verbrauchsverhalten führte. Ähnliche Einflüsse waren bei der Beurteilung der teil- und unverbrannten Emissionen ersichtlich, die einen signifikanten Einfluss auf den Kraftstoffverbrauch hatten, wie bereits in Abschnitt 7.1.4 beschrieben wurde. Das günstigste Verhalten zeigten wiederum die zündwilligsten Kraftstoffe FT-Base und FT-Olef. Naphten, iso-Paraffine und kurzkettigere Strukturen hatten nahezu identische Auswirkungen und führten gegenüber dem FT-Basiskraftstoff zu leicht höheren CO- und HC-Emissionen. Mono-Aromaten führten wiederum zu gravierenden Nachteilen, wobei die gewichteten CO-Emissionen sogar über denen des Referenzkraftstoffs lagen. Bemerkenswert war das niedrige HC-Emissionsniveau des alkoholischen Blends, der eine signifikant niedrigere Cetanzahl als der FT-Basiskraftstoff aufwies. Die grundsätzlichen Vorteile der synthetischen Kraftstoffe bezüglich der Stickoxidemissionen konnten teilweise auf ein einen, gegenüber dem Referenzkraftstoff, geringeren Vormischanteil zurückgeführt werden, der zu niedrigeren Temperaturen bei Beginn der Diffusionsverbrennung führt. Für die Rangfolge unter den synthetischen Kraftstoffen, die stark von den betrachteten Betriebspunkten abhing konnte aus den Ergebnissen dieser Arbeit keine weitere Erläuterung gefunden werden. Zur Betrachtung der Russemissionen bei Blockeinspritzuntersuchungen muss auf die, in Abhängigkeit der Betriebsbedingungen, hohen Anteile vorgemischter Verbrennung bei Untersuchung des Referenzkraftstoffs hingewiesen werden. Dadurch wurden die Auswirkungen der chemischen und physikalischen Kraftstoffeigenschaften auf Russbildung und -oxidation teilweise überdeckt. Signifikante Vorteile waren dennoch für den Kraftstoff, der durch einen niedrigen Siedebeginn gekennzeichnet ist (FT-IIBP) ersichtlich. Die Nachteile des alkoholischen Blends und im Besonderen die des naphtenisch angereicherten Kraftstoffs können eventuell auf langsamer ablaufende Russoxidationsreaktionen zurückgeführt werden, die in der HD-/HT-Zelle am LAV beobachtet wurden.

		RDF		FT-Base	FT-Naph	FT-iPar	FT-Olef	FT-IIBP	FT-Arom	FT-Alc
		Mittelw ert: $\overline{\mathbf{x}}$	Einheit	ỹ [%]	ỹ [%]					
	bi	0.24	[kg/kWh]	-8.7	-3.4	-5.3	-7.3	-5.5	-0.5	-7.2
bur	mBxHu	675.49	[J]	-3.6	0.2	-1.0	-2.6	-1.7	-0.1	-4.7
ritzu	CO2_P	758.66	[g/kWh]	-6.5	-2.1	-4.8	-5.1	-3.2	1.6	-7.3
insp	CO_P	19.16	[g/kWh]	-41.1	-33.6	-29.0	-44.2	-27.1	8.9	-33.3
cke	HC_P	8.40	[g/kWh]	-52.9	-46.9	-43.7	-61.9	-42.7	-1.4	-54.4
Blo	NOx_P	3.00	[g/kWh]	-18.5	-11.6	-13.9	-5.4	-18.7	-16.4	-11.3
	Russ_P	24.16	[mg/kWh]	-7.6	32.6	-16.8	-12.2	-34.4	-24.8	9.1

Tabelle 7-2: Kumulierte gewichtete Unterschiede der synthetischen Kraftstoffe zum Referenzkraftstoff bei Untersuchungen mit Blockeinspritzung.

Die Applikation einer Voreinspritzung beeinflusste das Brennverhalten signifikant. Durch Radikalbildung und Temperaturerhöhung wurden einerseits die Zündverzüge selbst und andererseits die Unterschiede zwischen den Zündverzügen der verschiedenen Kraftstoffe stark verringert. Im Unterschied zu den Untersuchungen mit Blockeinspritzung war das Verbrauchs und Emissionsverhalten hier weit weniger von unterschiedlichen Anteilen vorgemischter Verbrennung abhängig. Aufgrund der "Vorkonditionierung" des Brennraums wurde ein weitaus niedrigeres Niveau teil- und unverbrannter Emissionen dokumentiert, wie am Vergleich der herangezogenen Mittelwerte (\bar{x}) des Referenzkraftstoffs deutlich wird (Tabelle 7-3). Zwar waren weiterhin große prozentuale Vorteile der zündwilligsten Kraftstoffe (FT-Base, FT-Olef) und des alkoholischen Blends hinsichtlich der CO- und HC-Emissionen ersichtlich – allerdings waren die Bezugswerte des Referenzkraftstoffs etwa um 75% niedriger als bei Untersuchungen mit Blockeinspritzung. Als Folge war hier auch ein niedrigeres Verbrauchsniveau dokumentiert worden, das, wie auch die teil- und unverbrannten Emissionen, vor allem aus einer vollständigeren Umsetzung bei niedriger Teillast resultierte. Weiterhin waren auch die Stickoxidemissionen im Mittel geringer, was die Annahme einer starken Beeinflussung durch den Vormischanteil bekräftigte. Der nun geringere Homogenisierungsgrad hatte auch einen starken Einfluss auf die Russemissionen, die nun im Mittel weitaus höhere Werte annahmen, als bei den Untersuchungen ohne Voreinspritzung. Somit waren hier die Auswirkungen der chemischen und physikalischen Kraftstoffeigenschaften auf die Russbildung und –oxidation maßgeblich. Die im gewichteten Mittel größten Vorteile waren für die durch iso-paraffinische und alkoholische Anteile gekennzeichneten Kraftstoffe sowie dem, analog der Untersuchungen mit Blockeinspritzung, Kraftstoff mit niedrigem Siedebeginn ersichtlich. Auch hier führten naphtenische Anteile zu Nachteilen im Vergleich der synthetischen Kraftstoffe.

		RDF		FT-Base	FT-Naph	FT-iPar	FT-Olef	FT-IIBP	FT-Arom	FT-Alc
		Mittelw ert: $\overline{\mathbf{x}}$	Einheit	ỹ [%]	ỹ [%]					
5	bi	0.22	[kg/kWh]	-3.9	-0.4	-0.6	-1.6	-0.6	0.7	-0.5
unz	mBxHu	653.44	[J]	-0.8	1.7	2.0	0.3	1.1	0.1	-0.7
sprit	CO2_P	734.95	[g/kWh]	-4.1	-1.3	-1.8	-2.0	0.1	2.7	-3.7
eins	CO_P	5.98	[g/kWh]	-45.7	-23.4	-24.4	-39.0	-28.9	-2.7	-33.8
fach	HC_P	2.24	[g/kWh]	-51.9	-34.6	-37.2	-47.9	-38.1	-20.4	-48.9
lehr	NOx_P	2.28	[g/kWh]	-7.9	-3.2	-3.4	-2.0	1.6	-5.7	-3.7
2	Russ_P	66.85	[mg/kWh]	-43.7	-30.2	-60.3	-53.1	-59.4	-47.5	-62.6

Tabelle 7-3: Kumulierte gewichtete Unterschiede der synthetischen Kraftstoffe zum Referenzkraftstoff bei Untersuchungen mit Mehrfacheinspritzung.

Um Abschließend einen Überblick über das Potenzial der untersuchten synthetischen Kraftstoffe zu gewährleisten, wurden die Ergebnisse beider Untersuchungsstrategien zusammengefasst und mittels der in Tabelle 4-6 (Abschnitt 6.3) vorgestellten Grenzwerte abstrahiert. Die Zusammenfassung der Ergebnisse aus beiden Untersuchungsstrategien hatte das Ziel ein gewisses applikatives Potenzial zu berücksichtigen, da die Betriebsbedingungen für den jeweiligen Kraftstoff in keinster Weise optimiert wurden sondern die Versuche hinsichtlich größtmöglicher Vergleichbarkeit durchgeführt wurden.

Anhand der so gewonnen Bewertung (Tabelle 7-4) ist ersichtlich, dass der FT-Basiskraftstoff das günstigste Verhalten bezüglich Verbrauch und Emissionen aufwies. Lediglich Russemissionen konnten durch kurzkettigere n- und iso-Paraffinanteile (FT-iPar, FT-IIBP) sowie durch Anteile längerkettiger Alkohole (FT-Alc) weiter reduziert werden. Bis auf eine Beimengung alkoholischer Anteile waren hier allerdings jeweils negative Auswirkung auf den Kraftstoffverbrauch und die weiteren Emissionen in Kauf zu nehmen. Durch ringförmige Strukturen wurden im Fall der Mono-Aromaten das CO- und HC-Emissionsverhalten und damit auch der Wirkungsgrad speziell bei niedriger Teillast signifikant verschlechtert. Naphtene führten zu Nachteilen bezüglich der Russemissionen.

		FT-Base	FT-Naph	FT-iPar	FT-Olef	FT-IIBP	FT-Arom	FT-Alc
ng	bi	+++	+	++	+++	++	0	++
ISSU	mBxHu	+	-	-	+	0	0	++
enfa	CO2_P	+++	+	++	++	+	-	+++
mm	CO_P	+++	+++	++	+++	++	-	+++
usa.	HC_P	++++	+++	+++	++++	+++	+	++++
st. Z	NOx_P	+	+	+	0	+	+	+
ab	Russ_P	+++	+	+++	+++	++++	+++	+++

Tabelle 7-4: Bewertung der untersuchten synthetischen Kraftstoffe aus motorischer Sicht.

Als weiteres Bewertungskriterium wurde der beim Dieselmotor im Fokus befindliche Russ-NO_X-Tradeoffs gewählt. Dazu wurden die Ergebnisse der Versuche mit Mehrfacheinspritzung herangezogen, da hier ein realitätsnäherer Betrieb vorlag. Da die Russemissionen bei niedriger Teillast aber aufgrund ihres sehr niedrigen Niveaus von geringer Relevanz waren, wurden hier die unverbrannten Kohlenwasserstoffe als die der Stickoxidminimierung gegenläufige Größe dargestellt (Abbildung 7-31, links). Dies ist auch im Hinblick auf eine Zertifizierung relevant, da eine Summenobergrenze für HC- und NO_X-Emissionen zur Anwendung kommt. Bei höherer Teillast spielen teil- und unverbrannte Emissionen wegen des hohen Temperaturniveaus eine untergeordnete Rolle. Hier lag der Fokus der Betrachtungen auf dem zu erwartenden Anstieg der Russemissionen bei innermotorischer Absenkung der Stickoxide (Abbildung 7-31, rechts).



Abbildung 7-31: HC-NO_x-Tradeoff bei 1500U/min, 2bar p_{mi} (links); Russ-NOX-Tradeoff bei 2000U/min, 10bar p_{mi} (rechts) aus Untersuchungen mit Mehrfacheinspritzung.

Folglich stellen langkettige Alkoholmoleküle eine zu favorisierende Kraftstoffkomponente dar, die das Potenzial hat, Russemissionen über das für Fischer-Tropsch-Kraftstoffe übliche Maß hinaus zu verringern, ohne weitere positive Eigenschaften dieser Kraftstoffe nachteilig zu beeinflussen.

8 Zusammenfassung und Ausblick

In Anlehnung an die Fragestellung des Projekts ist ein optimaler Kraftstoff durch minimale Schadstoffemissionen bei größtmöglicher Effizienz definiert. Dazu wurde eine Kraftstoffmatrix bestehend aus sieben synthetischen Kraftstoffen mit unterschiedlichen, Merkmal prägenden Komponenten und einem Referenzkraftstoff definiert und experimentell untersucht. Ziel der durchgeführten Untersuchungen an Einzylindermotor und Hochdruck-/ Hochtemperaturzelle war es, aufzuzeigen inwieweit und weshalb verschiedene Molekülstrukturen das Brennund Emissionsverhalten beeinflussen.

Um dem, aufgrund der gewählten Betriebsparameteranzahl, hohen motorischen Versuchsaufwand zu begegnen wurden Methoden der statistischen Versuchsplanung herangezogen. Es konnte gezeigt werden, dass diese Vorgehensweise ein effizienter Weg war um die Versuchsanzahl bei gleichzeitig hohem Erkenntnisgewinn zu minimieren. Durch Kombination mehrerer Techniken der Versuchsplanung und der Modelloptimierung konnte eine sehr hohe Modellgüte erreicht werden.

Die Ergebnisse aus den motorischen Untersuchungen zeigten eine starke Abhängigkeit vom betrachteten Lastzustand und der gewählten Betriebsstrategie (mit oder ohne Voreinspritzung). Grundsätzlich waren die meisten Effekte, die bei Blockeinspritzuntersuchungen auftraten, auf die Untersuchungen mit Voreinspritzung übertragbar, wobei die Unterschiede zwischen den Kraftstoffen beim Betrieb mit Blockeinspritzung zumeist stärker ausgeprägt waren. Der Einfluss des Lastzustands war einerseits im Temperaturniveau bei Beginn der Einspritzung und andererseits in der benötigten Zeit für den Einspritzvorgang zu sehen. Deshalb mussten die Ergebnisse unter Berücksichtigung der jeweiligen Betriebsbedingung bewertet werden.

Bei Betriebspunkten der niedrigen Teillast konnten signifikante Vorteile synthetischer Kraftstoffe von vorwiegend langkettiger und gerader Struktur bezüglich teil- und unverbrannter Emissionen gegenüber dem Referenzkraftstoff beobachtet werden. Die Größe des Vorteils korrelierte mit steigender Zündwilligkeit der betrachteten Kraftstoffe. Es wurde gezeigt, dass beobachtete Verbrauchsvorteile zu einem großen Teil auf Vorteile bezüglich verminderter CO- und HC-Emissionen zurückzuführen sind. Durch eine Beimengung aromatischer Anteile wurde ein, dem Referenzkraftstoff sehr ähnliches Brennverhalten beobachtet: Sowohl Verbrauch als auch teil- und unverbrannte Emissionen lagen auf dem Niveau der Referenzkraftstoffs. Dieses Verhalten wurde gleichfalls bei der Betriebsstrategie mit Voreinspritzung festgestellt, wobei der Ausstoß an CO- und HC-Emissionen aufgrund des durch die Voreinspritzung erhöhten Temperaturniveaus um ein Vielfaches geringer war.

Der Fokus der Betrachtungen bei Betriebspunkten höherer Teillast lag auf den Kraftstoffeinflüssen auf die Russemissionen. Hier war die Übertragung von aus Blockeinspritz-

8 Zusammenfassung und Ausblick

Untersuchungen gewonnenen Erkenntnissen auf den Betriebsmodus mit applizierter Voreinspritzung nicht mehr ohne Weiteres möglich. Aufgrund im Gegensatz zu den synthetischen Kraftstoffen weitaus längeren Zündverzügen des Referenzkraftstoffs bei Blockeinspritzbetrieb, wurde eine anteilig größere Vormischverbrennung beobachtet. Da das Russemissionsverhalten bei applizierter Voreinspritzung stark abwich, ist davon auszugehen, dass Homogenisierungseffekte strukturchemische Eigenschaften überdeckten. Die im Vergleich der synthetischen Kraftstoffe höchsten Russemissionen wurden unabhängig von der Einspritzstrategie mit naphtenischen Kraftstoffanteilen beobachtet. Dies kann eventuell durch die im Vergleich am langsamsten ablaufenden Russoxidationsprozesse begründet werden, wie es durch Ergebnisse aus den pyrometrischen Untersuchungen in der HDTZ nahegelegt wird. Demgegenüber konnten die niedrigsten Russemissionen bei Untersuchung des alkoholischen Blends mit Mehrfacheinspritzung dokumentiert werden. Dieser zeigte auch die niedrigsten Maxima des KL-Wertes in HDTZ-Untersuchungen.

Aus einer abschließenden Kraftstoffbewertung folgte, dass der FT-Basiskraftstoff bezüglich Wirkungsgrad, teil- und unverbrannten Emissionen und Stickoxiden das günstigste Verhalten aufwies. Der Russausstoß konnte durch den Kraftstoff mit niedrigem Siedebeginn, dem Kraftstoff mit gesteigertem iso-Paraffin Anteil und dem Kraftstoff mit langkettigen Alkoholen nochmals verringert werden. Aber abgesehen vom alkoholischen Kraftstoff hatte dies negative Auswirkungen auf die weiteren Bewertungskriterien. Folglich stellen langkettige Alkohole eine vielversprechende Kraftstoffkomponente für zukünftige Kraftstoffe dar.

Für die Zukunft gilt es nun zu definieren, wie synthetische Kraftstoffe zum Einsatz kommen können und auf welche fahrzeugseitigen Rahmenbedingungen diese zu optimieren sind. Für den Einsatz synthetischer Kraftstoffe ist zunächst die produktionstechnisch darstellbare Menge entscheidend. Da nicht davon auszugehen ist, dass der weltweite Bedarf an Dieselkraftstoffen kurzfristig durch synthetische Kraftstoffe substituierbar ist, muss davon ausgegangen werden, dass zunächst die Verwendung als Zumischkomponente zu konventionellen Kraftstoffen in Frage kommt.

Auf Basis der in der vorliegenden Arbeit gewonnen Erkenntnissen kann nun bei bekanntem Einsatzszenario aufgebaut werden und die synthetische Kraftstoffkomponenten so definiert werden, dass sich ein größtmöglicher Benefit bezüglich des Brenn- und Emissionsverhaltens des resultierenden Kraftstoffs ergibt.

108

9 Literaturverzeichnis

- [1] EUCAR: *Well-To-Wheels Analysis of Future Automotive Fuels and Powertrains in the European Context*. <u>http://ies.jrc.cec.eu.int/wtw.html</u>.
- [2] Franz Joos: *Technische Verbrennung Verbrennungstechnik, Verbrennungsmodelierung, Emissionen*, Springer, ISBN-10 3-540-34333-4, 2006.
- [3] Robert Anderson: *The Fischer-Tropsch Synthesis*, Academic Press, ISBN 0-12-058460-3, 1984.
- [4] Sir Philipp Watts, Niels Fabricius: *The Qatar Shell Gas to Liquids project*, Group External Affairs, SI, Shell Centre, London SE1 7NA, England, 2003.
- [5] Matthias Rudloff: SunDiesel made by CHOREN Erfahrungen und Neueste Entwicklungen, Vortrag zum Kongress "Synthetische Biokraftstoffe – Techniken, Potenziale, Perspektiven", 3./4. November 2004 in Wolfsburg.
- [6] Stefan Pischinger: *Verbrennungsmotoren Band1*, Vorlesungsmanuskript, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 21. Auflage, 2000.
- [7] Alfons H\u00e4dener, Heinz Kaufmann: Grundlagen der organischen Chemie, 11. Auflage, Birkh\u00e4user Verlag, ISBN 3-7643-7040-8, 2006.
- [8] Thomas Ziegler: *Einführung in die Chemie Teil B: Organische Chemie*, Vorlesungsmanuskript, Universität Tübingen, 2004.
- [9] Richard van Basshuysen, Fred Schäfer (Hrsg.): Handbuch Verbrennungsmotor, Vieweg, ISBN: 978-3-8348-0227-9, 2007.
- [10] Castrol AG: *ABC der Schmierung Aufbau, Verwendung und Eigenschaften von Schmierstoffen*, Castrol Live Assets, August 2007.
- [11] Nils-Olof Nylund, Päivi Aakko, Seppo Niemi, Tommi Paanu, Rolf Berg: Alcohols/Ethers as Oxygenates in Diesel Fuel: Properties of Blended Fuels and Evaluation of Practical Experiences, TransEnergyConsulting Report TEC 3/2005.
- [12] Helmut Eichlseder, Manfred Klüting, Walter Piock: *Grundlagen und Technologien des Ottomotors*, Springer, ISBN: 978-3-211-25774-6, 2008.
- [13] G. Jury: Potential biologischer und fossiler Treibstoffe im konventionellen und alternativen Motorbetrieb, Diplomarbeit am Institut f
 ür Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik der Technischen Universit
 ät Graz, 2008.
- [14] Hans Christen, Fritz Vögtle: *Organische Chemie 1*, Sauerländer, ISBN 3-7941-2001-4, 1988.

- [15] ASTM D613-93: Test Method for Cetane Number of Diesel Fuel Oil, 1993.
- [16] DIN EN ISO 5165: 1999-05: Bestimmung der Zündwilligkeit von Dieselkraftstoffen Cetan-Verfahren mit dem CFR-Motor, 1999.
- [17] DIN 51773: 1996-03: Prüfung flüssiger Kraftstoffe Bestimmung der Zündwilligkeit (Cetanzahl) von Dieselkraftstoffen mit dem BASF-Prüfmotor, 1996.
- [18] DIN 51773: 2010-04: Prüfung flüssiger Kraftstoffe Bestimmung der Zündwilligkeit (Cetanzahl) von Dieselkraftstoffen mit dem BASF-Prüfmotor, 2010.
- [19] Uwe Hillenbrand: *Stöchiometrie Ein Einführung mit Beispielen und Übungsaufgaben*, Springer, ISBN: 3-540-36153-7, 2007.
- [20] DIN EN 590:2004-03: Kraftstoffe für Kraftfahrzeuge Dieselkraftstoff Anforderungen und Prüfverfahren, Deutsche Fassung, 2004.
- [21] Herbert Schumacher, Konrad Reif (Hrsg.): Dieselmotor-Management im Überblick einschließlich Abgastechnik, Fachinformation Automobil - Robert Bosch GmbH, Vieweg-Teubner, ISBN: 978-3-86522-007-3.
- [22] Mark E. Dry: *The Fischer-Tropsch Process* 1950-2000, Catalysis Today 71 (2002) 227-241.
- [23] Hans-Jürgen Arpe: Industrielle organische Chemie Bedeutende Vor- und Zwischenprodukte, Wiley-VCH, 6. Auflage, Weinheim, 3-527-31540-3, 2007.
- [24] Spath P.L., et.al.: Preliminary Screening —Technical and Economic Assessment of Synthesis Gas to Fuels and Chemicals with Emphasis on the Potential for Biomass-Derived Syngas, National Renewable Energy Laboratory (NREL) 2003.
- [25] Øyvind Vessia, Per Finden, Øyvind Skreiberg: Biofuels from lignocellulosic material -Technology, Potential and Costs, Project Report, NTNU - Norwegian University of Science and Technology, 2005.
- [26] Teresa L. Alleman, Robert L. McCormick: *Fischer-Tropsch Diesel Fuels Properties* and *Exhaust Emissions: A Literature Review*, SAE-Paper No. 2003-01-0763.
- [27] Paul M. Morgan, Carl I. Viljoen, Piet N. Roets, Paul W. Schaberg, Ian S. Myburgh, Jocabus J. Botha, Luis P. Dancuart: Some Comparative Chemical, Physical and Compatibility Properties of Sasol Slurry Phase Distillate Diesel Fuel, SAE-Paper No. 982488, 1998.
- [28] Koji Kitano, Ichiro Sakata, Richard Clark: Effects of GTL Fuel Properties on DI Diesel Combustion, SAE-Paper No. 2005-01-3763.

- [29] H.-O. Hermann et al.: *Potenzial synthetischer Kraftstoffe zur Einhaltung künftiger Emissionsgrenzwerte*, Int. Wiener Motorensymposium 2006.
- [30] Mario Adam: Statistische Versuchsplanung und Auswertung, Vorlesungsmanuskript im Rahmen des Masterstudiengangs "Simulation und Experimentaltechnik" der FH Düsseldorf.
- [31] Douglas C. Montgomery: *Design and analysis of experiments*, 7.ed, Wiley, ISBN 978-0-470-12866-4, 2009.
- [32] The Mathworks: *Model Browser User's Guide*, Version 2 Release 14+, June 2004.
- [33] Wolf Baumann: Steuerung und Regelung von Antriebssträngen Design of Experiments & Modellbildung, Vorlesungsmanuskript IAV GmbH / TU Berlin, 2008.
- [34] Karsten Röpke and 75 co-authors: *Design of Experiments in Engine Development*, Expert Verlag, ISBN 978-3-8169-2937-6, 2009.
- [35] Curt Ullrich Ronniger: D-optimale Versuchspläne, http://www.crgraph.de/D-Optimal.pdf
- [36] Karl Siebertz, David van Bebber, Thomas Hochkirchen: Statistische Versuchsplanung Design of Experiments (DoE), Springer, ISBN 978-3-642-05492-1, 2010.
- [37] Ludwig Fahrmeir, Thomas Kneib, Stefan Lang: *Regression Modelle, Methoden und Anwendungen*, Springer, ISBN 978-3-540-33932-8, 2007.
- [38] Oliver Nelles: Nonlinear System Identification From Classical Approaches to Neural Networks and Fuzzy Models, Springer, ISBN 3-540-67369-5, 2001.
- [39] Kenneth Burnham, David Anderson: Model Selection and Inference A Practical Information-Theoretic Approach, Springer, ISBN 0-387-98504-2, 1998
- [40] Jürgen Hammer: *Einspritztechnik*, Vorlesungsmanuskript Robert Bosch GmbH / IVK Universität Stuttgart 2007.
- [41] Joachim Schommers, Franz-Paul Gulde, Martin Hoppenstedt, Gerhard Gruber, Wolfgang Fick, Wolfgang Ruisinger, Gregor Renner, Andreas Lingens: *Evolution des Vierzylinder-Dieselmotors von Mercedes-Benz*, MTZ 01/2007.
- [42] Martin Schmitt: *Konstruktion einer Vorbrennkammer mittels CFD*, Studienarbeit am LAV, ETH Zürich, 2009.
- [43] Johannes Brettschneider: Berechnung des Luftverhältnisses λ von Luft-Kraftstoff-Gemischen und des Einflusses von Messfehlern auf λ, Bosch techn. Berichte 6 (1979)
 4.

- [44] Richtlinie 2005/55/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 28. September 2005 zur Angleichung der Rechtsvorschriften der Mitgliedstaaten über Maßnahmen gegen die Emission gasförmiger Schadstoffe und luftverunreinigender Partikel aus Selbstzündungsmotoren zum Antrieb von Fahrzeugen und die Emission gasförmiger Schadstoffe aus mit Flüssiggas oder Erdgas betriebenen Fremdzündungsmotoren zum Antrieb von Fahrzeugen, Stand 10.06.2006.
- [45] AVL: *Rauchwertmessung mit der Filterpapiermethode*, Application Notes, AT1007D, Rev. 02, Juni 2005.
- [46] Peter Obrecht: WEG-Rechenprogramm zur Berechnung des Wärmeentwicklungsgesetzes aus gemessenen Brennraumdruckverläufen von Diesel- und Ottomotoren. LAV, ETH Zürich, 1995 (Rev2011)
- [47] Bruno Schneider: Experimentelle Untersuchung zur Spraystruktur in transienten, verdampfenden und nicht verdampfenden Brennstoffstrahlen unter Hochdruck, Dissertation ETH Zürich Nr. 15004, 2003.
- [48] Ourania-Nektaria Margari: Optical Investigation of Soot Evolution in Spray Combustion Influence of Fuel Composition and Injection Parameters, Dissertation ETH Zürich Nr. 17143, 2007.
- [49] Patrick Kirchen: Steady-State and Transient Diesel Soot Emissions: Development of a Mean Value Soot Model and Exhaust-Stream and In-Cylinder Measurements, Dissertation ETH Zürich Nr. 18088, 2008.
- [50] Klaus Mollenhauer, Helmut Tschöke: *Handbuch Dieselmotoren*, 3. Auflage, ISBN 978-3-540-72164-2, 2007.
- [51] Günter Merker, Christian Schwarz, Gunnar Stiesch, Frank Otto: Verbrennungsmotoren
 Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung, 3. Auflage, ISBN-10 3-8351-0080-7, 2006.
- [52] Michael Bargende: *Grundlagen der Verbrennungsmotoren*, Vorlesungsmanuskript, Universität Stuttgart, Stand 2010.
- [53] Jiafeng Sun, Jerald Caton, Timothy Jacobs: Oxides of nitrogen emissions from biodiesel-fuelled diesel engines, Progress in Energy and Combustion Science 36 (2010) 677-695.
- [54] Günter Figer: Homogene Selbstzündung und Niedertemperaturbrennverfahren für direkteinspritzende Dieselmotoren mit niedrigsten Partikel und Stickoxidemissionen, Dissertation, Technische Universität Graz, 2003.

- [55] P. Hottenbach, S. Pischinger et al.: *Optical and Thermodynamic Investigations of Reference Fuels for Future Combustion Systems*, SAE-Paper No. 2010-01-2193.
- [56] K. Nakakita, J.T. Farrell et al.: Effect of the hydrocarbon molecular structure in diesel fuel on the in-cylinder soot formation and exhaust emissions, Int. Journal of Engine Research Vol. 6, p.187-205, 2005.
- [57] Dale R. Tree, Kenth I. Svenson: Soot processes in compression ignition engines, Progress in Energy and Combustion Science 33, 2007, p. 272-309.
- [58] P. Kirchen et al.: Correlation and Analyis of In-Cylinder and Engine-Out Soot Emission Measurements from a Multi-Cylinder Diesel Engine, 8. Internationales Stuttgarter Symposium, Stuttgart, 2008, Seiten 129-145.

10 Anhang

10.1 Abkürzungsverzeichnis

[]	Konzentration, z.B. [CO] entspricht der Kohlenmonoxidkonzentration
°C	Grad Celsius
°KW	Grad Kurbelwinkel
ABHE	Ansteuerbeginn der Haupteinspritzung
ABVE	Ansteuerbeginn der Voreinspritzung
ADHE	Ansteuerdauer der Haupteinspritzung
ADVE	Ansteuerdauer der Voreinspritzung
AG	Aktiengesellschaft
AGR	Abgasrückführung
ASP	Arbeitsspiel
B50	50%-Umsatzlage, berechnet auf Basis des Brennverlaufs
BB	Brennbeginn
BD5090	Brenndauer von der 50%- bis zur 90%-Umsatzlage
BDBB50	Brenndauer vom Brennbeginn bis zur 50%-Umsatzlage
BDBB90	Brenndauer vom Brennbeginn bis zur 90%-Umsatzlage
BES / SSI	Blockeinspritzung / Single Shot Injection
bi	spezifischer Verbrauch, bezogen auf die indizierte Leistung
BtL	Biomass-to-Liquid
со	Kohlenmonoxid
CO_P	Spezifische Kohlenmonoxidemissionen
CO ₂	Kohlendioxid
CO2_P	Spezifische Kohlendioxidemissionen
CtL	Coal-to-Liquid
CZ / CN	Cetanzahl / Cetan Number
DoE	Design of Experiments / Statistische Versuchsplanung
dQb	Brennverlauf
DZ	Drehzahl
ETH	Eidgenössische Technische Hochschule

ЕТК	Emulator Tastkopf
EU	Europäische Union
FSN	Filter Smoke Number
FT	Fischer-Tropsch
FVV	Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen
GmbH	Gesellschaft mit beschränkter Haftung
GtL	Gas-to-Liquid
GUT	Unterer Totpunkt, Gaswechsel
H50	50%-Umsatzlage, berechnet auf Basis des Heizverlaufs
HC	Kohlenwasserstoffe
HC_P	Spezifische Kohlenwasserstoffemissionen
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
H _{CV}	Wasserstoff-Kohlenstoffverhältnis
HDTZ	Hochdruck- / Hochtemperaturzelle
HE	Haupteinspritzung
HFRR	High Frequency Reciprocating Rig, Methode zur Bestimmung der Schmierfähigkeit von Kraftstoffen nach EN ISO 12156-1
Hu	unterer Heizwert
IAV	Ingenieurgesellschaft Auto und Verkehr
IFP	Institute Francaise du Petrole
IVK	Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen
К	Grad Kelvin / Wassergasgleichgewichtskonstante
k	Faktor des Arbeitsverfahrens (4-Takt: k=0,5)
LAV	Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme
Lst	stöchiometrisches Luftverhältnis
mB	Brennstoffmasse
MES / MSI	Mehrfacheinspritzung / Multi Shot Injection
min	Minute
mL	Luftmasse
ms	Millisekunde
n	Drehzahl
NE	Nacheinspritzung

NEFZ	Neuer Europäischer Fahrzyklus
NO _X	Stickoxide
NOX_P	Spezifische Stickoxidemissionen
O ₂	Sauerstoff
O _{CV}	Sauerstoff-Kohlenstoffverhältnis
ОТ	Oberer Totpunkt
P _i	indizierte Leistung
PKW	Personnenkraftwagen
p _{mi}	Indizierter Mitteldruck
ppm	parts per milion
pRail	Raildruck (Common-Rail System)
Q	Wärme
Russ_P	Spezifische Russemissionen
SASOL	Suid Afrikaanse Steenkool en Olie
SMDS	Shell Middle Destilate Synthesis
TSR	Ladelufttemperatur
U	Umdrehung
VE	Voreinspritzung
vol%	Volumenprozent
W _{CV}	Wasser-Kohlenstoffverhältnis
XtL	X-to-Liquid (Zusammenfassung synthetischer Kraftstoffe unabhängig vom Kohlenwasserstoffträgers)
ZOT	Oberer Totpunkt, um welchen die Zündung stattfindet
ZV_dQb	Zündverzug, berechnet auf Basis des Brennverlaufs
λ	Luftverhältnis bezogen auf das stöchiometrische Luftverhältnis
μ	Molmassenverhältnis trockener Luft zu Wasser
μs	Microsekunde
ρ	Dichte
φ	Kurbelwinkel
Х	Luftfeuchte in Wasserdampf je kg trockener Luft

10.2 Bedienungsanleitung der GUI zur Visualisierung der motorischen Ergebnisse

Das in Abschnitt 6.2.2 vorgestellte Auswertewerkzeug wurde als ausführbares "standalone" Programm ausgeführt und ist somit nicht auf die Programmierumgebung von Matlab angewiesen. Ist Matlab auf dem jeweiligen Rechner nicht vorhanden muss die im Software-Paket enthaltene MCR (Matlab Compiler Runtime) installiert werden. Der Aufruf des eigentlichen Programms erfolgt über die ausführbare Datei "FFD_MotEgb_GUI.exe".

Die Bedienung der graphischen Benutzeroberfläche wird im Folgenden anhand von Abbildung 10-1 erläutert.



Abbildung 10-1: Bedienfunktionen der GUI zur Visualisierung der motorischen Ergebnisse.

Feld	Auswahl	Möglichkeiten	Bemerkungen
1	Kraftstoff	zu berücksichtigende Kraftstoffe	min. 1 Kraftstoff muss gewählt
2	Ergebnisart	BES-ErgebnisseMES-ErgebnisseVL-Ergebnisse	Unt. mit Blockeinspritzung Unt. mit Mehrfacheinspritzung Volllastuntersuchungen
3	Kennwerttyp	VerbrennungskennwerteVerbrauch und Emissionen	

Feld	Auswahl	Möglichkeiten	Bemerkungen
4	Betriebspunkt	 BP1500-2 BP2000-2 BP2000-6 BP2000-10 BP2000-VL (nur VL-Ergeb.) BP4000-VL (nur VL-Ergeb.) 	1500U/min, 2bar p _{mi} 2000U/min, 2bar p _{mi} 2000U/min, 6bar p _{mi} 2000U/min, 10bar p _{mi} 2000U/min, Volllast 4000U/min, Volllast
5	Ergebnisgröße	 H50 (VerbrennKW) B50 (VerbrennKW) ZV_dQb (VerbrennKW) BDBB50 (VerbrennKW) BD5090 (VerbrennKW) BDBB90 (VerbrennKW) bi (Verb. & Emiss.) mB_ASP (Verb. & Emiss.) CO2_P (Verb. & Emiss.) CO_P (Verb. & Emiss.) HC_P (Verb. & Emiss.) NOX_P (Verb. & Emiss.) Russ_P (Verb. & Emiss.) 	50%-Umsatzlage auf Basis dQh 50%-Umsatzlage auf Basis dQb Zündverzug Brenndauer vom BB bis B50 Brenndauer vom B50 bis B90 Brenndauer vom BB bis B90 Spezifischer Kraftstoffverbrauch Energieeintrag pro Arbeitsspiel Spez. Kohlendioxidemissionen Spez. Kohlenmonoxidemissionen Spez. Kohlenwasserstoffemission. Spez. Stickoxidemissionen Spez. Russemissionen
6	Laufvariable	- TSR - AGR - pRail - ABHE (VerbrennKW) - H50 (Verb. & Emiss.)	
7	statische Vari- ablen	Wahl der Werte der statischen Variablen	Die Wahl der Laufvariable führt automatisch dazu, dass die ver- blieben Variaben als statisch defi- niert werden. Hier können die Werte über Schieberegler einge- stellt werden.
8	Plot	Aufruf der Polynomauswertung bzw. Darstellung der Ergebnisse aus MES- und VL Untersuchun- gen.	
9	Data Cursor	Numerische Werte können aus den Graphen abgelesen werden	Über die rechte Maustaste stehen weitere Optionen zur Verfügung
10	Skalierung x- Achse	min/ maxWerte für x-Achse definieren	
11	Skalierung y- Achse	min/ maxWerte für x-Achse definieren	
12	Speichern	Möglichkeit den Graphen als Bild (*.emf, *.jpg, *.tif) zu speichern	Zielordner und Dateinamen ange- ben
13	Drucken	Aufruf des Druckmenüs	

Lebenslauf

1981	Geboren am 31.01.1981 in Bayreuth
1987 - 1991	Grundschule Neudrossenfeld
1991 - 2000	Graf-Münster Gymnasium Bayreuth, Allgemeine Hochschulreife
2001 - 2007	Universität Stuttgart, Diplomstudiengang Fahrzeug- und Motorentechnik
2007	Diplomarbeit bei Mahle Powertrain Ltd, Northampton, UK
2007 - 2011	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen, Universität Stuttgart
Seit 2011	Entwicklungsingenieur bei der Robert Bosch GmbH, Stuttgart Feuerbach, Geschäftsbereich Diesel Systems, Abteilung DS/EVL2