Technische Universität München Institut für Energietechnik

Lehrstuhl für Thermodynamik

Einfluss der Wasser- oder Emulsionseinspritzung auf die homogene Dieselverbrennung

Thomas Wolfgang Steinhilber

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen der Technischen Universität München zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR – INGENIEURS

genehmigten Dissertation.

Vorsitzender:

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Bernd-Robert Höhn Prüfer der Dissertation:

- 1. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer
- 2. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Konstantinos Boulouchos, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich

Die Dissertation wurde am 19.09.2007 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die Fakultät für Maschinenwesen am 12.12.2007 angenommen.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Assistent am Lehrstuhl für Thermodynamik der Technischen Universität München.

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer für die Betreuung der Arbeit, das entgegengebrachte Vertrauen sowie für die Freiheit bei der wissenschaftlichen Tätigkeit und die Übernahme des Hauptreferates. Herrn Prof. Dr.-Ing. Konstantinos Boulouchos danke ich für die freundliche Übernahme des Koreferats und Herrn Prof. Dr.-Ing. Bernd-Robert Höhn für den Vorsitz bei der mündlichen Prüfung.

Herrn Prof. Wolfgang Polifke Ph.D. (CCNY) danke ich für die gute Zusammenarbeit bei der Betreuung des Vorlesungsfaches "Wärme- und Stoffübertragung".

Großer Dank geht auch an meine Kolleginnen und Kollegen des Lehrstuhls für Thermodynamik inklusive dem Sekretariat, der elektrischen und der mechanischen Werkstatt. Von ihnen durfte ich stets hilfreiche und wohlwollende Unterstützung erfahren und sie sorgten für die freundschaftliche Atmosphäre am Lehrstuhl. Ausdrücklich nennen möchte ich dabei Herrn Dr.-Ing. Thomas Lex für die gute Einführung bei der Übergabe der Assistenz zur Vorlesung "Wärme- und Stoffübertragung". Herrn Jürgen Grünwald danke ich für die Tropfengrößenbestimmung der Emulsion, meinem Büro-Kollegen Herrn Joao Carneiro für die Unterstützung bei den durchgeführten Simulationen sowie den Herren Jochen Kalb und Dr.-Ing. Marcus Pöschl für die Durchsicht der Arbeit. Weiterhin danke ich den Studenten und wissenschaftlichen Hilfskräften, besonders den Herren Marco Konle sowie Raffael Rossi, für ihren Einsatz und die tatkräftige Unterstützung.

Mein Dank geht auch an Herrn Sebastian Rehfeldt vom Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik für die fachliche Unterstützung zum Thema Emulsion sowie die Durchführung der Destillation. Ganz besonderen Dank möchte ich meinem Büro-Kollegen Herrn Dr.-Ing. Marcus Pöschl aussprechen. Die Zusammenarbeit war von Beginn an außerordentlich freundschaftlich und hilfreich.

Meiner Familie und besonders meiner Freundin Nina möchte ich für die ausdauernde Unterstützung und Geduld bei der Fertigstellung dieser Arbeit danken.

München, im September 2007

Thomas Steinhilber

Kurzfassung

Die Arbeit untersucht den Einfluss der getrennten Wassereinspritzung sowie der Nutzung von Emulsionen auf die homogene Dieselverbrennung.

Zunächst wird die homogene Dieselverbrennung ohne Wasserzugabe von der Einspritzung über die Homogenisierung bis einschließlich der Verbrennung anhand am Einhubtriebwerk gewonnener experimenteller Ergebnisse aufgezeigt. Anschließend liefert eine 0-dimensionale Betrachtung eine aussagekräftige Grundlage zum thermodynamischen und kinetischen Verständnis der primär physikalischen Wirkungsweise von Wasser. Der Hauptteil der Arbeit widmet sich dem Vergleich der beiden Wasserzugabeverfahren auf Basis von experimentellen Ergebnissen sowie CFD-Simulationen. Aufgrund des Verdampfungsverhaltens liefert auch eine Emulsion keine perfekte, jedoch eine deutlich höhere Überlappung von Kraftstoff- und Wasserdampf, womit die Zündung effektiver verzögert wird und niedrigere Stickoxidemissionen resultieren. Bei der getrennten Einspritzung ist dagegen die Verdampfung der Kraftstofftropfen intensiver, eine bessere Kraftstoffhomogenität wird erzielt und in Folge die Rußbildung besonders effektiv gesenkt. Das Wasser generiert dann höhere Temperaturgradienten, wodurch die von sukzessiven Selbstzündungen dominierte Verbrennungsausbreitung und damit die Druckanstiegsrate intensiver gesenkt werden.

Abstract

The influence of water or emulsion injection on homogeneous charge compression ignition (HCCI) of Diesel fuel have been investigated.

First without the addition of water, fundamental characteristics of injection, homogenization, ignition and combustion are shown by experimental results made with a rapid compression and expansion machine. Then, thermodynamic and kinetic fundamentals of the primary physical effects of water addition are presented on basis of 0-dimensional simulations. The main part focuses on the comparison of the separate injection of water and the usage of emulsions on basis of experiments as well as CFD simulations. Based on the evaporation characteristic of emulsions, steam and fuel vapor are not congruent but the overlapping is significantly higher resulting in a more effective retardation of ignition as well as lower NOx emissions. Instead, the separate injection provides a better vaporization of fuel, a higher fuel homogeneity and finally lower soot emissions. Dominated by successive self-ignitions, the combustion propagation is slower and the pressure rise rates lower for higher temperature gradients in the case of separate water injection.

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	leitung 1		
	1.1	Motivation		1
	1.2	Konzept eines n	euen Brennverfahrens	4
	1.3	Aufgabenstellur	g der Arbeit	5
2	Gru	ndlagen		9
	2.1	Einspritzung u	nd Strahlausbreitung bei dieselmotorischen	
		Drücken		9
	2.2	Kraftstoff-Wasse	r-Emulsionen	14
		2.2.1 Aufbau u	nd Eigenschaften von Emulsionen	14
		2.2.2 Tropfeng	öße bei Emulsionseinspritzung mit dieselmo-	
		torischen	Einspritzdrücken	15
		2.2.3 Verdamp	fungsverhalten von Kraftstoff-Wasser-Emulsionen	17
	2.3	Chemische Kine	tik	21
		2.3.1 Zündung	und Verbrennung dieselartiger Kraftstoffe	23
	2.4	Schadstoffentstehung 22		29
		2.4.1 Stickoxid	$e(NO_x)$	30
		2.4.2 Kohlenm	onoxid (CO)	34
		2.4.3 Ruß		35
	2.5	Relevante Ausbr	eitungsmechanismen der Verbrennung	37
		2.5.1 Deflagrat	ive Flammenausbreitung	37
		2.5.2 Sukzessiv	e Selbstzündungen nach Zel'dovich	39
3	Star	d der Technik de	er homogenen Selbstzündung	43
	3.1	Historische Entv	vicklung der homogenen Kompressionszündung	43
	3.2	Brennverfahren	mit homogener Kompressionszündung	47
		3.2.1 Äußere G	emischbildung	47

		3.2.2	Innere Gemischbildung	50		
		3.2.3	Abgasrückführung	53		
	3.3	Nutzı	ang von Wasser bei der Verbrennung	54		
		3.3.1	Einsatz von Wasser bei konventionellen Brennverfahren .	55		
		3.3.2	Einsatz von Wasser bei der homogenen Kompressions-			
			zündung	58		
		3.3.3	Verschleiß	60		
4	Experimenteller Aufbau und applizierte Messtechnik					
	4.1	Einhu	ıbtriebwerk	61		
	4.2	Einsp	ritzsysteme	64		
	4.3	Messt	echnik	67		
		4.3.1	Standard-Messtechnik	67		
		4.3.2	Optische Messtechnik	67		
		4.3.3	Abgasmesstechnik	71		
5	Nun	neriscl	he Simulation	73		
	5.1	Verne	etzung	74		
	5.2	Spray	simulation nach Lagrange	76		
	5.3	Mode	llierung der Emulsionsverdampfung	81		
		5.3.1	Wärmeübertragung	83		
		5.3.2	Stoffübertragung	84		
	5.4	Mode	llierung der Zündung und Verbrennung	85		
	5.5	Modellierung der Stickoxidbildung				
	5.6	Eckda	aten der durchgeführten Simulationen	90		
6	Res	ultate	und Diskussion	91		
	6.1	Home	ogene Kompressionszündung ohne Wassereinspritzung	92		
		6.1.1	Einspritzung des Kraftstoffs	92		
		6.1.2	Kalte Flamme und Übergangsbereich	95		
		6.1.3	Hauptwärmefreisetzung und Flammenausbreitungsme-			
			chanismen	98		
		6.1.4	Druckschwingungen	104		
	6.2	Reakt	ionskinetische Betrachtung der Wassereinspritzung	108		
	6.3	Getre	nnte Einspritzung von Kraftstoff und Wasser	117		

		6.3.1	Gemischbildung und Verbrennungsablauf	118
		6.3.2	Einfluss des Wassers auf die Rußkonzentration	125
		6.3.3	Einfluss des Wassers auf den Brennverlauf	130
		6.3.4	Einfluss des Wassers auf die Schadstoffemissionen	135
		6.3.5	Integrale Ergebnisse der Verdampfungs- und Verbren-	
			nungssimulation	141
		6.3.6	Ortsaufgelöste Analyse der Verdampfungs- und Verbren-	
			nungssimulation	147
	6.4	Krafts	toff-Wasser Emulsionen	156
		6.4.1	Gemischbildung und Verbrennungsablauf	156
		6.4.2	Einfluss des Wassergehaltes auf die Rußkonzentration	159
		6.4.3	Einfluss des Wassergehaltes auf den Brennverlauf	162
		6.4.4	Einfluss des Wassergehaltes auf die Schadstoffemissionen	164
		6.4.5	Integrale Ergebnisse der Verdampfungs- und Verbren-	
			nungssimulation	168
		6.4.6	Ortsaufgelöste Analyse der Verdampfungs- und Verbren-	
			nungssimulation	172
7	Zus	amme	nfassung	177
A	Anh	ang		182
	A.1	Chara	kteristische Kennzahlen	182
		A.1.1	Einspritzung und Zerstäubung	182
		A.1.2	Turbulente Skalen	183
	A.2	Gültig	keit der Siedepunkterniedrigung	185
	A.3	Druck	verlaufsanalyse	188
	A.4	Turbu	lente Flammengeschwindigkeit	190
	A.5	Stoffd	aten Kraftstoff, Wasser und Emulsion	192
Li	terat	urverz	eichnis	193

Nomenklatur

Lateinische Buchstaben

a	Schallgeschwindigkeit [m/s]
A	Oberfläche [m ²]
A1/A2	Konstanten [-]
B_q	Spaldingsche Wärmetransportzahl [-]
c_p	spezifische, isobare Wärmekapazität [J/(kg K)]
c_{v}	spezifische, isochore Wärmekapazität [J/(kg K)]
d	Tropfendurchmesser [m]
d_{32}	Sauterdurchmesser [m]
d_{opt}	optisch zugänglicher Kolbendurchmesser [m]
d_{Zyl}	Zylinderdurchmesser [m]
D	Lochdurchmesser Düse [m]
D_S	Minisacklochdurchmesser Düse [m]
D	Diffusionskoeffizient [m ² /s]
f	Frequenz [Hz]
h	Planck´sches Wirkungsquantum [J s]
H_u	unterer Heizwert [J/kg]
k	turbulente kinetische Energie [m²/s²]
k_f	Geschwindigkeitskoeffizient Vorwärtsreaktion [m ³ /(mol s)]
k_r	Geschwindigkeitskoeffizient Rückwärtsreaktion [m ³ /(mol s)]
k_W	Wellenzahl [1/m]
l	Länge [m]
l_K	Kolmogorov-Längenmaß [m]
l_I	Integrales Längenmaß [m]
L	Länge [m]

$L_{e,m}$	stoffliches Diffusionslängenmaß [m]
$L_{e,th}$	thermisches Diffusionslängenmaß [m]
L_G	Eindringtiefe [m]
'n	Verdampfungsmassenstromdichte [kg/(m ² s)]
m	Masse [kg]
\dot{M}	Verdampfungsmassenstrom [kg/s]
M	Molmasse [kg/kmol]
n	Polytropenexponent [-]
n	Anzahl [-]
n	Molmenge [mol]
n	Drehzahl [1/min]
n	Brechungsindex[-]
p	Druck [bar]
Q	Wärmemenge [J]
Ż	Wärmestrom [W]
r	Tropfenradius [m]
R	spezifische Gaskonstante [J/(mol K)]
R_m	allgemeine Gaskonstante [J/(mol K)]
S	Entropie [J/K]
t	Zeit [s]
T	Temperatur [K]
U	Geschwindigkeit [m/s]
u'	Geschwindigkeitsfluktuation [m/s]
U	innere Energie [J]
ÜP	Überlappungsparameter [-]
V	Volumen [m ³]
V_H	Hubraum [m ³]
V_c	kritisches Volumen [m ³ /kmol]
W_V	Volumenänderungsarbeit [J]
y^+	normierter Wandabstand [-]
Y	Massenbruch [-]
Ζ	Faktor [-]

Griechische Buchstaben

α	Wärmeübergangskoeffizient [W/(m ² K)]
Δ	Differenz [-]
Δh_f	Verdampfungsenthalpie [J/kg]
δ_l	laminare Flammendicke [m]
ϵ	Kompressionsverhältnis [-]
ϵ	turbulente Dissipationsrate [m ² /s ³]
κ	Isentropenkoeffizient [-]
γ	Massenstromdichteverhältnis [-]
χ	Molenbruch [-]
λ	Luftzahl [-]
λ	Wärmeleitfähigkeit [W/(m K)]
ω	Wassergehalt [-]
Ω	Wasser-Kraftstoff-Verhältnis [-]
Ω_{LJ}	Lennard-Jones-Potenzial [-]
η	dynamische Viskosität [-]
ϕ	equivalence ratio $(=1/\lambda)$ [-]
ψ	Spraykegelwinkel [°]
$\Psi_{SW,ges}$	Gesamtspraywinkel [°]
σ	Oberflächenspannung [N/m]
Q	Dichte [kg/m ³]
ν	kinematische Viskosität [-]
θ	Kurbelwinkel [°KW nOT]
τ	Zeitmaß [s]

Indices

0	Anfang
a	in Achsrichtung
Α	Ausbreitung
br	Aufbruch
С	Kompression

С	Chemisch
CJ	Chapman-Joguet
d	Tropfen
def	deflagrativ
diff	diffusiv
det	Detonation
D	Düse
EB	Einspritzbeginn
EHT	im Einhubtriebwerk
f	flüssig
ff	Flammenfront
g	Gas
ges	gesamt
H_2O	Wasser
i	Zähler
Ι	Integral
∞	Umgebung
Kr	Kraftstoff
KW	Kohlenwasserstoffe
l	laminar
lok	lokal
m	gemittelt
opt	optisch
part	Partial
r	in radialer Richtung
rel	relativ zur Umgebung
RM	im Realmotor
DDK	bei Zustand auf Dampfdruckkurve
sp	spontaneous propagation
t	turbulent
tang	tangential
Zelle	Zelle
Zentrum	Zellzentrum
Zyl	Zylinder

Abkürzungen

AGR	Abgasrückführung
CFD	Computational Fluid Dynamics
CN	Cetanzahl
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
NTC	Negative Temperature Coefficient
OT	Oberer Totpunkt
vOT	vor dem Oberen Totpunkt
nOT	nach dem Oberen Totpunkt
UT	Unterer Totpunkt

1 Einleitung

1.1 Motivation

Mobilität ist zu Beginn des 21. Jahrhunderts ein wesentlicher Bestandteil unseres Lebens. Immense Warenflüsse auf den verschiedenen Transportwegen sind für unsere Zeit ebenso kennzeichnend wie die vielfältigen Möglichkeiten individueller Mobilität eines jeden einzelnen. Um die Fortbewegung zu ermöglichen, erweist sich der Verbrennungsmotor als dominierendes Antriebsaggregat.

Die Ursachen der weiten Verbreitung des Verbrennungsmotors sind vielschichtig. In den Anfangsjahren förderte besonders seine hohe Leistungsdichte sowie hoher Bedienungskomfort seine Verbreitung und die Verdrängung von Dampfmaschinen. Brennstoffzellen wurden zwar schon vor dem Verbrennungsmotor entdeckt, konnten sich aber aufgrund der geringen Leistungen nicht durchsetzen und sind auch derzeit noch nicht wirtschaftlich und standfest im Fahrzeug einsetzbar. Gasturbinen haben den Verbrennungsmotor aufgrund ihrer Vorteile im Leistungsgewicht aus Luftfahrzeugen praktisch vollständig verdrängt, weisen jedoch ohne Zusatzmaßnahmen wie beispielsweise einem nachgeschalteten Dampfkreislauf in kombinierten Gas- und Dampfkraftwerken einen niedrigeren Wirkungsgrad auf. Der rein elektrische Antrieb ist durch unzulängliche elektrische Energiespeicher beschränkt. Aus diesen Gründen scheint der Verbrennungsmotor auch in Zukunft ein wichtiger Erzeuger mechanischer Arbeit in Fahrzeugen wie auch stationären Anwendungen zu bleiben.

Wesentliche Kritik gegenüber den Emissionen des Verbrennungsmotors kamen im 20. Jahrhundert durch die Probleme des Waldsterbens sowie des Smogs in Großstädten auf. Neben diesen lokal begrenzten Schädigungen der Umwelt stehen die klimawirksamen Emissionen, speziell Kohlendioxid, zunehmend im Blickfeld.

Neben der Maximierung von individuellen Vorteilen für den jeweiligen Nutzer erfordert die Sicherung eines nebenwirkungsarmen Motorbetriebes deshalb die Minimierung negativer Auswirkungen auf die Umwelt. Die Qualität eines Motors kann folglich nach dem Erfüllungsgrad folgender Ziele gemessen werden:

- 1. Effiziente Kraftstoffnutzung für einen wirtschaftlichen Betrieb sowie zur Schonung der Ressourcen und zur Reduzierung klimawirksamen Kohlendioxides
- 2. Minimale Emissionen an Partikeln, Kohlenmonoxid und Kohlenwasserstoffen aufgrund deren direktem Gefährdungspotential für Fauna, Flora und Menschen
- 3. Minimale Emissionen an Stickoxiden zur Reduzierung von Smog- und bodennaher Ozonbildung
- 4. Komfortwünsche des Kunden speziell hinsichtlich Geräuschemissionen und Leistungsentfaltung
- 5. Standfester und wartungsarmer Betrieb
- 6. Kundenakzeptabler Preis

In der Vergangenheit entwickelten sich aus diesen Zielen mit dem Ottomotor und dem Dieselmotor zwei Grundkonzepte. Die klassischen Vorzüge des Ottomotors sind dessen höherer Komfort sowie dessen günstigerer Preis in der Herstellung. Bei stöchiometrischem Kraftstoff-Luft-Verhältnis weist dieser in Kombination mit dem 3-Wege-Katalysator niedrige Partikel- und Stickoxid-Emissionen auf.

Wegen seiner effizienten Kraftstoffnutzung erfreut sich der Dieselmotor im Gütertransport und zunehmend auch im Personenkraftwagen großer Beliebtheit. Mit einem Oxidationskatalysator lassen sich bei ausreichender Katalysatortemperatur relativ einfach die Kohlenmonoxid- und die Kohlenwasserstoff-Emissionen auf ein niedriges Maß reduzieren.

Neben diesen Vorteilen weisen die beiden klassischen Motorkonzepte jedoch einige systemimmanente Nachteile auf. Konventionelle Ottomotoren sind über die zugeführte Menge des Brennstoff-Luftgemisches geregelt und haben dadurch bei Teillast aufgrund von Drosselverlusten einen schlechten Wirkungsgrad. Die Entdrosselung kann zwar den Wirkungsgrad verbessern, bedingt jedoch ohne Zusatzmaßnahmen, wie z.B. einem variablen Ventilhub, eine Laststeuerung mittels Anpassung des Kraftstoff-Luft-Verhältnisses. Ist dieses Verhältnis gering (Magerbetrieb) ergeben sich jedoch Schwierigkeiten bei der Flammenfortpflanzung und der klassische 3-Wege-Katalysator kann nicht sinnvoll eingesetzt werden, da die zugrundeliegende chemische Konvertierung nur bei nahstöchiometrischem Betrieb möglich ist. Aufgrund der hohen Rohemissionen auch im mageren Betrieb ist dann ein Oxidationskatalysator sowie eine nachmotorische NO_x-Reduktion nötig. Hierfür werden derzeit NO_x-Speicherkatalysatoren sowie die selektive katalytische Reduktion (engl. "selective catalytic reduction", kurz SCR) untersucht.

Der diffusiv abbrennende Spray im Dieselmotor verursacht aufgrund lokal fetter bzw. nahstöchiometrischer Bereiche auch bei niedriger Last NO_x - und Ruß-Emissionen. Die nachmotorische Behandlung erfordert hier für jede Emissionsart eine spezielle Maßnahme (Oxidationskatalysator, Rußpartikelfilter, NO_x -Reduktion mittels Speicherkatalysator oder SCR). Damit lassen sich bei betriebswarmem Motor die Emissionen deutlich reduzieren, doch weisen Teilsysteme bei niedrigen Temperaturen in der Aufheizphase oder im unteren Teillastbereich nur schlechte Umsatzgrade auf. An einem Rußpartikelfilter scheiden sich tendenziell größere Partikel ab, wohingegen gerade sehr kleine Partikel im Zentrum der Diskussion um Gesundheitsschäden stehen [MR01].

1.2 Konzept eines neuen Brennverfahrens

Aus obigen Gesichtspunkten lässt sich der Wunsch nach einem Motor ableiten, der die klassischen Vorteile von Otto- und Dieselmotor vereint. Hierfür werden seit den 1970er Jahren Brennverfahren untersucht, deren Basis die Selbstzündung einer intensiv vorgemischten Luft-Kraftstoffmischung darstellt (engl. "Homogeneous Charge Compression Ignition", kurz HCCI). Die Vermeidung von lokal hohen Brennraumtemperaturen, wie sie in der ottomotorischen Flammenfront oder den stöchiometrischen Zonen bei Diffusionsverbrennung im Dieselmotor vorliegen, reduzieren hierbei die thermisch gebildeten Stickoxide [Chr02]. Durch die Vormischung entfallen fette Zonen und ein partikelarmer Betrieb wird ermöglicht [MR01]. Findet der schnelle Kraftstoffumsatz zum richtigen Zeitpunkt kurz nach dem Oberen Totpunkt statt, so weist dieses Brennverfahren einen hohen thermodynamischen Wirkungsgrad auf [WRO⁺05]. Die vergleichsweise hohen Rohemissionen des Motors an Kohlenmonoxid und Kohlenwasserstoffen können mit einem Oxidationskatalysator deutlich reduziert werden, stellen aber bei Abgastemperaturen unterhalb der Anspringtemperatur des Oxidationskatalysators ("light-off") eine Herausforderung dar.

Neben diesen Vorteilen weist die homogene Selbstzündung jedoch zwei systemimmanente Nachteile auf:

- Ausgehend von akzeptablen Druckanstiegsraten bei niedriger Last ergibt sich mit zunehmender Last und damit einer Annäherung zur stöchiometrischen Verbrennung sowie höheren Drücken bei – üblicherweise– aufgeladenen Motoren eine Zunahme der kinetischen Umsatzraten. Die dadurch generierten Druckanstiegsraten sind aus Gründen des Komforts sowie der mechanischen Bauteilbelastungen problematisch und können in Folge zudem klopfähnliche Druckschwingungen auslösen. Aus diesem Grund wird die homogene Selbstzündung oftmals nur als Ergänzung eines konventionellen Brennverfahrens im Teillastbereich angesehen.
- Der zweite Nachteil ist die schwache Beeinflussbarkeit des Zündzeitpunktes nach dem Schließen der Ventile. Aufgrund der starken Tempera-

turabhängigkeit kann der Zündzeitpunkt abhängig vom Betriebszustand stark variieren. Bei einem an sich wirkungsgradgünstigen, hohen Verdichtungsverhältnis findet die Zündung aufgrund der hohen Kompressionstemperaturen zudem tendenziell zu früh statt. Dies zeigt sich speziell bei der Kombination mit einem zündwilligen Kraftstoff wie Diesel.

Wünschenswert ist die Nutzung der Vorteile des homogenen Brennverfahrens nicht nur in der Teillast, sondern auch bei hohen Lasten bzw. einer hohen Leistungsdichte. Zur Erreichung dieses Zieles wird in dieser Arbeit die Zugabe von Wasser und deren Auswirkungen untersucht.

1.3 Aufgabenstellung der Arbeit

Zunächst soll die homogene Kompressionszündung ohne Wassereinspritzung betrachtet werden, um ein Verständnis dieses Brennverfahrens bei einer Direkteinspritzung von Dieselkraftstoff zu erarbeiten. Als Randbedingung soll dabei ein hohes Verdichtungsverhältnis $\epsilon \approx 16$ dienen, welches einen hohen Wirkungsgrad verspricht, unter realen Einsatzbedingungen den Kaltstart vereinfacht sowie die Zündung bei niedrigen Umgebungstemperaturen gewährleistet. Es sollen die gesamten Prozesse vom Eindringen des Kraftstoffsprays über die Homogenisierung bis einschließlich Zündung und Verbrennung untersucht werden. Als Versuchsplattform wird das am Lehrstuhl für Thermodynamik entwickelte Einhubtriebwerk eingesetzt. Dieses eignet sich aufgrund mehrerer spezieller Eigenschaften, die in Kapitel 4 erklärt sind, sowie der guten optischen Zugänglichkeit gut für die Experimente dieser Art.

Auf Basis der homogenen Dieselverbrennung wird der Einfluss von zusätzlich eingebrachtem Wasser beobachtet und analysiert. Hierbei werden zwei grundsätzlich unterschiedliche Verfahren eingesetzt: zum einen die getrennte Einspritzung von Wasser mit einem zusätzlichen Injektor und zum anderen die externe Mischung von Kraftstoff und Wasser, die dann gemeinsam als Emulsion eingespritzt werden. Diese beiden Verfahren sollen hinsichtlich der folgenden Fragestellungen miteinander verglichen werden:

- Wie viel Wasser muss zugegeben werden, um die Hauptwärmefreisetzung ausgehend von einer frühen Zündung in den Bereich des Oberen Totpunktes zu verschieben?
- Können mit Wasserzugabe die hohen Druckanstiegsraten bei steigender Last abgemildert sowie Druckschwingungen vermieden werden?
- Lassen sich Stickoxid- und Rußbildung, die bei hoher Last auch bei der homogenen Dieselverbrennung auftreten, mit Wasserzugabe vermeiden oder zumindest deutlich reduzieren?
- Wie unterscheiden sich hierbei die beiden Möglichkeiten der getrennten Einspritzung von Wasser bzw. der Nutzung von Emulsionen?

Dabei kommt neben den geschilderten Experimenten am Einhubtriebwerk auch die numerische Simulation zum Einsatz. Während sich experimentell ein guter Eindruck der Strahlausbreitung gewinnen lässt, ist der anschließende Verdampfungsvorgang dagegen für eine quantitative Analyse unter den motorischen Bedingungen sehr aufwändig (Laser Induzierten Fluoreszenz des Kraftstoffs) oder fast unmöglich (räumliche Verteilung des Wassers). Hierfür stellen CFD-Programme ein sinnvolles Werkzeug dar, um mit einem angemessenen zeitlichen Aufwand aussagekräftige Lösungen zu erhalten und die Physik der Vorgänge besser zu verstehen.

Die Verdampfung einer Emulsion unterscheidet sich deutlich von Flüssigkeitsmischungen. Dieses Verhalten muss in der Simulation geeignet abgebildet werden. Die Simulation soll über die Verdampfung hinaus auch die Verbrennung bis hin zur Stickoxidbildung der beiden Wasserzugabeverfahren klären. Neben der Identifikation von heißen und damit tendenziell der Stickoxidbildung förderlichen Gebieten, steht die integrale Bestimmung dieses Schadstoffes im Vordergrund. Wie wir sehen werden, dominiert die Bildung der thermischen Stickoxidbildung aufgrund hoher verbrennungsbedingter Temperaturen, womit lokale Radikalkonzentrationen oberhalb des chemischen Gleichgewichtes in den Verbrennungszonen von untergeordneter Bedeutung sind. Da zudem die Konzentration der Stickoxide im Verhältnis zu Verbrennungsprodukten vergleichsweise gering ist, kann deren Berechnung in einem Nachbearbeitungsschritt gut abgeschätzt werden. Aus dieser Aufgabenstellung heraus gliedert sich die Arbeit in 7 Kapitel. Zunächst werden in Kapitel 2 die physikalischen und chemischen Grundlagen erläutert. Auf die Besonderheiten bei der Verdampfung einer Emulsion soll in Abschnitt 2.2 eingegangen werden. Aufgrund der Selbstzündvorgänge spielt die chemische Kinetik eine wichtige Rolle zum Verständnis der Arbeit und wird in Abschnitt 2.3 dargestellt. Im folgenden Kapitel 3 wird die historische Entwicklung sowie der aktuelle Stand der Technik bei der homogenen Kompressionszündung zusammengefasst. Kapitel 4 schildert das Einhubtriebwerk sowie die applizierte Messtechnik, die neben Standard-Messverfahren, z.B. Druckindizierung, optische sowie Abgas-Messverfahren umfasst. In Kapitel 5 werden die eingesetzten Modelle beschrieben, welche die Basis der numerischen Simulation bilden. Der Hauptteil der Arbeit ist in Kapitel 6 den Ergebnissen der experimentellen sowie numerischen Untersuchungen gewidmet. Diese werden durch 0-dimensionale Kinetikberechnungen ergänzt, wo diese dem grundlegenden Verständnis dienlich sind. Schließlich werden die Ergebnisse im letzten Kapitel 7 zusammengefasst.

2 Grundlagen

2.1 Einspritzung und Strahlausbreitung bei dieselmotorischen Drücken

Bei der Verbrennung nimmt die Art und Weise der Krafstoffaufbereitung eine zentrale Rolle ein. Das Ziel der Einspritzsystemgestaltung ist sowohl eine gewünschte Verteilung von flüssiger und dampfförmiger Phase zum Zündbeginn als auch während der weiteren Oxidation bereitzustellen. Beim konventionellen Dieselmotor wird dies derzeit fast ausschließlich durch Direkteinspritzung mittels Mehrlochdüsen gewährleistet. In weiten Bereichen hat sich dabei die Teilung von Druckerzeugung, Leitung und Verteilung mittels Common Rail sowie der Einspritzung mit elektrisch betätigten Ventilen durchgesetzt und wird auch in dieser Arbeit verwendet.

Bei der Einspritzung bestimmen die Fluideigenschaften, die Düsengeometrie und der Einspritzdruck die Charakteristik der Tröpfchenbildung und - bewegung. Zum einen muss hierbei Arbeit gegen die Oberflächenspannung und zum anderen kinetische Energie generiert werden. Dafür ist Energie nötig, die aus der potentiellen Energie des unter Hochdruck stehenden Kraftstoffs stammt. Um kleinere und schnellere Tröpfchen zu erzielen, kommt deshalb einem hohen Einspritzduck eine große Bedeutung zu.

Kategorisiert werden Flüssigkeitsstrahlen üblicherweise mittels 3 Kennzahlen [Bau06], der *Düsen-Ohnesorge-Zahl* Oh_D, der *Düsen-Reynolds-Zahl* Re_D sowie der *Gas-Weber-Zahl* We_g:

1. Die *Düsen-Ohnesorge-Zahl* Oh_D setzt die Fluideigenschaften der flüssigen Phase (dynamische Viskosität η_f , Dichte ρ_f , Oberflächenspannung σ) in Beziehung zum Düsendurchmesser *D*. Sie beschreibt damit das Verhältnis von Zähigkeits-, Oberflächen- sowie Trägheitskraft:

$$Oh_D = \frac{Z\ddot{a}higkeitskraft}{\sqrt{Oberfl\ddot{a}chenspannungskraft} \cdot Tr\ddot{a}gheitskraft} = \frac{\eta_f}{\sqrt{\rho_f \sigma D}} (2.1)$$

2. Die *Düsen-Reynolds-Zahl* Re_D setzt Trägheitskraft und Zähigkeitskraft ins Verhältnis, womit sich die Strömungsform (laminar / turbulent) in der Düse charakterisieren lässt:

$$\operatorname{Re}_{D} = \frac{\operatorname{Tr"agheitskraft}}{\operatorname{Z"ahigkeitskraft}} = \frac{u_{m} \cdot D \cdot \varrho_{f}}{\eta_{f}}$$
(2.2)

3. Die *Gasphasen-Weber-Zahl* We_g resultiert aus Trägheits- und Oberflächenspannungskraft bewegter Tröpfchen. Sie ist eine wichtige Kennzahl zur Charakterisierung der Tropfenstabilität:

We_g =
$$\frac{\text{Trägheitskraft}}{\text{Oberflächenspannungskraft}} = \frac{u_m^2 \cdot d \cdot \rho_g}{\sigma}$$
 (2.3)

Diese Kennzahlen lassen sich nun zur Abgrenzung von Regimes nutzen. Bild 2.1 zeigt das sogenannte Ohnesorge-Diagramm, in dem die Regimes für stationäre Strahlen eingezeichnet sind. Wie oben gezeigt, hängt die Ohnesorge-Zahl nur von Stoffwerten und der Geometrie ab und ändert sich für ein gegebenes Medium durch Einspritzdruckerhöhung nicht. Die Reynolds-Zahl dagegen erhöht sich durch die steigende mittlere Geschwindigkeit u_m und man bewegt sich bei Einspritzdruckerhöhung von links nach rechts durch das Kennfeld. Hierbei durchläuft man zunächst den nach Rayleigh benannten Bereich, in dem sich von einem zusammenhängenden Strahl am Düsenaustritt einzelne, große Tropfen ablösen. Dieser Bereich, der von Trägheit und Oberflächenkräften dominiert ist, wird auch als Zertropfen bezeichnet. Bei zunehmender Geschwindigkeit steigt die Relevanz der aerodynamischen Kräfte, welche schließlich dominieren (windinduzierter Zerfall, Zerwellen). Nun wird die Strömung in der Düse zunehmend turbulent. Bei einer üblichen, scharfen Fluidumlenkung sowie Beschleunigung im Einlauf von Düsen für Dieseleinspritzung kann der statische Druck unter den Sättigungsdampfdruck absinken und es kommt zu Kavitationserscheinungen.



Abbildung 2.1: Charakterisierung der Diesel- und Wassereinspritzung (Ohnesorge-Diagramm)

Turbulenz und Kavitation führen dann zumindest im Randbereich des Strahles zu einer Bildung von kleinen Tröpfchen ($d \ll D$) direkt am Düsenaustritt und man gelangt in das Regime des *Zerstäubens*. Die Massenstromdichte ist schließlich nach oben hin durch vollständige Kavitation im Düsenloch, dem sogenannten Durchkavitieren, begrenzt [KW03].

Die in Abbildung 2.1 eingezeichneten Wertebereiche für die Diesel- als auch die Wassereinspritzung dieser Arbeit zeigen, dass beide Einspritzungen in das Regime der Zerstäubung fallen.¹ Im Falle der Wassereinspritzung liegen die Kennzahlen dabei näher am Regime des Zerfalls, woraus geschlossen werden kann, dass Wasser tendenziell schwieriger zu zerstäuben ist.

Ob im Falle des Zerstäubens gemäß Abbildung 2.2 ein zusammenhängender Fluidstrahl, einzelne Fluidsträhnen (Ligamente) oder ein dichtes Tropfenfeld

¹Die Abschätzungen der Kennzahlen finden sich im Anhang A.1.1. Da die Abgrenzung der Regimes üblicherweise für dieselmotorische Bedingungen ermittelt wurden, sind die Linien im Bereich der Wassereinspritzung extrapoliert und deshalb nur gestrichelt angedeutet.

vorliegt, ist derzeit noch nicht eindeutig geklärt [Bau06]. Die Modelle hierzu sind vielfältig und lassen sich nach Fath [Fat97] in 6 Kategorien einteilen:

- a) Die primär durch Kavitationseinflüsse bedingte Zerteilung des Strahls führt schon in der Düse zu einem Tropfennebel.
- b) Tropfen lösen sich an der Oberfläche eines kegeligen, einphasigen Strahlkernes aerodynamisch ab.
- c) Einzelne Tropfen verlassen die Düse mit Düsendurchmesser und zerfallen aerodynamisch [RD87].
- d) Von einem welligen Strahlkern werden Segmente abgetrennt, die stromab weiter zerfallen.
- e) Der Strahlkern zerteilt sich in unzählige Flüssigkeitsfäden und zerfällt schließlich zu Tropfen.
- f) Der Strahlkern ist durch Kavitation zweiphasig und die kollabierenden Dampfblasen initiieren den Strahlzerfall im Düsennahbereich, wodurch der dichte Strahlkern in Ligamente zerteilt wird [Fat97]; größtenteils ist dies eine Kombination der Modelle a) und d).



Abbildung 2.2: Strahlzerfallsmodelle, aus Fath [Fat97]

Neuere Untersuchungen stützen die These, dass bei der dieselmotorischen Einspritzung am Düsenaustritt bereits eine Zweiphasenströmung vorliegt [Fat97]. Der Strahlkern scheint somit eher "dicht" zu sein, d.h. in Ligamente zerfallen oder von Gas- bzw. von Dampf-Blasen durchsetzt, als "intakt", d.h. einphasig und zusammenhängend. Bis zu demjenigen Abstand von der Düse, nach dem der dichte Strahlkern komplett zu einzelnen Tropfen zerfallen ist, spricht man vom Nahfeld,² stromab vom Fernfeld. Im Fernfeld geben die oft zitierten Korrelationen nach Hiroyasu [HA90] und Naber [NS96] die Eindringtiefe $L_G(t)$ von Sprays folgendermaßen an³:

$$L_G(t) = A1 \left(\frac{\Delta p}{\rho_g}\right)^{0.25} (D \cdot t)^{0.5} \quad \text{für } t > t_{\text{br}}$$
(2.4)

$$t_{br} = A2 \left(\rho_f \cdot D \right) \left(\rho_g \cdot \Delta p \right)^{-0.5}$$
(2.5)

- Δp : Druckdifferenz Rail Brennraum
- $\rho_{g/f}$: Dichte Gas/Kraftstoff
- A1, A2 : Konstanten
 - *t*_{br} : Zeit bis zum vollständigen Spray-Aufbruch

Die für hohe Gasdichten ermittelte Korrelation zeigt somit nach der Aufbruchzeit t_{br} bei zunehmender Gasdichte eine geringere Eindringtiefe. Die Strahlspitzengeschwindigkeit nimmt mit der Zeit (bzw. mit dem Abstand von der Düse) ab. Im Gegensatz zum Fernfeld wird während der Aufbruchphase oftmals eine lineare Eindringtiefe $L \sim t^1$ beobachtet.

Der Spraykegelwinkel ψ_G ist ein wichtiges Maß für den Lufteintrag in den Spray und hat demzufolge einen Einfluss auf die Tropfengeschwindigkeit, größe und -verdampfung. Neben dem Dichteverhältnis ρ_g/ρ_f hängt dieser von der Geometrie der Düse ab. Dies ist primär das Längen- zu Durchmesserverhältnis L/D [Ofn01], ferner aber auch die Düsenkonizität [SKB⁺03]. Nach Ausbildung eines stationären Sprays gibt die Gleichung nach Hiroyasu und Arai [HA90] den Spraykegelwinkel folgendermaßen wieder:

$$\psi_G = 83.5 \cdot \left(\frac{L}{D}\right)^{-0.22} \cdot \left(\frac{D}{D_S}\right)^{0.15} \cdot \left(\frac{\varrho_g}{\varrho_f}\right)^{0.26}.$$
(2.6)

²Bewegt man ein Drahtgitter entlang der Strahlachse, so stellt sich bis zu diesem Abstand zwischen der Düse und dem Gitter ein elektrischer Strom ein, wenn dazwischen eine Potentialdifferenz angelegt wird [HA90].

³Typische Dieseleinspritzkonfiguration: Einspritzdruck im Bereich mehrerer hundert bar, Mehrloch-Düsen, hohe Gasdichte entsprechend Kolbenposition um OT.

Diese in neueren Arbeiten auch für Common-Rail Diesel Injektoren bestätigte Korrelation [Ofn01] berücksichtigt zudem das Verhältnis von Düsenlochdurchmesser D zu Sacklochdurchmesser D_S .

2.2 Kraftstoff-Wasser-Emulsionen

Die Bedeutung von Emulsionen ist in vielen Bereichen unseres täglichen Lebens hoch. Emulsionen sind beispielsweise in der Lebensmittel- und Pharmatechnologie weit verbreitet, man denke nur an die vielfältigen Milchprodukte oder Cremes. Der Einsatz von Kraftstoff-Wasser-Emulsionen in Motoren wird zur Leistungssteigerung oder zur Senkung der Stickoxid- und/oder der Ruß-Emissionen seit vielen Dekaden untersucht und eingesetzt, siehe Literaturübersicht 3.3.

In dieser Arbeit sollen zwei Begriffe für die eingesetzte Wassermenge verwendet werden. Der *Wassergehalt* ω ist ein Synonym für den Massenbruch Y_{H_2O} des Wassers

$$\omega = Y_{H_2O} = \frac{m_{H_2O}}{m_{ges}} \tag{2.7}$$

und grenzt sich damit vom *Wasser-Kraftstoff-Verhältnis* Ω ab:

$$\Omega = \frac{m_{H_2O}}{m_{Kr}} = \frac{\omega}{1-\omega}.$$
(2.8)

Die untersuchten Emulsionen beruhen auf einer Basisemulsion der Fa. Lubrizol. Diese weist einen Wassergehalt von $\omega = 0,256$, entsprechend einem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis $\Omega = 0,34$ auf. Durch Kondensation von Wasserdampf in dieser Basisemulsion konnten Emulsionen mit einem höheren Wasseranteil bis zu $\Omega = 1,34$ generiert werden.

2.2.1 Aufbau und Eigenschaften von Emulsionen

Emulsionen zeichnen sich durch mindestens zwei flüssige Komponenten aus, die sich auf molekularer Ebene nicht vermischen und damit eine sogenannte *Mischungslücke* aufweisen. Die eine Phase bildet dabei eine Matrix aus, in der die andere Phase in Form von kleinen Tröpfchen dispergiert ist [LSZ97]. Durch die Lichtbrechung an den Phasengrenzen erscheinen Emulsionen üblicherweise milchig-opak. Grundsätzlich muss dabei zwischen dispergierten Öltröpfchen in einer Matrix aus Wasser (*Öl-in-Wasser-Emulsion O/W*) und dispergiertem Wasser in einer kontinuierlichen Ölphase (*Wasser-in-Öl-Emulsion W/O*) unterschieden werden. In dieser Arbeit kommen W/O-Emulsionen zum Einsatz, deren tribologischen Eigenschaften sich dem reinen Dieselkraftstoff annähern. Die maximale Tropfengröße der dispersen Phase der eingesetzten Emulsionen liegt im Bereich von 1 μ m [Pea06].

Die Herstellung von Emulsionen erfordert Arbeit zur Vergrößerung der Grenzfläche zwischen den Phasen. Technisch wird dies durch mechanische Arbeit bewerkstelligt, wobei diese üblicherweise durch Scherkräfte in Rührwerken zwischen den beiden Phasen aufgebracht wird. Die Tröpfchen haben das Bestreben, wieder zu koagulieren, was in stabilisierten Emulsionen durch den Einsatz von zusätzlichen Emulgatoren unterdrückt wird. Dies sind Moleküle mit jeweils einem hydrophilen und einem hydrophoben Ende, die als grenzflächenaktive Substanzen die Oberflächenspannung der dispergierten Phase reduzieren und somit Emulsionen über längere Zeiträume stabilisieren.

2.2.2 Tropfengröße bei Emulsionseinspritzung mit dieselmotorischen Einspritzdrücken

Aufgrund der inneren Phasengrenze zwischen Wasser und Kraftstoff ist die erzielte Tröpfchengröße bei der Zerstäubung unter dieselmotorischen Randbedingungen nicht direkt erschließbar. Deshalb wurde die Tröpfchengröße experimentell bestimmt. Hierfür wurden die 3 Medien Kraftstoff, Wasser und Emulsion getrennt bei einem Raildruck von p_{Rail} = 800 bar in einer atmosphärischen Umgebung zerstäubt.

Als Messsystem wurde ein Partikelgrößenmessgerät der Firma Malvern eingesetzt. Es beruht auf der Beugung eines Laserstrahles an Partikeln oder Tropfen durch Mie-Streuung.⁴ Die Messungen liefern absolute Werte des Tropfen-

⁴Die physikalischen Grundlagen des Messprinzips können der Arbeit von Grünwald [Grü07] entnommen werden.

durchmessers für ein Tropfenensemble, woraus sich charakteristische Tropfengrößen ermitteln lassen. Setzt man die gemessene Anzahl n_i jeder Tropfengröße d_i folgendermaßen ins Verhältnis:

$$d_{32} = \frac{\sum_{i} n_i \cdot d_i^3}{\sum_{i} n_i \cdot d_i^2} \quad , \tag{2.9}$$

so erhält man den Durchmesser d_{32} . Diese als Sauterdurchmesser⁵ bezeichnete Größe ist als repräsentatives Maß für das Volumen- zu Oberflächenverhältnis eine wichtige Kenngröße für Wärme- und Stoffübertragungsvorgänge.



Abbildung 2.3: Experiment: Bestimmung der Tropfengröße

Abbildung 2.3 zeigt die über mehrere Messungen gemittelten Werte für Kraftstoff, Wasser und Emulsion. Mit einem Wert von $d_{32} \approx 9\mu$ m sind die Dieseltröpfchen am kleinsten. Die reinen Wassertröpfchen sind mit $d_{32} \approx 13\mu$ m etwa 45% größer. Die Abschätzung von Hiroyasu und Arai [HA90]

$$d_{32} \sim v_f^{0,12} \cdot \rho_f^{-0,1} \cdot \sigma^{0,32} \tag{2.10}$$

liefert mit den Stoffwerten von Wasser und Diesel aus Anhang A.5 ebenfalls für Wasser größere Tröpfchen, jedoch lediglich einen um etwa 15% höheren Sauterdurchmesser.

Die Tröpfchengröße der Emulsion ergibt sich im Experiment zwischen den beiden Werten für Wasser und Kraftstoff. Wie im vorigen Abschnitt aufgeführt, beträgt die Tropfengröße der dispersen Phase in der Emulsion maximal etwa

⁵Es sei angemerkt, dass neben dieser Definition der Sauterdurchmesser auch direkt über gleiches Volumenzu Oberflächenverhältnis definiert werden kann: $d_{32,VO} = \frac{\sum_i n_i \cdot V_i}{\sum_i n_i \cdot A_i} = \frac{\sum_i n_i \cdot \pi/6 \cdot d_i^3}{\sum_i n_i \cdot \pi/d_i^2} = \frac{1}{6} \frac{\sum_i n_i \cdot d_i^3}{\sum_i n_i \cdot d_i^2}.$

 $1 \ \mu m$ und liegt damit mindestens eine Größenordnung unterhalb des Sauterdurchmessers der zerstäubten Tropfen. Deshalb kann auch für die zerstäubten Tropfen angenommen werden, dass diese sich aus beiden Phasen zusammensetzen und nicht etwa reine Diesel- oder Wassertropfen darstellen.

2.2.3 Verdampfungsverhalten von Kraftstoff-Wasser-Emulsionen

Emulsionen weisen aufgrund der Mischungslücke ein besonderes Verdampfungsverhalten auf, welches wesentlich von Mischungen, wie beispielsweise reinem Dieselkraftstoff, abweicht. Durch die Mischungslücke ergibt sich eine *Siedepunkterniedrigung*, d.h. die Siedetemperatur des Gemisches ist bei einem gegebenen Druck sogar niedriger als die Siedetemperatur der niedriger siedenden Phase. Dieses Verhalten machte man sich früher in der Verfahrenstechnik vielfach als sogenannte Wasserdampfdestillation zu nutze, indem eine Wasserzugabe den Siedepunkt von schwersiedenden organischen Substanzen effektiv herabsetzt. Die Ursache hierfür ist, dass an der Flüssigkeitsoberfläche nicht nur der Partialdruck der niedriger siedenden Phase anliegt, sondern zudem das höhersiedende Fluid einen Partialdruckanteil beisteuert. Eine Abschätzung der Gültigkeit dieser Annahme für Emulsionstropfen, die in den Brennraum eingedüst werden, findet sich im Anhang A.2.

In diesem Abschnitt soll zum leichteren Verständnis der Fall des *Siedens* der Emulsion betrachtet werden. Dieser tritt dann auf, wenn die Emulsion ohne die Anwesenheit eines weiteren Fluides *verdampft* wird; der Gesamt-Partialdruck der Dämpfe $p_{DDK,ges}$ entspricht in diesem Falle dem anliegenden Gesamtdruck $p_{ges} = p_{DDK,ges}$. Sind zusätzliche Gase vorhanden, wie bei der Einspritzung einer Emulsion in den Brennraum, so reduzieren diese den Dampfdruck auch an der Tropfenoberfläche: $p_{DDK,ges} < p_{ges}$. Diese Tropfen*verdunstung* findet dann nicht bei der Siedetemperatur, sondern der niedrigeren Kühlgrenztemperatur statt, welche sich aus dem parallelen Wärme-und Stoffübergang am Tropfen ergibt. Dies wird bei der Modellierung der Emulsionsverdampfung, Abschnitt 5.3, vertieft werden.

Zusammensetzung des Dampfes

Der Siedepunkt sowie das Verhältnis der Partialdrücke kann anhand von Abbildung 2.4 ermittelt werden. In dieser Dampfdrucktafel sieht man 3 verschiedene Arten von Graphen, die nach folgender Reihenfolge nummeriert sind:

- 1. Die Dampfdruckkurven der reinen Kohlenwasserstoffe.
- 2. Die Dampfdruckkurve von reinem Wasser.
- 3. Die Differenzdruckkurven von reinem Wasser zu ausgesuchten Gesamtdampfdrücken, hier aufgetragen für $p_{ges} = 1$ bar sowie $p_{ges} = 10$ bar.



Abbildung 2.4: *Dampfdrucktafel nach Cox, aus [GHK*⁺62]

Bei einem gegebenen Gesamtdampfdruck p_{ges} liefert der Schnittpunkt zwischen der Dampfdruckkurve (1) und der Wasser-Differenzdruckkurve (3) die Siedetemperatur sowie die molare Dampfzusammensetzung einer siedenden Emulsion. Bildet man z.B. eine Emulsion aus Hexan C₆H₁₄ und Wasser, so ist ersichtlich, dass diese bei einem Druck von 1 bar bei etwa 60°C siedet. Der Dampf besteht dabei aus ca. 20Mol-% Wasser sowie ca. 80Mol-% Hexan. Solange die Partialdrücke sich gegenseitig beeinflussen, siehe Abschätzung im Anhang A.2, ist diese Zusammensetzung des Dampfes unabhängig von den jeweiligen Flüssig-Anteilen an Wasser und Kohlenwasserstoff.

Für Dieselkraftstoff ist das Verhalten komplexer, da dieser eine Mischung aus Kohlenwasserstoffen darstellt und somit bei einem gegebenen Druck keine konstante Siedetemperatur, sondern eine Siedekurve aufweist. Die Zusammensetzung des Destillates lässt sich damit nicht mit obigem Verfahren direkt aus der Dampfdrucktafel ermitteln, sondern wurde mit Hilfe einer Destillation quantifiziert. Hierzu wurde die Basisemulsion unter atmosphärischem Druck von 952 mbar erwärmt. Reines Wasser würde bei diesem Druck bei 98,2°C sieden [Nat], die Siedetemperatur der Emulsion dagegen wurde bei einer Temperatur von 98,5°C beobachtet und steht damit im Kontrast zur oben diskutierten Siedepunkterniedrigung. Dies erklärt sich durch die nicht vollständig vorhandene Mischungslücke zwischen den beteiligten Substanzen. Die Löslichkeit des Emulgators im Wasser erhöht zunächst dessen Siedetemperatur. Der zusätzlich vorhandene Kraftstoff wiederum erniedrigt durch seinen Partialdruckanteil die Siedetemperatur der Emulsion, womit sich schließlich die gemessene Siedetemperatur einstellt.

Wie aufgeführt entspricht die molare Zusammensetzung des Dampfes den Partialdrücken von Wasser/Emulgator und den verdampften Kraftstoffanteilen. Dies spiegelt sich in der 2-phasigen Zusammensetzung des Destillates wider, dessen Massenanteil Wasser $Y_{H_2O} = 66\%$ durch Dekantieren leicht abgeschieden werden konnte. Daraus lässt sich über die Annahme einer mittleren Molmasse der Kohlenwasserstoffe von $M_{KW} = 150$ g/mol der Molanteil des Wassers zu $\chi_{H_2O} = 94\%$ bestimmen:

$$\chi_{H_2O} = \frac{n_{H_2O}}{n_{ges}} = \frac{Y_{H_2O} \cdot M_{KW}}{M_{H_2O} \cdot (1 - Y_{H_2O}) + Y_{H_2O} \cdot M_{KW}}$$
(2.11)

$$= \frac{0,66 \cdot 150}{18 \cdot (1-0,66) + 0,66 \cdot 150} \approx 0,94 [-]$$

Der Partialdruck des Kohlenwasserstoffanteiles liegt somit bei

$$p_{KW} = (1 - 0, 94) \cdot 952 \text{ mbar} \approx 60 \text{ [mbar]}.$$
 (2.12)

Dieser Partialdruck entspricht bei der Temperatur von 98,5°C nach Abbildung 2.4 etwa dem Dampfdruck von Undecan $C_{11}H_{24}$. Näherungsweise kann angenommen werden, dass die Zusammensetzung des Dampfes – und somit nach dessen Kondensation auch des entstehenden Destillates – bis zum vollständigen Verdampfen des Wassers konstant bleibt. Die Emulsion verliert dadurch anteilsmäßig immer mehr Wasser bis schließlich nur noch ein Kohlenwasserstoffrest übrig bleibt. Dieser verdampft dann entlang seiner Siedelinie.

Diese Verdampfungscharakteristik lässt sich auf Emulsionströpfchen übertragen, die in den Brennraum eingespritzt werden.⁶ Hier ist der Druck höher als im oben geschilderten Destillationsexperiment und beträgt bei frühen Einspritzungen etwa $p_{\infty} = 10$ bar. Vergleicht man Wasser und das als Referenz dienende Undecan bei diesem Umgebungsdruck, so ist in Abbildung 2.4 ein ähnliches Verhältnis der Dampfdrücke von etwa $p_{C_{11}H_{24}} \approx 0.8$ bar zu $p_{H_2O} \approx 9,2$ bar ersichtlich. Es stellt sich also auch bei diesem höheren Druck etwa ein molares Verhältnis der abdampfenden Ströme von 1:10 ein, was obigem Massenverhältnis von etwa 2:1 entspricht.

Da Tröpfchen einer Emulsion zunächst mehr Wasser als Kraftstoff abdampfen, liefert eine Emulsion somit keine perfekte Deckung von Wasser- und Kraftstoffverteilung im Brennraum, sondern gerade bei frühen Einspritzungen tendenziell mehr Wasser in Injektornähe und mehr Kraftstoff in entfernteren Gebieten.⁷ Die in vielen Publikationen angenommene Gleichverteilung der Medien (z.B. durch Born [Bor01]) stellt aufgrund dieser Überlegungen bei frühen Einspritzungen – wie in dieser Arbeit – keine sinnvolle Näherung dar.

⁶Wie im gesamten Abschnitt soll auch hier Sieden angenommen werden. Dabei liegt an der Tropfenoberfläche keine Luft, sondern nur Dampf vor.

⁷Aufgrund konvektiver Bewegungen der Brennraumgase können diese Bereiche gerade bei frühen Einspritzungen bis zum Zündbeginn noch deutlich verlagert oder auch gemischt werden, siehe Kapitel 6.

2.3 Chemische Kinetik

Seit den ersten optischen Untersuchungen zur homogenen Kompressionszündung durch Onishi [OJS⁺79] ist bekannt, dass sich die Verbrennung deutlich von einer turbulenten Flammenausbreitung im Ottomotor oder der Diffusionsflamme im Dieselmotor unterscheidet. Vielmehr kann ein feines Muster an Dichtegradienten in Schlieren- oder Schattenaufnahmen wie auch in dieser Arbeit, beispielsweise in Abschnitt 6.1, beobachtet werden. Dies ist durch Gradienten der Temperatur – beispielsweise durch die äußere Berandung – oder der Konzentration an Kraftstoff durch eine endliche Mischdauer begründet, die in technischen Anlagen nie zu vermeiden sind. Sind diese Gradienten nicht derart groß, dass an verschiedenen Orten gleichzeitig frühe und späte Phasen der Oxidation auftreten, so zeigt sich im integralen Druckverlauf eine mittels chemischer Kinetik begründete ein- oder mehrstufige Entflammung. Deren kinetische Ursachen sollen in diesem Abschnitt herausgearbeitet werden. Zunächst wird die Oxidation abstrahiert an einem gradientenlosen Feld, dem homogenen Reaktor, aufgezeigt. Anschließend werden die durch zündzeitbeeinflussende Gradienten hervorgerufenen Effekte beleuchtet.

Allgemein lässt sich die Zeitspanne zwischen Beginn der Kraftstoffeinbringung und der Entflammung in zwei Zeitbereiche aufteilen, die sich in Realität räumlich wie zeitlich überschneiden: Nach der Einbringung des flüssigen Kraftstoffs ist es für die Reaktion mit Sauerstoff zunächst nötig, diesen zu erwärmen, verdampfen und zumindest teilweise mit Sauerstoff zu mischen (*physikalische Zündverzugszeit*). Wie wir sehen werden, reagiert diese Mischung nicht instantan zu den Endprodukten, sondern durchläuft eine Kette an Reaktionen. Hierdurch ergibt sich eine zweite Zeitspanne bis zum Beginn einer merklichen Vor- bzw. Hauptwärmefreisetzung, die *chemische Zündverzugszeit*⁸. Falls nicht anders erwähnt, soll ab hier als *Zündverzugszeit* die gesamte Zeitspanne von Einspritzbeginn bis zum Beginn der Hauptwärmefreisetzung verstanden werden.

⁸In Kinetikprogrammen lässt sich der chemische Zündverzug einfach und völlig getrennt vom phsikalischen Zündverzug untersuchen, indem eine instantane homogene Mischung von Kraftstoff und Oxidator erzeugt wird, die anschließend chemisch reagiert.

Zur Analyse von chemischen Vorgängen in homogenen Reaktoren wird in dieser Arbeit die Simulationsplattform CANTERA [Can] eingesetzt. Damit lässt sich die Kompression der Ladung anhand eines charakteristischen Hubverlaufes des in Abschnitt 4 beschriebenen Einhubtriebwerkes nachbilden. Für die hier dargestellten Ergebnisse wird eine Ladung mit Anfangsdruck $p_0 =$ 1,2 bar und Anfangstemperatur $T_0 = 373$ K um das Kompressionsverhältnis $\epsilon = 16$ adiabat komprimiert. Als Referenzkraftstoff wird n-Heptan eingesetzt, welcher mit einer Cetanzahl von CN = 56 ein vergleichbares Zündverhalten zu herkömmlichem Dieselkraftstoff nach EN 590 (CN > 51) aufweist. Der verwendete, detaillierte Reaktionsmechanismus wurde am Lawrence Livermore National Laboratory [CGPW98] entwickelt und umfasst eine Anzahl von 4383 Elementarreaktionen sowie 544 Spezies.

Zum grundlegenden Verständnis sei vor dem Einstieg in die komplexe Kinetik dieselartiger Kraftstoffe kurz eine einfache Reaktion zweier beliebiger Edukte, z.B. X₂ und Y zum Produkt XY betrachtet:

$$X_2 + 2 \cdot Y \to 2 \cdot XY \tag{2.13}$$

Wie schnell diese Reaktion abläuft, wird durch die – zeitlich veränderlichen – Konzentrationen mit der Einheit [mol/m³] der beiden Edukte sowie dem temperaturabhängigen Geschwindigkeitskoeffizienten $k_f(T)$ bestimmt:

$$\frac{\mathrm{d}[\mathrm{XY}]}{\mathrm{d}t} = k_f(T) \cdot [\mathrm{X}_2] \cdot [\mathrm{Y}]^2 \tag{2.14}$$

Dieser Geschwindigkeitskoeffizient $k_f(T)$ kann dabei für viele Reaktionen⁹ gemäß dem Ansatz nach Arrhenius angegeben werden:

$$k_f(T) = A \cdot T^b \cdot e^{-\frac{E_A}{R_m \cdot T}}$$
(2.15)

Neben der allgemeinen Gaskonstanten R_m sind somit zur Bestimmung der chemischen Umsatzraten 3 Größen erforderlich, die für die Elementarreaktionen entweder gemessen, berechnet oder empirisch bestimmt wurden und den wesentlichen Inhalt von Reaktionsschemata darstellen. Dies sind der präexponentielle Faktor *A*, die Aktivierungsenergie E_A , die als Energieschwelle

⁹Ausnahme sind beispielsweise unimolekulare Reaktionen, die bei der Dissoziation von Wasser zu berücksichtigen sind, siehe Abschnitt 6.2.
zur Ingangsetzung der Reaktion angesehen werden kann, und der Temperaturexponent *b*.

In Realität treten neben der gezeigten Vorwärtsreaktion stets auch die Rückreaktion der Produkte zu den Edukten auf. Im *chemischen Gleichgewicht* sind die Geschwindigkeitskoeffizienten in Vorwärts-Richtung k_f und Rückwärts-Richtung k_r identisch; im allgemeinen Falle lassen sich diese Raten über die chemische Gleichgewichtskonstante K_c koppeln:

$$K_c(T) = \frac{k_f(T)}{k_r(T)}$$
 (2.16)

Im chemischen Gleichgewicht sind die einzelnen Molmengen n der Spezies i derart proportioniert, dass die Summe der einzelnen Speziesentropien s im adiabaten Fall eine maximale Entropie S_{ges} des Gesamtsystemes liefert:

$$S_{ges} = \sum_{i} n_i \cdot s_i(T, p_i) \rightarrow \max.$$
 (2.17)

In Realität stehen hierfür sämtliche chemisch existente Spezies zur Verfügung. Bei einer Berechnung wird dagegen die Anzahl der Spezies auf ein sinnvolles Maß beschränkt, wofür beispielsweise der Speziesumfang eines Reaktionsmechanismus zugrundeliegen kann.¹⁰ Anschließend lässt sich aus der Zusammensetzung im Gleichgewicht sowie der Stoffwerte der Spezies die Gleichgewichtskonstante und über Gleichung 2.16 in Folge der Geschwindigkeitskoeffizient der Rückreaktion k_r bestimmen, siehe hierzu auch [Tur00] und [Pös06].

Nach der Darstellung einfacher chemischer Reaktionen soll nun die komplexere Situation bei der Oxidation langkettiger Kohlenwasserstoffe untersucht werden.

2.3.1 Zündung und Verbrennung dieselartiger Kraftstoffe

Herkömmlicher Dieselkraftstoff besteht aus einem Gemisch von langkettigen Kohlenwasserstoffen. Die Beschreibung deren Oxidation kann auf verschiedenen Abstraktionsebenen betrachtet werden. Den höchsten Abstraktionsgrad

¹⁰In diesem Fall kann es bei der Berechnung mittels reduzierten Mechanismen mit eingeschränkter Speziesanzahl zu leichten Abweichungen von detaillierten Mechanismen kommen.

für einen repräsentativen Kohlenwasserstoff stellt die *Globalreaktion* dar. Sie liefert beispielsweise eine Aussage, wie viel Sauerstoff bzw. Luft zur vollständigen Oxidation zu Kohlendioxid CO₂ und Wasser H₂O mindestens nötig ist:

$$C_{n}H_{m} + \lambda \left(n + \frac{m}{4}\right) \left[O_{2} + \frac{79}{21}N_{2}\right]$$

$$\rightarrow nCO_{2} + \frac{m}{2}H_{2}O + \left(\frac{79}{21}N_{2}\right) + (\lambda - 1)\left(n + \frac{m}{4}\right) \left[O_{2} + \frac{79}{21}N_{2}\right] \quad (2.18)$$

Hieraus lässt sich durch Einsetzen der molaren Massen die Massenbilanz ableiten, welche beispielsweise für n-Heptan C_7H_{16} lautet:

$$1 \cdot 100 + 11\lambda \qquad \left(1 \cdot 32 + \frac{79}{21} \cdot 28\right) \rightarrow \\7 \cdot 44 + 8 \cdot 18 + 11\lambda \frac{79}{21} \cdot 28 + 11(\lambda - 1) \cdot 32 \quad [g] \qquad (2.19)$$

Die hierbei verwendete Luftzahl λ , der Kehrwert des in der angelsächsischen Literatur üblicherweise verwendeten "equivalence ratio ϕ ", ist das Verhältnis der tatsächlichen zur stöchiometrisch benötigten Luftmenge.

In Realität verläuft die Oxidation nicht direkt, sondern über sehr viele Zwischenschritte ab, die als *Elementarreaktionen* bezeichnet werden. Die Kenntnis der wesentlichen Zwischenschritte und -spezies ist für den Ablauf und das Verständnis der homogenen Kompressionszündung essentiell, da deren grundsätzliche Schwierigkeiten in der Steuerung des Brennbeginnes und des anschließenden Wärmefreisetzungsverlaufes liegen. Zahlreiche experimentelle und theoretische Untersuchungen haben sich mit der Selbstzündung von vorgemischten Ladungen beschäftigt. Für langkettige, gesättigte Kohlenwasserstoffe wird hierbei ein zweistufiges Wärmefreisetzungsverhalten beobachtet, welches sich in eine Niedertemperatur- und eine Hochtemperatur-Oxidation unterteilen lässt.

Niedertemperatur-Oxidation

Die Niedertemperatur-Oxidation ist für die motorische Verbrennung bedeutend, da die Ladung aufgrund der Kompression den hierfür charakteristischen Temperaturbereich 800K...900K durchläuft und die dabei gebildeten Spezies sowie die freigesetzte Energie intensiven Einfluss auf die weitere Verbrennung haben [WMD01].

Der einleitende Schritt für die Oxidationskette ist die Abstraktion eines H-Atomes von den mit RH bezeichneten Kohlenwasserstoffen unter Bildung eines Kohlenwasserstoffradikales R^{•11}:

$$\mathrm{RH} + \mathrm{O}_2 \to \mathrm{R}^{\bullet} + \mathrm{HO}_2^{\bullet} \tag{2.20}$$

In einem Kettenfortsetzungsschritt werden durch Anlagerung von Sauerstoff Peroxyradikale ROO[•] gebildet:

$$\mathbf{R}^{\bullet} + \mathbf{O}_2 \leftrightarrow \mathbf{ROO}^{\bullet} \tag{2.21}$$

Abbildung 2.5: Beispiel einer internen Wasserstoffumlagerung nach [CGPW98]

Eine molekülinterne Umlagerung eines Wasserstoffatomes (siehe Abbildung 2.5) verlagert die Position der freien Valenz vom Sauerstoff- hin zu einem Kohlenstoffatom. An dieses Kohlenstoffatom lagert sich in kurzen Zeitskalen ein weiteres Sauerstoffmolekül an:

$$ROO^{\bullet} \rightarrow R^{\bullet}OOH$$
 (2.22)

$$R^{\bullet}OOH + O_2 \rightarrow {}^{\bullet}OOROOH$$
 (2.23)

Die freie Valenz dieses zweifach mit Sauerstoff angereicherten Moleküles kann durch Umlagerung eines externen Wasserstoffatomes von einem Kraftstoffmolekül RH gebunden werden. Durch Abspaltung eines OH[•]-Moleküles wird dann eine Kettenverzweigung und somit eine Erhöhung der Anzahl reaktiver Moleküle eingeleitet:

$$OOROOH + RH \rightarrow HO_2RO_2H + R^{\bullet}$$
(2.24)

$$\mathrm{HO}_2\mathrm{RO}_2\mathrm{H} \to \mathrm{HO}_2\mathrm{RO}^{\bullet} + \mathrm{OH}^{\bullet} \tag{2.25}$$

¹¹Radikale seien mit dem Punkt • gekennzeichnet, wobei die Position des Zeichens die Position der fehlenden Bindung widerspiegelt.

Diese Verzweigung führt in Folge zu einer teilweisen Zersetzung der langkettigen Kohlenwasserstoffe und in geringen Mengen zur Bildung von Kohlendioxid und Wasser, womit eine erste Erhöhung der Temperatur und des Druckes im Brennraum verbunden ist. Diese Phase wird als *Kalte Flamme* (engl. cool flame) bezeichnet, deren Oxidationsschema in Abbildung 2.6 gezeigt ist.



Abbildung 2.6: Oxidationsschema der Niedertemperatur-Entflammung, Zahlenwerte entsprechen Reaktionsraten [mol/(m³s)]

Bei üblichen motorischen Bedingungen und Kraftstoffen endet diese erste Kettenverzweigung jedoch überraschenderweise, da eben diese Temperaturerhöhung zu Bedingungen führt, die zunächst die weitere Oxidation verhindern. Als Ursachen werden hierfür verschiedene Gründe genannt: Warnatz et al. [WMD01] geht davon aus, dass die Rückreaktion von Reaktion 2.23 mit zunehmender Temperatur die Vorwärtsreaktion dominiert und somit das in der Reaktionskette wichtige Molekül •OOROOH wieder in seine Edukten zerfällt. Im Mechanismus von Tanaka et al. [TAKH03] wird daneben noch der Übergang von $R^{\bullet}OOH$ -Radikalen zu stabileren Olefinen als wesentlicher Faktor für den Kettenabbruch und damit die Zweistufenzündung genannt. Neben der Bildung von Olefinen nennt Griffiths et al. [GW02] noch die Bindung von OH[•]-Radikalen zu weniger reaktiven HO[•]₂ und H₂O₂-Molekülen.

Hochtemperatur-Oxidation

Nach dem Abbruch der Kettenverzweigungen in der Niedertemperaturoxidation ergibt sich durch die Reaktionen in einer Zwischenphase keine integrale Wärmefreisetzung. Beim erneuten Zünden nimmt das HO_2^{\bullet} -Radikal eine wichtige Rolle ein, da es die Radikalbildung von Kraftstoffmolekülen ermöglicht. Zudem erhöht die Zersetzung von Wasserstoffperoxid H_2O_2 massiv die OH[•]-Radikalkonzentration:

$$\mathrm{HO}_{2}^{\bullet} + \mathrm{RH} \rightarrow \mathrm{H}_{2}\mathrm{O}_{2} + \mathrm{R}^{\bullet}$$
 (2.26)

$$H_2O_2 + M \rightarrow OH^{\bullet} + OH^{\bullet} + M$$
 (2.27)

Die freie Valenz des Alkylradikales R[•] führt zu einer Stärkung der direkt benachbarten und einer Schwächung der dahinterliegenden Bindung. Die damit eingeleitete β -Spaltung (siehe Abbildung 2.7) ist ein wichtiger Hochtemperaturschritt zur Zersetzung der langkettigen Kohlenwasserstoffe.



Abbildung 2.7: Zersetzung durch β -Spaltung (nach [Tur00])

Während die Spaltungen der langen Kohlenwasserstoffketten zunächst endotherme Reaktionen darstellen, wird schließlich durch die Aufoxidation der entstehenden kurzkettigen Moleküle, über die Zwischenspezies Kohlenmonoxid hin zum Kohlendioxid, massiv Energie freigesetzt.

Die Zweistufenzündung ist ein wichtiges Phänomen bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen und beeinflusst beispielsweise entscheidend die klopfende Verbrennung bei einem konventionellen Ottomotor [WMD01], [Pös06]. Sie ist auch der Grund für die Ausbildung des sogenannten "*N*egative *T*emperature *C*oefficient" *NTC* bei der Einspritzung von Dieselkraftstoff in eine heiße Atmosphäre. Hier kann mit einer Umgebungstemperaturerhöhung bei niedriger und hoher Umgebungstemperatur eine abnehmende, in einem mittleren Temperaturbereich jedoch eine zunehmende Zündverzugszeit beobachtet werden.



Abbildung 2.8: Temperatur- und Druckverlauf bei Kompression und Verbrennung einer homogenen Ladung ($\lambda = 2,0$; $\epsilon = 16$; $p_0 = 1,2$ bar; $T_0 = 390$ K; Berechnung analog Abschnitt 6.2)



Abbildung 2.9: Speziesverläufe bei Kompression und Verbrennung einer homogenen Ladung ($\lambda = 2,0$; $\epsilon = 16$; $p_0 = 1,2$ bar; $T_0 = 390$ K; Berechnung analog Abschnitt 6.2)

Bei der Kompressionszündung einer homogenen Ladung ergibt sich ein zeitlich versetztes Durchlaufen von Niedertemperatur- und Hochtemperaturkinetik. Im Temperatur- und Druckverlauf von Abbildung 2.8 sind deutlich die beiden Wärmefreisetzungsstufen ersichtlich. In Abbildung 2.9 sind einige wichtige Speziesverläufe abgebildet. Es ist hierbei ersichtlich, dass mit dem zugrundeliegenden Reaktionsmechanismus der Kraftstoff in der Phase der Kalten Flamme schon zu einem Großteil in Zwischenspezies wie z.B. Formaldehyd CH₂O umgewandelt wird. Wie die Konzentration an Wasser zeigt, findet die vollständige Aufoxidation primär in der Hauptwärmefreisetzung statt.

2.4 Schadstoffentstehung

Wie anhand der Globalreaktion 2.18 im vorigen Abschnitt aufgezeigt wurde, produziert eine ideale Verbrennung unter Luftüberschuss als unerwünschte Substanz lediglich Kohlendioxid. Aufgrund der Klimawirksamkeit dieses Gases rückt dessen Minimierung immer mehr in den Blickpunkt der Verbrennungsforschung. Es gefährdet dagegen Fauna und Flora nicht direkt und soll deshalb hier nicht als Schadstoff betrachtet werden. Im Gegensatz dazu stellen Stickoxide, Kohlenmonoxid sowie Ruß eine direkte Bedrohung für die Gesundheit dar. Deren Entstehungsmechanismus soll im Folgenden beschrieben werden. Eine weitere Vertiefung kann anhand der einschlägigen Literatur (z.B. [Tur00], [Hey88]) geschehen.

Die letzte Gruppe der Schadstoffe, unverbrannte Kohlenwasserstoffe (uHC), konnten am Einhubtriebwerk nicht gemessen werden, siehe Abschnitt 4.3.3. Da in der 3-dimensionalen numerischen Simulation ein reduzierter Mechanismus zum Einsatz kam, der zwar hinsichtlich Zündverzugszeiten gut validiert ist, jedoch Zwischenspezies bei der Oxidation nicht korrekt wiedergibt [MN06], konnten auch hiermit die Kohlenwasserstoff-Emissionen nicht bestimmt werden. Auf die Beschreibung deren Bildungsmechanismen wird deshalb verzichtet.

2.4.1 Stickoxide (NO_{*x*})

Unter dem Begriff Stickoxide (NO_x) werden verschiedene Verbindungen von Stickstoff und Sauerstoff zusammengefasst. In den Abgasen von Verbrennungsmotoren treten diese primär als Stickstoffmonoxid NO und Stickstoffdioxid NO_2 auf. Die Schadwirkungen der Stickoxide sind vielfältig und wurden bereits in den 1950er Jahren anhand der Smogbildung in Los Angeles auf Kraftfahrzeug-Emissionen bezogen [HS52]. Neben der bodennahen Ozonbildung führen Stickoxide in der Stratosphäre zum Abbau der Ozonschicht. Durch die Reaktion mit Wasser bildet NO_2 salpetrige Säure, deren ätzende Wirkung in der Lunge eine Gefährdung für Mensch und Tier darstellt. Als Teil des "sauren Regens" verursacht salpetrige sowie ebenfalls durch NO_x gebildete Salpeter-Säure weitere Schäden an Organismen und Bauwerken. N_2O ist aufgrund der Stratosphäre ebenfalls zum Ozonabbau bei.

Für Verbrennungsvorgänge sind 4 Bildungswege für Stickoxide von Bedeutung:

Thermische Bildung von NO

Bei motorischer Verbrennung wird ein Großteil des NO auf dem von Zel'dovich beschriebenen Wege gebildet. Der ursprüngliche Mechanismus besteht aus den Kettenreaktionen 2.28 und 2.29 und wurde später von Lavoie um die Reaktion 2.30 zum erweiterten Zel'dovich Mechanismus ergänzt:

$$O + N_2 \leftrightarrow NO + N$$
 (2.28)

$$N + O_2 \leftrightarrow NO + O$$
 (2.29)

$$N + OH \leftrightarrow NO + H$$
 (2.30)

Die erste Reaktion ist hierbei ratenbestimmend, da die Aufspaltung der stabilen 3-fach Bindung von Stickstoffmolekülen mit einer sehr hohen Aktivierungsenergie verbunden ist. Dieser Mechanismus der NO-Bildung ist deshalb stark temperaturabhängig und liefert nennenswerte Beiträge erst bei Temperaturen ab etwa 1800 K. Nahstöchiometrische Zonen mit $\lambda \approx 1$ überschreiten diese Temperaturen bei motorischen Bedingungen deutlich, siehe Abbildung 2.10. Es zeigt sich, dass bei hohen Temperaturen die Reaktion schnell wird und die NO-Konzentration sich dem (nicht dargestellten) Gleichgewicht nähert. In der Expansionsphase führt dies dann zu einer teilweisen Rückbildung, bis die Temperatur weiter absinkt und die Reaktion schließlich "einfriert". In mageren Zonen mit der Luftzahl $\lambda = 3$ ergeben sich dagegen deutlich niedrigere Flammtemperaturen. Nach der in diesem Falle deutlich langsameren Vorwärtsreaktion können keine Rückreaktionen beobachtet werden.¹²



Abbildung 2.10: Temperaturverlauf und Molenbruch NO bei Kompression und Verbrennung mit Luftzahl $\lambda = 1$ und $\lambda = 3$

Es ist festzuhalten, dass aufgrund der vergleichsweise trägen Reaktion 2.28 wesentliche Mengen an NO erst nach der Hauptwärmefreisetzung gebildet werden. Die Verweildauer bei hohen Temperaturen spielt bei der thermischen NO-Bildung eine bedeutende Rolle.

¹²Es ist anzumerken, dass die zugrundeliegende Berechnung adiabat durchgeführt wurde und damit höhere Temperaturen als in Realität ergibt.

Prompt gebildetes NO

In der Verbrennungszone anwesender Stickstoff kann von CH-Radikalen zerlegt und zu Blausäure HCN umgewandelt werden. Über mehrere Zwischenschritte kann in Folge ebenfalls NO gebildet werden:

$$CH + N_2 \rightarrow HCN + N \rightarrow \dots \rightarrow NO$$
 (2.31)

Gegenüber den vergleichsweise langsamen Reaktionsraten bei der thermischen NO-Produktion ist gerade die geschwindigkeitsbestimmende Initialreaktion zu Blausäure (HCN) deutlich schneller. Das über diesen Weg gebildete Stickoxid wird deshalb als promptes oder nach dem Entdecker als Fenimore-NO benannt. Da für die Entstehung von promptem NO CH-Radikale nötig sind, entsteht es primär in Reaktions-Zonen (Flammenfront) und der Beitrag zur gesamten Stickoxidproduktion kann für Luftzahlen $\lambda > 1,4$ vernachlässigt werden [MS99]. Bei konventionellen Diffusionsflammen beträgt der Anteil an der Gesamtstickoxidemission dagegen bis zu 10% [MS99].

NO aus N₂O

Bei Verbrennungen mit geringer Spitzentemperatur reduziert sich die thermische Stickoxidproduktion deutlich, was in der hohen Aktivierungsenergie von Reaktion 2.28 begründet ist. Die zusätzliche Anwesenheit eines dritten Stoßpartners kann eine Reaktion mit Stickstoff dagegen auch bei niedrigerer Temperatur initiieren, wobei das dabei als Zwischenspezies gebildete Distickstoffoxid N₂O anschließend zu NO reagiert:

$$N_2 + O + M \rightarrow N_2 O + M \tag{2.32}$$

$$N_2O + O \rightarrow NO + NO \tag{2.33}$$

Bei diesem Mechanismus bedarf es nicht der Anwesenheit von CH-Radikalen, weshalb er besonders bei mageren Mischungen signifikant zur Gesamt-Emission beiträgt. In Teillastbereichen der homogenen Kompressionszündung mit Gesamtstickoxid-Emissionen im Bereich weniger ppm ist diesem Bildungsweg somit einen deutlicher Anteil zuzuweisen.

NO aus im Brennstoff enthaltenem Stickstoff

Aktuell wird verstärkt über die Verbrennung von nachwachsenden Rohstoffen wie Holz oder Stroh diskutiert. Der in diesen Brennstoffen enthaltene Stickstoff kann dabei über den HCN-Reaktionspfad zur Stickoxidproduktion beitragen. Konventionelle Kraftstoffe für die motorische Verbrennung, wie der in dieser Arbeit eingesetzte Dieselkraftstoff, enthalten dagegen vernachlässigbare Stickstoffanteile [Hey88].

Verhältnis von NO2 zu NO



Abbildung 2.11: *Molares Verhältnis von NO*₂ *zu NO für Luft im chemischen Gleichgewicht*

Abbildung 2.11 zeigt das Verhältnis von NO₂ zu NO im chemischen Gleichgewicht. Die Berechnung basiert hierbei auf Luft und wurde mit dem Speziesumfang und den entsprechenden Stoffwerten des GRI-Mechanismus [SGF⁺] durchgeführt. Hierbei ist ersichtlich, dass für hohe Temperaturen das Verhältnis von NO₂ zu NO gering ausfällt und damit das chemische Gleichgewicht deutlich auf der Seite von NO liegt. Während der Bildung von NO im Brennraum kann die Umwandlung zu NO₂ damit vernachlässigt werden, was bei der Modellierung der Stickoxid-Emissionen bei der numerischen Simulation, Abschnitt 5.5, genutzt werden wird. Bei einer Abkühlung von Verbrennungsgasen auf Umgebungstemperatur wird NO fast vollständig zu NO₂ umgewandelt, wenn im Falle von $\lambda > 1$ genügend Sauerstoff und ausreichend Zeit zur Näherung an das chemische Gleichgewicht vorhanden ist. Nach den langen Aufenthaltszeiten und den niedrigen Temperaturen bei Messungen am Einhubtriebwerk (p = 1 bar, t=1...10 min, T = 60°C, siehe Abschnitt 4.3) ist damit ein deutlicher Anteil an NO₂ zu erwarten.¹³

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass bei hohen Temperaturen signifikante Anteile der Gesamtstickoxid-Emissionen über den thermischen Reaktionspfad produziert werden. In Reaktionszonen mit hoher CH-Radikalkonzentration im nah- bzw. unterstöchiometrischen Fall spielt darüber hinaus der prompt gebildete Anteil eine wichtige Rolle. Bei niedrigen Gesamtstickoxid-Emissionen aufgrund magerer Niedertemperaturverbrennung muss der Bildungsweg über Distickstoffoxid berücksichtigt werden.

2.4.2 Kohlenmonoxid (CO)

Kohlenmonoxid CO bindet sich im Vergleich zu Sauerstoff stärker an den Sauerstoffträger im Blut, das Hämoglobin. Die blockierten Blutkörperchen können keinen Sauerstoff mehr aufnehmen und somit rufen schon geringe Konzentrationen an CO Vergiftungserscheinungen hervor.

CO entsteht stets als Zwischenprodukt der Kohlenwasserstoffverbrennung vor der weiteren Aufoxidation zu Kohlendioxid. Weshalb diese vollständige Oxidation in Kolbenmotoren nicht erfolgt, hat 4 Gründe:

- 1. Hohe Temperaturen verschieben das Gleichgewicht einer exothermen chemischen Reaktion auf die Eduktseite, also hin zu CO. Wird ausgehend von dieser hohen Konzentration nun ein schneller Abkühlvorgang (Quenchen) eingeleitet, so ist die chemischen Reaktionsrate zu gering, um das CO vollständig zu CO₂ aufzuoxidieren.
- 2. Die Oxidationsreaktion findet primär mit Radikalen wie beispielsweise OH• statt [MS99]:

$$CO + OH^{\bullet} \leftrightarrow CO_2 + H^{\bullet}$$
 (2.34)

 $^{^{13}}$ Die wesentlich kürzere Aufenthaltszeit und höheren Temperaturen bei einem Realmotor führen dort zu einem niedrigeren [NO₂]:[NO]-Verhältnis von etwa 1:10.

Die Ratenkoeffizienten dieser bedeutenden Reaktion folgen nach experimentellen Daten (siehe Glassman [Gla87]) nicht dem exponentiellen Arrhenius-Gesetz, sondern verharren bei niedrigen Temperaturen konstant und steigen ab etwa 1100 K überexponentiell an. Ausreichend hohe Konzentrationen der Radikale stehen erst bei höheren Temperaturen in ausreichender Menge zur Verfügung, um das zuvor gebildete Kohlenmonoxid vollständig zu oxidieren. In wandnahen Bereichen oder sehr mageren Zonen wird diese Temperatur von 1100 K nicht erzielt, womit diese Bereiche als CO-Quellen in Betracht kommen.

- 3. Bei fetter Verbrennung ist nicht ausreichend Sauerstoff vorhanden um die Oxidation zu ermöglichen.
- 4. Bei turbulenter Verbrennung kann es durch sehr hohe Turbulenzintensitäten zur lokalen Verlöschung kommen. In diesen Gebieten ist dann die vollständige Aufoxidation ebenfalls nicht gewährleistet.

Auch bei einer global mageren Verbrennung können bei geringer Homogenisierung des Kraftstoffs lokal fette Bereiche mit einer Luftzahl $\lambda < 1$ vorliegen. Hier ist lokal nicht ausreichend Sauerstoff vorhanden, um CO komplett aufzuoxidieren. Aufgrund der kurzen Zeitspannen bei der motorischen Verbrennung kann die Diffusion von CO zu mageren Bereichen bzw. die Diffusion von O₂ zu den fetten Bereichen vernachlässigt werden. Findet die turbulente Mischung mit den mageren Bereichen dann erst verhältnismäßig spät statt, sinkt die Temperatur aufgrund der fortschreitenden Expansion der Brennraumgase ab, die Reaktion "friert ein" und CO-Emissionen sind die Folge.

2.4.3 Ruß

Ruß- oder Partikelemissionen stehen aufgrund mehrerer Schadwirkungen derzeit verstärkt in der öffentlichen Diskussion. Hierbei scheinen besonders die kleinen Rußpartikel ein hohes Gefährdungspotential aufzuweisen, da diese über die Lunge in die Blutbahn gelangen können. Zum anderen stehen an den trockenen Ruß adsorbierte Kohlenwasserstoffe im Verdacht, krebserregend zu sein. Wichtig für die Wirkung auf Organismen sind deshalb neben der Anzahl der Partikel auch die Größenverteilung sowie anhaftende Kondensate.

Die Bildung von Ruß erfolgt aus der Gasphase. Hierbei spielen polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe (PAK) eine bedeutende Rolle [WMD01]. Ringförmige Kohlenwasserstoffverbindungen sind zum einen bereits im Kraftstoff enthalten¹⁴ und bilden sich zum anderen aus ungesättigten Kohlenwasserstoffen, primär Acetylen C_2H_2 . Die Zusammenlagerung bzw. das Wachstum der PAK bildet zunächst Rußkeime, die dann durch weiteres Oberflächenwachstum oder Partikelzusammenballung an Größe gewinnen [Boc94]. Da große Anteile dieses Primärrußes im weiteren Verlauf der Verbrennung aufoxidiert werden, ist die Menge des tatsächlich emittierten zum maximal gebildeten Ruß gering [MS99].

Auf die Menge des emittierten Rußes haben somit die beiden Größen Temperatur und Luftzahl einen wichtigen Einfluss. Hohe Ruß-Emissionen werden speziell in einem mittleren Temperaturbereich von 1500 bis 1900 K bei lokalen Luftzahlen $\lambda < 0,6$ erzielt [MS99].

Ein essentieller Vorteil der Homogenen Kompressionszündung ist die geringe Ruß-Emission sowohl an integraler Menge – gemessen durch Rußabscheidung auf einem Filterpapier, z.B. [Chr02] – als auch an kleinen Partikeln. Ein Vergleich der Rußpartikelgröße, die sich bei konventioneller direkteinspritzender Dieselverbrennung ergibt, mit der homogenen Dieselverbrennung findet sich beispielsweise in Müller und Raatz [MR01]. Die Autoren beobachteten dabei im Messbereich 4,4...160 nm einen etwa gleichen Beweglichkeitsdurchmesser¹⁵ und damit eine vergleichbare Größe von Rußpartikeln der beiden Brennverfahren. In diesem Bereich konnte durch das homogene Brennverfahren die Gesamtanzahl der emittierten Partikel deutlich verringert werden. Dieser Trend setzte sich in dieser Untersuchung tendenziell auch bei größeren Partikel bis 673 nm fort.

 $^{^{14}}$ Nach DIN EN 590 darf Dieselkraftstoff bis zu 11 Massen-% Aromaten enthalten.

¹⁵Der Beweglichkeitsdurchmesser wird für sehr kleine Partikel definiert, die klein im Vergleich zur freien Weglänge des Trägergases sind und somit Maßgeblich durch die Brown´sche Molekularbewegung beeinflusst werden.

2.5 Relevante Ausbreitungsmechanismen der Verbrennung

Aus optischen Beobachtungen ist bekannt, dass bei der homogenen Kompressionszündung auch bei idealer Vormischung die Verbrennung nicht im gesamten Brennraum gleichzeitig stattfindet [Hul02]. Für die höheren Temperatur- und Kraftstoffgradienten der in dieser Arbeit verwendeten technischen Mischung gilt dies im Besonderen, wie in Kapitel 6 gezeigt wird. Wie wir dort sehen werden, zeigt die Chemilumineszenz eine bimodales Erscheinungsbild der Zündung bzw. Verbrennung: Zum einen breitet sich die Verbrennung von frühen Zündzonen in die direkt umliegenden Gebiete aus. Zum anderen zeigen sich zerteilte, nicht zusammenhängende Verbrennungszonen. Im Ergebniskapitel 6 wird hergeleitet werden, dass die physikalischen Mechanismen im kleinskaligen Bereich die turbulente Flammenausbreitung und im großskaligen sukzessive Selbstzündungen sind, welche in Folge vertieft werden sollen.

2.5.1 Deflagrative Flammenausbreitung

Deflagrationen umfassen den Bereich der laminaren und turbulenten Flammenausbreitung. *Laminare Flammen* basieren auf der Diffusion von Wärme und Spezies und weisen damit eine niedrige Ausbreitungsgeschwindigkeit u_l im Bereich von cm/s bis hin zu wenigen m/s auf. Die laminare Flammengeschwindigkeit ist dabei im Wesentlichen vom Druck, der Temperatur und der Luftzahl ($u_{l,max}$ bei $\lambda \approx 0,9$) abhängig, siehe Anhang A.4. Ausgehend von mageren Mischungen bei der homogenen Kompressionszündung ist somit bei einer Steigerung der Last mit einer Steigerung der laminaren Flammengeschwindigkeit zu rechnen.

Die lokale bzw. mikroskopische Flammengeschwindigkeit ist auch im *turbulenten Fall* die laminare Flammengeschwindigkeit. Diese wird durch die Turbulenz aufgrund Streckung und Scherung beeinflusst und abhängig von der Lewis-Zahl des Gemisches bzw. des Mangelreaktanden zumeist reduziert. Durch die turbulent-konvektive Einmischung von frischem und verbranntem Gas in die Flammenfront wird jedoch die integrale, turbulente Flammengeschwindigkeit u_t angehoben und erreicht in Motoren bei hohen Drehzahlen durchaus $u_t = 25...40$ m/s. Einige Ansätze sowie relevante Zahlenwerte für die turbulente Flammenausbreitung finden sich im Anhang A.4. Turbulente Bewegungen des Gases im Brennraum haben demnach einen starken Einfluss auf die Ausbreitung einer Flamme.

Turbulenz ist durch 3-dimensionale Fluktuationen charakterisiert, die Wirbel verschiedener Größen ausbilden. Nach oben hin wird das turbulente Spektrum durch das integrale Längenmaß l_I abgegrenzt, welches in Verbrennungsmotoren oftmals etwa einem Zehntel der betrachteten Geometrie entspricht, siehe Anhang A.1.2. Der größte Teil der aus der Hauptströmung in Scherschichten entnommenen Energie fließt der sogenannten Wirbelkaskade durch Wirbel dieser integralen Größe zu. Treten Wirbel mit kleinerem Radius in den Wirkbereich der größeren, so werden sie gestreckt und beschleunigt, womit Energie von den energiereichen großen Wirbeln zu den kleineren weitergegeben wird. Das turbulente Spektrum wird nach unten hin durch das Kolmogorov-Längenmaß l_K im Bereich weniger μ m, siehe Anhang A.1.2, begrenzt. Die bis zu den kleinsten Wirbeln weitergegebene turbulente Energie wird schließlich von diesen in Form von innerer Energie dissipiert. Die über alle Skalen der Turbulenz gemittelten Geschwindigkeitsschwankungen sollen nachfolgend mit u' abgekürzt werden. Für weiterführende Erläuterungen zur Turbulenz sei auf die Fachliteratur, z.B. Tennekes und Lumley [TL72], verwiesen.

Betrachtungen zur Relevanz der Turbulenz werden nachfolgend immer wieder angestellt, beispielsweise bei der Modellierung der Wärme- und Stoffübertragung im Falle der Emulsionsverdampfung in Abschnitt 5.3 oder der Deutung experimenteller Ergebnisse in Abschnitt 6.1. Im nächsten Abschnitt werden wir darüber hinaus sehen, dass bei der homogenen Kompressionszündung neben der turbulenten Flammenausbreitung ein weiterer Mechanismus, nämlich sukzessive Selbstzündungen, einen entscheidenden Einfluss auf die Ausbreitung der Verbrennung aufweist.

2.5.2 Sukzessive Selbstzündungen nach Zel'dovich

Die Theorie der sukzessiven Selbstzündungen wurde für die Entstehung von Detonationswellen von Zel'dovich et al. [ZLMS70] entwickelt.¹⁶ Die Autoren schildern dabei, dass sich in Brennräumen von motorischer Größe Detonationen entwickeln können, was durch aktuelle Veröffentlichungen von Pöschl [Pös06] bestätigt wurde. Für das Verständnis der homogenen Kompressionszündung ist diese Theorie damit aus zwei Gründen wichtig: Zum einen lassen sich durch sukzessive Selbstzündungen die hohen integralen Ausbreitungsgeschwindigkeiten (siehe z.B. [HCJ⁺02], [HCJ⁺99]) erklären. Zum anderen wurden in vielen Arbeiten intensive, klopfähnliche Druckschwingungen beobachtet [VWWS05], [LV03]. Es ist zu klären, ob diese durch Detonationen hervorgerufen werden könnten. Während diese bei geringer Amplitude zunächst nur ein akustisches Problem darstellen, können sie auch zu einer Schädigung von Bauteilen führen, wenn intensive Druckpulsationen auftreten.

Detonationen unterscheiden sich in der Ausbreitungsgeschwindigkeit, den Ausbreitungsmechanismen und den lokalen, thermodynamischen Bedingungen wesentlich von deflagrativen Flammen [Tur00]. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit liegt mit einer Geschwindigkeit u_{det} oberhalb der Schallgeschwindigkeit im unverbrannten Medium und somit im Bereich $u_{det} \approx 500...2000$ m/s. Essentiell ist die Kopplung zwischen dem intensiven Druckstoß und der Wärmefreisetzung. Diese Kopplung hat bidirektionalen Charakter: Während die Druckwelle die Reaktion der Verbrennung erst in Gang setzt, wird diese Druckwelle selbst durch den Druckanstieg der Reaktion angetrieben. Ausgehend von der klassischen Theorie von Chapman und Joguet, bei der die Reaktion sofort der Druckwelle folgt, entwickelten Zel'dovich, von Neumann und Döring unabhängig voneinander das nach ihnen benannte ZND-Detonationsmodell. Dabei wird ein wesentlicher Teil der Energie nach Durchlaufen der Druckwelle erst nach der chemischen Zündverzugszeit freigesetzt, was im besonderen Maße für die Oxidation von langkettigen Kohlenwasserstoffen zutrifft.

¹⁶Von Zel'dovich et al. wurde diese Art der Flammenausbreitung im Zusammenhang mit Detonationen als "spontaneous propagation" bezeichnet. Für die in Abschnitt 6.1.3 beschriebene Abfolge von Reaktionszonen soll der Begriff "sukzessive Selbstzündung" (lateinisch *succedere*: folgen, nachfolgen) verwendet werden.

Zel'dovich [Zel80] zeigte mittels eindimensionaler Berechnung, wie sich aus einem inhomogenen Temperaturfeld eine Detonation entwickeln kann. Besonderes Augenmerk lag hierbei auf der Interaktion zwischen gasdynamischen und kinetischen Effekten, wobei die Randbedingungen – wie beispielsweise einer physikalischen Länge von 10 cm – motorischen Verhältnissen entsprechen. Wesentlicher Einflussfaktor der Betrachtung war der räumliche Temperaturgradient zu Beginn der chemischen Reaktionen, während Anfangsdruck und Kraftstoffkonzentration konstant angenommen wurden. Ausgehend von einer Selbstzündung an der heißesten Stelle und der damit verbundenen Expansion dieses Bereiches ergibt sich eine Gasbewegung bzw. Druckwelle, die in die unverbrannten Gebiete voranschreitet und zu einer Nachkompression führt. Zel'dovich ordnete die Geschwindigkeit der sukzessiven Selbstzündungen (*spontaneous propagation*, Index *sp*) in 4 Regimes ein, die den schraffierten Bereichen in Abbildung 2.12 entsprechen:



Abbildung 2.12: Regimes sukzessiver Selbstzündungen in Abhängigkeit vom räumlichen Temperaturgradienten vor der Verbrennung (qualitativ)

1. $u_{sp} < u_{def}$: Aufgrund hoher Temperaturgradienten schreiten die sukzessiven Selbstzündungen langsamer als die deflagrative Flammenausbreitung (Geschwindigkeit u_{def}) voran. Der Prozess ist durch Wärmeleitung und Speziesdiffusion sowie turbulente Fluktuationen dominiert, die sukzessiven Selbstzündungen haben keinen Einfluss auf den Ablauf der Verbrennung.

- 2. $u_{def} < u_{sp} \ll a < u_{CJ}$: Geringere Temperaturgradienten führen zu höheren Ausbreitungsgeschwindigkeiten u_{sp} der sukzessiven Selbstzündungen oberhalb derjenigen von deflagrativen Flammenfronten u_{def} . Druckungleichheiten können sich ausgleichen, da die Selbstzündungen langsamer als die Schallgeschwindigkeit im unverbrannten Gas a voranschreiten und damit auch langsamer als eine Detonation nach Chapman-Joguet u_{CJ} . Bei den von Zel'dovich et al. gewählten Randbedingungen sind für dieses Regime Temperaturgradienten von mindestens $|\partial T/\partial x| \gtrsim 22$ K/mm nötig.
- 3. $u_{sp} \lesssim u_{CJ}$: Eine Kopplung zwischen Druckwelle und Wärmefreisetzung und damit die Bedingungen für eine Detonation sind erreicht, wenn die Fortpflanzungsgeschwindigkeit der sukzessiven Selbstzündungen etwa der lokalen Schallgeschwindigkeit entspricht. Zel'dovich et al. beobachten dieses Regime bei etwa $|\partial T/\partial x| = 11$ K/mm.
- 4. $u_{sp} > u_{CJ}$: Die sukzessiven Selbstzündungen u_{sp} breiten sich schneller aus, als eine Detonation nach Chapman-Joguet u_{CJ} . Die Druckwelle eilt der Flammenfront nach und ist nicht mit dieser gekoppelt, weshalb sich keine Detonation ausbilden kann. Im Grenzfall verschwindender Temperaturgradienten und damit einer einheitlichen Temperatur im Brennraum stellt sich eine thermische Explosion des Gases ein.

Wie wir im Abschnitt 6.1.3 sehen werden, stellen sowohl die turbulente Flammenausbreitung als auch der Mechanismus der sukzessiven Selbstzündungen eine wichtige Basis zum Verständnis von hohen Flammenausbreitungsgeschwindigkeiten bei der homogenen Kompressionszündung dar.

2 Grundlagen

3 Stand der Technik der homogenen Selbstzündung

Dieses Kapitel gliedert sich in zwei Teile: Zunächst werden die frühen Arbeiten der homogenen Selbstzündung vorgestellt, die bis zum Beginn der 1990er Jahre publiziert wurden. Danach nahm die Publikationsanzahl in diesem Themengebiet stark zu. Auf Basis dieser neueren Arbeiten wird der heutige Stand der Technik aufgezeigt und eine Kategorisierung der verschiedenen Ansätze vorgenommen.

3.1 Historische Entwicklung der homogenen Kompressionszündung

Schon im 19. Jahrhundert entwickelten sich die Grundelemente der heute verbreiteten Kolbenmotoren. Selbstzündungen spielten und spielen dabei stets eine dominierende Rolle: Beim klassischen Konzept des Ottomotores wird eine möglichst homogene Ladung mittels Zündkerze entflammt. Ausgehend vom Zündherd breitet sich die Flamme deflagrativ aus. Selbstzündeffekte in noch nicht von der Flamme erfassten Bereichen sind hierbei ungewünscht, da diese zu starken Druckschwingungen (*klopfende Verbrennung*) im Brennraum führen können. Anders verhält sich der klassische Dieselmotor, bei dem keine externe Zündquelle¹ vorhanden ist. Hier stellt die Selbstzündung die Basis für die primär diffusiv abbrennende Flamme dar.

Die Idee zu einer weiteren Nutzungsmöglichkeit der Selbstzündung findet sich in den Jahren nach dem 2. Weltkrieg. Ab dem Jahr 1949 wird der *Lohmann-Fahrrad-Dieselmotor* vertrieben, welcher als Fahrrad-Hilfsantrieb

¹Glühkerzen für den Anlaufvorgang ausgenommen

diente. Es handelt sich um einen selbstzündenden 2-Takt Motor mit variabler Verdichtung und externer Gemischerzeugung, der mit Diesel oder Petroleum betrieben wird. In der Patentschrift 864476 der Lohmann-Werke [Tee52] wird zudem ein interessanter Mechanismus zur Triggerung des Selbstzündzeitpunktes beschrieben. Die mittels Nockenmechanismus verschiebliche, einseitig auf Zylinderkopfseite geschlossene Zylinderbuchse schießt zum gewünschten Selbstzündzeitpunkt kurz nach dem Oberen Totpunkt Richtung Kolben. Dadurch erhöht sich der Kompressionsdruck und die Selbstzündung wird eingeleitet.

Erkenntnis 1: Ein Motor lässt sich mittels Selbstzündung einer vorgemischten Ladung betreiben.

Onishi et al. [OJS⁺79] präsentierten Ende der 1970er Jahre unter dem Begriff *Active Thermo-Atmosphere Combustion (ATAC)* ein homogenes, selbstzündendes Brennverfahren. An dem 2-Takt Motor wurde beobachtet, dass sich dieses Brennverfahren sowohl im Zylinderdruckverlauf als auch im optischen Verhalten deutlich von Diesel- und Ottomotorischer Verbrennung unterscheidet. Der maximale Brennraumdruck ist geringeren zyklischen Schwankungen unterworfen als im Ottomotorischen Betrieb. Schlierenaufnahmen zeigen ein feines Muster an Dichtefluktuationen im Brennraum, welches als charakteristisch für dieses Brennverfahren identifiziert wurde. Die Autoren preisen zudem den geringen Kraftstoffverbrauch sowie geringe Lärm- und Emissionswerte an Kohlenmonoxid, unverbrannten Kohlenwasserstoffen und Stickoxiden auf. Diese Vorzüge sind jedoch in Bezug zu sehr hohen Werten bei konventionellen, kleinen 2-Takt Motoren zu sehen.

Erkenntnis 2: Die homogene Selbstzündung unterscheidet sich im Druckverlauf, optisch und in den Emissionen deutlich von den klassischen Verfahren.

Erste Untersuchungen an einem 4-Takt Motor fanden Anfang der 1980er Jahre durch Najt und Foster [NF83] statt. Sie beobachteten den Selbstzündprozess auf Basis der Zylinderdruckindizierung und schreiben der chemischen Kinetik einen dominanten Einfluss auf die mittlere Wärmefreisetzungsrate zu. In der umfangreich durchgeführten Parameterstudie zeichnen sich zwei dominierende Einflüsse auf die homogene Selbstzündung ab:

1. Kraftstoff- und Sauerstoffkonzentration:

Eine Erhöhung einer oder beider dieser Konzentrationen steigert die chemische Umsatzrate, siehe Abschnitt 2.3. Die Autoren beobachteten diesen Zusammenhang sowohl bei Variationen der Luftzahl, des Kompressionsverhältnis, als auch der Frischluftmenge².

2. Temperatur:

Von den Autoren wird als unwahrscheinlich angesehen, dass rezyklierte, aktive Spezies die Zündung eines folgenden Zyklus beeinflussen. Deshalb schließen sie, dass die Variation der Abgasrückführrate (AGR-Rate) primär die Ladungstemperatur und damit den Zündzeitpunkt effektiv beeinflusst, sich die Reaktionsraten dagegen kaum verändern.

Erkenntnis 3: Der Summenbrennverlauf lässt sich auf Basis der chemischen Kinetik qualitativ erklären. In Zusammenhang mit hohen Reaktionsraten treten klopfähnliche Druckschwingungen auf.

Thring [Thr89] war mit seiner Veröffentlichung im Jahre 1989 der Namensgeber für den heute oftmals als Synonym der homogenen Selbstzündung verwendeten Begriff *Homogeneous-Charge Compression-Ignition (HCCI)*. Thring beobachtete, dass ein Kolbenmotor in der HCCI-Betriebsart im Vergleich zur Funkenzündung deutlich magerer betrieben werden kann. Er begründet dies mit zwei Ansätzen: Zum einen können magere Mischungen mittels Zündkerze nur schwer entflammt werden, zum anderen erlöscht bei diesen Bedingungen die Flammenausbreitung oder ist zumindest sehr langsam. Aufgrund der Selbstzündung an vielen Stellen im Brennraum sind beide Unzulänglichkeiten im HCCI Betrieb nicht vorhanden. Aufgrund der rapiden und klopfähnlichen Verbrennung ohne AGR proklamiert Thring deren Notwendigkeit für einen sanften Brennverlauf aufgrund empirischer Beobachtungen.

²Die Frischluftmenge bezogen auf einen Referenzpunkt wird von den Autoren als Liefergrad bezeichnet.

Erkenntnis 4: HCCI kann mit sehr mageren Mischungen betrieben werden, da klassische Flammenausbreitungsmechanismen eine untergeordete Rolle spielen. AGR ist eine effektive Maßnahme zur Reduktion der Reaktionsraten.

Eine vielzitierte Arbeit wurde im Jahre 1992 von Stockinger et al. [SSK92] vorgestellt. Sie basiert auf einem gering modifizierten Serien-Ottomotor, der mit Propan oder Normalbenzin betrieben wurde. Gegenüber dem Betrieb bei Fremdzündung zeigt die Selbstzündung im Teillastbereich einen deutlichen Vorteil im Wirkungsgrad, den die Autoren auf einen schnellen Brennstoffumsatz sowie den ungedrosselten Betrieb zurückführen. Bis zu einer Luftzahl-Schwelle von $\lambda = 2,3$ sind die NO_x-Emissionen sehr gering, steigen bei fetterem Gemisch aber sehr stark an. Bei höherer Last berichten die Autoren zudem von großen Schwierigkeiten, den Verbrennungsbeginn sicher einzustellen, da sich dieser bezüglich der Ladelufttemperatur sehr sensitiv zeigt. Auch Druckschwingungen und Klopfgeräusche werden hierbei beobachtet. Beide Unzulänglichkeiten ließen sich zwar mit der Abgasrückführung dämpfen, jedoch nicht vermeiden.

Erkenntnis 5: Im Teillastbereich kann ein hoher Wirkungsgrad bei sehr niedrigen Stickoxid-Emissionen erzielt werden. Der Lastbereich ist nach oben hin durch zu hohe Reaktionsraten und heftige Druckschwingungen begrenzt.

Mit diesen ersten Ergebnissen war eine vielversprechende Basis für die homogene Selbstzündung gelegt und gegen Ende der 1990er Jahre nimmt die Publikationsanzahl stark zu. Aufgrund der Diversifizierung werden in Teilgebieten vielversprechende Resultate erzielt, die den heutigen Stand der Technik prägen aber nicht mehr als initiale Meilensteine anzusehen sind. Die wichtigsten Forschungsrichtungen sollen deshalb im folgenden Abschnitt übersichtsartig zusammengefasst werden.

3.2 Brennverfahren mit homogener Kompressionszündung



Abbildung 3.1: Zeitpunkte der Kraftstoffzugabe: A Externe Vormischung, B1 frühe Direkteinspritzung, B2 späte Direkteinspritzung

Die Brennverfahren lassen sich nach dem Ort und Zeitpunkt der Kraftstoffzugabe in äußere sowie innere Gemischbildungsmethoden einteilen.

3.2.1 Äußere Gemischbildung.

Die Zugabe des Kraftstoffs erfolgt in das Saugrohr (siehe Abbildung 3.1, A) oder wird in speziellen Mischbehältern durchgeführt. Dieses Verfahren eignet sich vor allem für niedrigsiedende bzw. gasförmige Kraftstoffe und kann aufgrund der Mischdauer eine sehr gute Homogenisierung von Kraftstoff, Luft und rezyklierten Abgasbestandteilen liefern.

Bei der Saugrohreinspritzung von *Dieselkraftstoff* kommen im Brennraum vergleichsweise große Mengen an Kraftstoff in Kontakt mit kühlen Bereichen der Zylinderlaufbuchse. Aufgrund des hohen Siedebereiches von Dieselkraftstoff oberhalb typischer Zylinderbuchsentemperaturen kommt es in Folge zu einer Benetzung der Zylinderwand mit Kraftstoff und damit zu einer problematischen Schmierölverdünnung [KAOM02]. Im Brennraum werden diese anhaftenden Kraftstoffmengen während der Verbrennung nicht vollständig aufoxidiert, womit die CO und uHC-Emissionen sehr hoch ausfallen, siehe Arbeiten vom Southwest Research Institute [RC96] [GR97]. In diesen Arbeiten

wird zudem aufgrund schlechter Verdampfung des Kraftstoffs bei Ansauglufttemperaturen unter 120°C von hohen Ruß-Emissionen berichtet, die teilweise oberhalb derer bei konventioneller Dieselverbrennung liegen. Auch in Arbeiten mit Vorverdampfung des Diesels im Saugrohr, beispielsweise durch Einspritzen auf ein beheiztes Rohr [LHGD06], wird über Rußprobleme berichtet. Christensen [Chr02] schließt, dass die Saugrohreinspritzung von Dieselkraftstoff aufgrund der hohen Ruß-Emissionen als nicht sinnvoll erscheint.

Die äußere Gemischbildung ist somit auf leicht siedende Kraftstoffe beschränkt. Bedeutende Arbeiten dazu entstehen ab dem Jahr 1997 von der schwedischen Arbeitsgruppe aus Lund um Professor Bengt Johansson. Hierbei sind besonders die Veröffentlichungen zum Einfluss der Turbulenz [CJ02] und der Ladungsinhomogenitäten [REF⁺00] zu nennen. Die Turbulenz wurde durch zwei unterschiedliche Kolbenkronen (ohne bzw. mit einer quadratischen Mulde) variiert. Entgegen den Erkenntnissen zur turbulenten Flammenausbreitung (siehe Abschnitt 2.5.1) stieg mit zunehmender Turbulenz die Wärmefreisetzungsrate und damit die Brenngeschwindigkeit nicht an, sondern fiel deutlich ab. Dies wurde dadurch gedeutet, dass die erhöhte Turbulenz zu einer gleichmäßigeren Temperaturverteilung im Brennraum führt; lokale Temperaturspitzen werden "ausgebügelt". Da die lokalen Reaktionsraten nach dem Arrheniusansatz exponentiell ansteigen, ist die Wärmefreisetzung im Mittel bei einem einheitlicheren Feld niedriger, als bei höheren Temperaturamplituden [Hul02]. Dies gilt jedoch nur für die lokale Kinetik auf verhältnismäßig kleinen Skalen, global dagegen ergibt sich ein umgekehrter Effekt: Eine Vereinheitlichung der globalen Temperaturen im Brennraum führt aufgrund höherer Ausbreitungsgeschwindigkeiten lokaler Selbstzündungen zu höheren integralen Umsatzraten, vergleiche Abschnitt 2.5.2. Dies wurde experimentell beobachtet [DHS06] und durch Ensemblemittelung von unabhängigen Reaktoren reaktionskinetisch bestätigt [Dec05]. Hier zeigte sich, dass die Steigerung der "thermal width", d.h. des maximalen Temperaturunterschiedes der Reaktoren zu Kompressionsbeginn, eine niedrigere integrale Druckanstiegsrate zur Folge hat.

Für die Untersuchung der *Ladungsinhomogenitäten* wählten Richter et al. [REF⁺00] zum einen eine intensive Vormischung durch einen Mischtank

und zum anderen eine Saugrohreinspritzung. Während die Kraftststoffverteilung erwartungsgemäß bei der Saugrohreinspritzung stark fluktuiert, wurde bei der OH-Verteilung während der Verbrennung bei beiden Mischstrategien ein vergleichbares Muster beobachtet. Nach dieser Untersuchung scheinen Ladungsinhomogenitäten auf einer Skala von 4 mm...6 mm nur eine untergeordnete Rolle auf die Verbrennung zu haben. Dass auch bei sehr guter Vormischung hohe Fluktuationen auftreten, führen die Autoren auf Restgasoder Temperaturschwankungen zurück. Die Autoren gehen davon aus, dass Gebiete hoher Restgaskonzentration als Zündkerne wirken, spezifizieren dies jedoch nicht weiter hinsichtlich Temperatur- und/oder Kinetikeinfluss.

Griffiths und Whitaker [GW02] untersuchten das Auftreten von *Druckschwingungen* beim HCCI Betrieb, die sie als Klopfen bezeichnen. Sie nutzten eine klassische Einhubmaschine, deren Kolben nach der Kompression am OT fixiert wird. Die Druckschwingungen intensivierten sich bei der Erhöhung der Kompressionstemperatur in den NTC-Bereich deutlich. Sie vermuten höhere Radikalkonzentrationen in den kälteren Bereichen, weshalb in Folge dort die Hauptwärmefreisetzung zuerst beobachtet wurde. Die Autoren vermuten, dass im nicht klopfenden Fall die kettenerhaltende Reaktion unter Bildung von HO₂ dominiert

$$\mathrm{H}^{\bullet} + \mathrm{O}_{2} + \mathrm{M} \to \mathrm{HO}_{2}^{\bullet} + \mathrm{M}$$
(3.1)

während im klopfenden Fall die kettenverzweigende Reaktion

$$H^{\bullet} + O_2 \rightarrow OH^{\bullet} + O^{\bullet}$$
(3.2)

vorherrscht, die zu einer sehr hohen Umsatzrate führt. Wie sich jedoch daraus die Druckschwingungen entwickeln, konnte nicht geklärt werden. Diese Erklärung bietet zudem keinen Anhaltspunkt, weshalb die höhere Kraftstoffkonzentration bei Steigerung der Last klopfähnliche Druckschwingungen generiert, was das Hauptproblem in motorischen Anwendungen darstellt.

3.2.2 Innere Gemischbildung

Bei direkteinspritzenden Verfahren kommt dem Einspritzbeginn eine große Bedeutung zu. Zum einen lassen sich gemäß Abbildung 3.1, B1, *frühe Verfahren* realisieren, bei denen der Zündverzug zum Einspritzzeitpunkt die Einspritzdauer um Größenordnungen übertrifft. Aufgrund ausreichend langer Homogenisierungsdauer haben Variationen des Einspritzzeitpunktes einen vergleichsweise geringen Einfluss auf den deutlich späteren, kompressionsbedingten Zündzeitpunkt. Zum anderen werden *späte, das heißt um den Oberen Totpunkt stattfindende Einspritzungen* erforscht, die eine möglichst gute Homogenisierung innerhalb der Zündverzugszeit zum Ziel haben (siehe Abbildung 3.1, B2).



Abbildung 3.2: Brennverlauf und Emissionen bei Variation des Einspritzzeitpunktes, 30-Loch-Düse, aus [TK96]

Erste Publikationen zur inneren Gemischbildung stammen aus Japan vom New Advanced Combustion Engineering (ACE) Institute³ (Takeda et al. [TK96], Akagawa et al. [AMH⁺99]). Von Takeda et al. wurde als wesentliches Problem die hohe Sprayeindringtiefe aufgrund des geringen Zylinderdruckes

³Das ACE Institute wurde 1992 in Japan unter Federführung von Hino Motors, Ltd., Isuzu Motors Ltd., Mitsubishi Fuso Truck & Bus Corp., Nissan Diesel Motor Co., Ltd. gegründet.

bei *früher Einspritzung* erkannt, welche ebenfalls zu einem Kraftstoffauftrag auf die Zylinderbuchse führen kann. Um dies zu vermeiden, werden gegeneinander gerichtete Sprays sowie eine 30-Loch-Düse mit mehreren Sprayebenen eingesetzt. Während eine frühe Einspritzung eine vergleichsweise gute Homogenisierung und einen sanften Brennverlauf liefert, berichten die Autoren bei späterer Zugabe von hohen Reaktionsraten sowie heftigen Druckschwingungen, siehe Abbildung 3.2. Zudem beobachteten sie hierbei hohe NO_x -Emissionen, die aus einer nach früh verschobenen Einspritzung beim klassischen Dieselverfahren bekannt sind und von den Autoren auf Ungemischtheit und damit fette Zonen zurückgeführt werden. Eine weitere Spätverschiebung führt in den Bereich des vom klassischen Dieselbrennverfahren bekannten Ruß-NO_x-Trade-offs. Dieser grundsätzliche Zusammenhang des Einspritzbeginnes auf Brennverlauf und Emissionen wurde von Akagawa et al. [AMH⁺99] für eine Einspritzdüse mit einem in den Brennraum öffnenden Schirmventil bestätigt.

Alternativ können durch eine Kombination von Sitz- und Sacklöchern auch mit nur einer Düse gegeneinander gerichtete Strahlpaare erzeugt werden [IKST99]. Damit ließ sich eine Reduktion der Strahleindringtiefe um ca. 40% bei etwa gleicher Tropfengröße erzielen. Gegenüber konventionellen Düsen konnte die Rußbildung deutlich reduziert und der Umsatzgrad angehoben werden. Die Autoren führten diese Effekte auf die reduzierte Menge wandanhaftenden Kraftstoffs zurück, der zum Teil in einer Diffusionsflamme abbrennt, die sich während der Expansionsphase zeigte. Dennoch offenbart sich gegenüber der klassischen Dieselverbrennung ein reduzierter Wirkungsgrad. Diesen begründeten die Autoren mit dem reduzierten Verdichtungsverhältnis von $\epsilon = 12$, der dennoch zu frühen Verbrennung sowie der auch mit reduzierter Eindringtiefe nicht zu vermeidenden Wandbenetzung.

Eine *späte Direkteinspritzung* (vgl. Bild 3.1, B2) wurde von Nissan [KAO⁺99] entwickelt und ist als *Modulated Kinetiks* (*MK*) Verfahren bekannt. Hierbei ergeben sich deutliche Verbesserungen der Stickoxid-Emissionen gegenüber herkömmlichen Dieselbrennverfahren. Um eine ausreichende Homogenisierung zu erzielen, ist es hierbei nötig, die Einspritzdauer kürzer als den Zündverzug zu halten und damit kann dieses Verfahren im Teillastbereich vergleichsweise einfach betrieben werden. Mittels hoher und gekühlter AGR-Mengen, einer Reduktion des Kompressionsverhältnisses auf $\epsilon = 16, 0$, intensivem swirl⁴ sowie einer Einspritzung später als 20°KW nach OT konnte hierbei ein die Einspritzdauer übersteigender Zündverzug erzielt werden. Die späte Verbrennung führt dabei jedoch zu einem schlechten Wirkungsgrad mit unvollständigem Ausbrand und hohen CO-Emissionen.

Weberbauer et al. [WRK⁺05] verglichen frühe und späte Direkt-Einspritzstrategien bei unterschiedlichen Abgasrückführverfahren. Mit einem vollvariablen Ventiltrieb ließ sich im Wesentlichen durch den Hubverlauf des Einlaßventiles das tatsächliche Verdichtungsverhältnis variabel gestalten (*Millerbzw. Atkinson-Verfahren*). Damit konnte der Zündzeitpunkt und der Verbrennungsschwerpunkt gegenüber dem Serienventiltrieb um etwa 5°KW nach spät in den Bereich des thermodynamischen Optimums verschoben werden, welcher von den Autoren mit 7°KW nOT für die Schwerpunktlage angegeben wurde. Bei frühen Einspritzungen im Bereich 30...40°KW vOT konnte damit ein mit konventionellen Dieselmotoren vergleichbarer Kraftstoffverbrauch erzielt werden. Späte Einspritzungen dagegen wiesen schlechtere Wirkungsgrade auf, die durch die späte Brennlage sowie den daraus resultierenden niedrigen Ausbrandgrad und hohe uHC- sowie CO-Emissionen begründet wurden.

Zur Zündung von mageren Mischungen wurde auch auch eine *Kombination aus Saugrohr- und direkter Einspritzung* untersucht. Odaka et al. [OSKI99] beobachteten aufgrund des hohen Kompressionsverhältisses schon vor dem Einspritzen der zweiten Menge (um OT) zumindest eine teilweise Oxidation der ersten Ladung. Eine Erhöhung des früh eingespritzten Anteiles brachte hierbei deutliche Verbesserungen der Stickoxid-Emissionen, wobei die Ruß-Emissionen tendenziell mit der Saugrohreinspritzung zunahmen. Für die erste Einspritzung können hierbei zündunwillige, niedrigsiedende Kraftstoffe verwendet werden, um eine Entflammung vor dem gewünschten Brennbeginn sowie eine Saugrohr- und Zylinderbuchsenbenetzung mit Kraftstoff zu vermeiden. Eine Piloteinspritzung von zündwilligem Kraftstoff (beispielswei-



In Verbrennungsmotoren wird zwischen *swirl*, einer azimuthalen Gasbewegung um die Zylinderachse, und *tumble*, einer achsialradialen Gasbewegung, unterschieden.

se konventionellem Diesel) liefert dann einen gewünschten Druck- und Temperaturanstieg, der zur Zündung des Homogenanteiles führt. Ziel ist hierbei eine möglichst geringe Zündstrahlmenge, damit diese ebenfalls vorgemischt verbrennt oder zumindest die Abgas-Emissionen bei nicht zu vermeidender diffusiver Verbrennung nicht zu sehr in die Höhe treibt.

Zusammenfassend lässt sich für die Verwendung von Dieselkraftstoff bei der homogenen Kompressionszündung schließen, dass aufgrund von Schmierölverdünnung, von hohen HC-, CO- und Ruß-Emissionen bei der äußeren Gemischbildung eine innere Gemischbildung sinnvoll ist. Hierbei ist mittels einer geeigneten Einspritzkonfiguration auf eine möglichst geringe Zylinderwandbenetzung zu achten.

3.2.3 Abgasrückführung

Intensiv wurde der Einfluss der *Abgasrückführung* auf die homogene Kompressionszündung untersucht. Studien hierzu setzen meist einen variablen Ventiltrieb ein, um flexible Abgasraten einzustellen. Abhängig vom Basisbetriebspunkt kann hiermit ein breites Spektrum an Zielen erreicht werden:

- Die Verwendung von *heißem, ungekühltem Abgas* kann bei einem zündunwilligen Kraftstoff die Zündung entweder erst ermöglichen oder zumindest gewünscht nach früh verschieben. Machbar ist dies durch eine innere Abgasrückführung mittels deutlich negativer Ventilüberschneidung⁵, einem ungekühlen externen Umlauf oder einem Wiederansaugen von zunächst ausgeschobenen Abgasen [WRK⁺05], [BKHM05].
- Rezykliertes, *gekühltes* Abgas kann aufgrund des geringen Verhältnisses von isobarer zu isochorer Wärmekapazität, beim idealen Gas als Isentropenkoeffizient κ bezeichnet, der Bestandteile CO₂ und H₂O die Kompressionstemperatur senken.⁶ Damit lässt sich die Zündung nach spät

⁵Unter negativer Ventilüberschneidung versteht man den Fall, dass Auslass- und Einlass-Ventil(e) zeitlich nacheinander geöffnet werden; bei positiver Ventilüberschneidung überlappen sich die jeweiligen Phasen.

⁶Für die Gasphase ergeben sich im Bereich *T*=50...800°C, p_i =0,01...2,00 bar Werte von $\frac{c_p}{c_v}$ = 1,33...1,25 für Wasser bzw. $\frac{c_p}{c_v}$ = 1,28...1,18 für Kohlendioxid, Datenquelle [Nat].

verschieben, was bei zündwilligen Kraftstoffen wie Diesel in vielen Fällen erwünscht ist [VWWS05].

- Während der Verbrennung senkt die reduzierte Sauerstoffkonzentration die chemischen Reaktionsraten. Die Druckanstiegsrate lässt sich dadurch reduzieren und der Verbrennungsschwerpunkt verschiebt sich nach spät [Hul02].
- Eine inhomogene Abgasverteilung lässt sich nutzen, um mittels Temperatur- und Konzentrationsgradienten die räumlich fluktuierende Zündverzugszeit gezielt zu strecken [Dec05]. Damit lässt sich im Verbrennungsregime der sukzessiven Selbstzündungen die Durchbrenndauer erhöhen. Dies kann ebenfalls zur Reduktion der Druckanstiegsrate bzw. Verlagerung des Verbrennungsschwerpunktes genutzt werden.

3.3 Nutzung von Wasser bei der Verbrennung

Ein Blick zu verwandten Technologien zeigt, dass die Nutzung von Wasser bei der Verbrennung durchaus üblich ist. In Gasturbinen wird Wasser zur Leistungssteigerung und/oder zur Stickoxidreduktion eingesetzt [Sat03]. Besonders effektiv ist die Einspritzung in die Ansaugluft, da durch die Temperaturund die Druckabsenkung die Verdichtungsarbeit, besonders bei einer kontinuierlichen Verdampfung im Verdichter, reduziert wird [WM03]. Aufgrund der niedrigeren Eintrittstemperatur in die Brennkammer kann dann bei gleicher Turbineneintrittstemperatur und gleichen Stickoxid-Emissionen mehr Kraftstoff zugegeben werden. Neben der Einsparung von Verdichtungsarbeit führt der höhere Massen- und Volumenstrom durch die Turbine zu Leistungssteigerungen von typischerweise 10% bei einem Wirkungsgradverlust von 5% [Mat04].

Neben dem Einsatz in Stationärmotoren und Großschiffen werden Wasserzugabeverfahren auch für mobile Anwendungen untersucht und eingesetzt. Um Zusatzaufwand, -kosten, und -gewicht für das Mitführen von Wasser in einem vertretbaren Rahmen zu halten, werden bei mobilen Anwendungen oftmals Emulsionen eingesetzt. Bei der zusätzlichen Einbringung von Wasser ist besonders im Einspritzsystem ein erhöhter Verschleiß zu erwarten. Dieses Thema soll in Abschnitt 3.3.3 kurz diskutiert werden.

3.3.1 Einsatz von Wasser bei konventionellen Brennverfahren

Geschichtlicher Überblick

Sowohl die Idee als auch die tatsächliche Verwendung von Wasser in Verbrennungsmotoren reicht bis in die Zeit der ersten Motoren zurück. Güldner [Gül22] beschreibt einen Motor nach Bánki aus dem Jahr 1894, der mit Wasser-Kraftstoff-Verhältnissen von $\Omega = 2,33$ (niedrige Leistung)...5,34 (hohe Leistung) bei hohem Kompressionsverhältnis betrieben werden konnte und damit auf einen beträchtlichen effektiven Wirkungsgrad von bis zu 28% kam.

Von Beginn bis Mitte des 20. Jahrhunderts wurde mehrfach die Kühlung des Brennraumes zum Ersatz der üblichen Wasser-Mantelkühlung untersucht und eingesetzt. Hopkinson [Hop13] spritzte dafür Wasser im Brennraum direkt auf die Brennraumwände sowie die Kolbenoberfläche. Damit versuchte er zusätzlich, im Material thermische Spannungen zu reduzieren sowie Glühzündungen durch anhaftende Partikel zu vermeiden. Als angenehme Nebenerscheinung beobachtete er dabei eine abgemilderte Verbrennung. Noch weiter geht Le Mesurier [LM]. In seiner Patentanmeldung von 1924 proklamiert er, dass mittels Wassereinspritzung eine ausreichende Kühlung von Verbrennungsmotoren zur Vermeidung von Klopfen und Glühzündungen erfolgen kann. Den Ersatz der Mantelkühlung untersuchten auch Lestz et al. [LMR75] für Motoren militärischer Fahrzeuge. Um die gesamte Kühlung des Motors durch Wassereinspritzung zu gewährleisten, waren dabei Wasser-Kraftstoff-Verhältnisse von $\Omega \approx 3$ für Einspritzzeitpunkte während des Ansaugtaktes bis hin zu $\Omega \approx 5$ während des Arbeitstaktes nötig. Die Kühlung durch Wassereinspritzung wurde dann auch bei aufgeladenen Flugmotoren eingesetzt [Sch51], wo die Kühlwirkung zur zusätzlichen Kraftstoffzugabe und somit Leistungssteigerung genutzt wurde.

Nachdem zunächst Kühlung und Leistung im Vordergrund der Untersuchun-

gen standen, wurde ab den 1960er Jahren verstärkt auch der positive Effekt der Wasserzugabe auf die Stickoxid-Emissionen betrachtet.

Bei *Ottomotoren* wurde die Zugabe von Wasser intensiv zur Reduzierung der Klopfneigung untersucht. Harrington [Har83] stellte in seiner ausführlichen Studie zur Wasserzugabe in den Vergaser einen erhöhten Zündverzug sowie sanfteren Druckanstieg fest, wodurch die Zündung bei gleicher Klopfneigung früher stattfinden kann. Die NO-Emission wurde dabei drastisch reduziert.

Verwendung von Emulsionen

In *Dieselmotoren* wurde neben einer separaten Wasserzufuhr auch intensiv der Nutzen von Emulsionen betrachtet. Bei konventionellem Einspritzzeitpunkt um OT kann die Einspritzung in das heiße, komprimierte Gas die Temperatur des flüssigen Wassers in den überkritischen Bereich ansteigen lassen. Die metastabilen Tröpfchen oder Tröpfchengruppen verdampfen dann schlagartig und reißen zusätzlich Kraftstoff aus dem Spray heraus. Diesen als Mikroexplosionen bezeichneten Vorgang beobachteten Sheng et al. [SCW95] an der Sprayspitze und am Sprayrand. Flüssige Anteile wurden mehrere Millimeter aus dem Spray geschleudert und intensivierten damit den Mischprozess. Park et al. [PHP00] sahen beim Ersatz von reinem Diesel durch Emulsionen mit einem Wassergehalt von $\Omega = 0,40$ eine deutlich geringere Lumineszenzintensität sowie eine Veränderung von gelblicher zu dunkelroter Farbe. Die Autoren führen dies auf eine geringere Rußbildung und eine niedrigere Temperatur zurück, die auf einem längeren Zündverzug und somit besserer Homogenisierung beruht. Die signifikante Verlängerung des physikalischen Zündverzuges wurde auch von Born [Bor01] bestätigt. Mittels Emissions-Spektroskopie zeigte sich einerseits eine deutlich langsamere Rußbildung, jedoch andererseits auch eine deutlich langsamere Rußoxidation. Die resultierenden Ruß- und NOx-Emissionen sind insgesamt geringer, wobei der Trend durch Zugabe von geringen Mengen Wasserstoffperoxid H₂O₂ zum Wasser noch verstärkt wurde. Eine getrennte Einspritzung von H₂O₂ ohne Wasser brachte zwar Vorteile beim Ruß, nicht jedoch bei den Stickoxiden.

Neben diesen Grundlagenuntersuchungen finden sich viele Publikationen zum Emulsionseinsatz bei Schwerlastmotoren. Ohne weitere Anpassungsmaßnahmen – lediglich mit verlängerter Einspritzdauer für eine konstante Kraftstoffmenge – kann der Ersatz von Diesel durch Emulsionen deutliche Vorteile bei Ruß- bzw. Stickoxid-Emissionen erzielen (Matheaus et al. [MRD⁺02]). Bertola et al. [BLB03] ermittelten für diese Strategie eine intensivere Ruß- und NO_x-Absenkung als für den Fall der konstanten Einspritzdauer bei angepasstem Raildruck. Sie konnten dabei für unterschiedliche Lasten einen linearen Verlauf der *NO_x-Absenkung von etwa 1% für jedes Massen-% Wasserzugabe zum Kraftstoff* feststellen. Dieser Zusammenhang wurde auch von Wachtmeister [Wac04] bestätigt. Während Bertola et al. eine Rußabsenkung von ca. 70% bei $\Omega = 0,302$ beobachteten, war die Veränderung der Ruß-Emission bei den Versuchen von Wachtmeister nicht messbar. Während COund uHC-Emissionen meist (siehe z.B. [MRD⁺02]) ansteigen, ist der Trend im Wirkungsgrad dagegen uneinheitlich.

Getrennte / geschichtete Einspritzung

Bei großen Schiffsdieselmotoren ist die Nutzung von Wasser zur Reduzierung der Stickoxid-Emissionen heutzutage weit verbreitet. Beispielsweise produziert L'Orange für die direkte Wassereinspritzung Doppelnadel-Common-Rail-Diesel-Wasser-Injektoren, die typischerweise im Bereich von $\Omega = 0, 50...0, 70$ betrieben werden [JDA00]. Bedford et al. [BRD⁺00] untersuchten die geschichtete Kraftstoff-Wasser-Direkteinspritzung. Hierbei wurde eine im Vergleich zur reinen Kraftstoffeinspritzung um etwa 35% höhere Strahleindringtiefe festgestellt, die auf der hohen Verdampfungsenthalpie des Wassers beruht. Die Zündung konnte bei $\Omega = 0, 45$ um etwa 10°KW verschleppt werden, wodurch sich mittlere und maximale Temperatur senkten und somit auch geringere NO_x-Emissionen folgten. Bei mittlerer Last verbesserte sich dadurch die Lage des Verbrennungsschwerpunktes und somit auch der Wirkungsgrad; bei hohen Lasten wurde diese zu weit verschleppt, was sich negativ auf den Wirkungsgrad auswirkte.

Ansaugluftbefeuchtung

Wie in Abschnitt 6.2 gezeigt werden wird, kann die Temperatur im Brennraum besonders effektiv gesenkt werden, wenn Wasser sehr früh zur Ladung gegeben wird. Entsprechend hoch ist das Potenzial zur NO_x -Absenkung mit dieser

Maßnahme. Technische Systeme arbeiten mit einer Befeuchtung der Ansaugluft im Bereich $\Omega = 2...3$. Die damit erzielten Reduktionsraten der Stickoxid-Emissionen bewegen sich zwischen 50% [KJ07] und 75% [RLH02]. Wachtmeister [Wac04] beobachtete im Vergleich zu alternativen Wasserzugabemethoden mit der Ansaugluftbefeuchtung die höchste NO_x-Reduktion. Nachteilig stellt sich bei dieser Methode der hohe Volumenbedarf sowie Anlagenkosten für den Luftbefeuchter dar.

3.3.2 Einsatz von Wasser bei der homogenen Kompressionszündung

Die erste Publikation zur Nutzung von Wasser bei der homogenen Kompressionszündung stammt von Christensen und Johansson [CJ99]. Nach einem elektrischen Lufterhitzer wurden Kraftstoff und Wasser im Saugrohr zugegeben. Die Verdampfung stellte hierbei eine große Schwierigkeit dar: Ohne Vorheizung der Ansaugluft hatten auch große Mengen an Wasser ($\Omega > 2,5$) praktisch keinen Einfluss auf den Brennverlauf. Mit Vorheizung konnte bei $\Omega \approx 0,5$ der Zündbeginn um ca. 5°KW verschleppt und die Druckanstiegsrate auf etwa ein Drittel reduziert werden. In Folge sank auch der Maximaldruck und die Maximaltemperatur ab, wodurch sich die Stickoxid-Emissionen etwa um 80% verbesserten. Der Anstieg der uHC-Emissionen wurde teilweise auf die schlechte Verdampfung des Kraftstoffs bei hohen Wassereinspritzmengen zurückgeführt.

Kaneko et al. [KAOM02] kombinierten eine Saugrohreinspritzung eines leichten Erdöldestillates⁷ mit einer Wasser-Direkteinspritzung. Die Variation des Wasser-Einspritzzeitpunktes brachte bei 60°KW vOT die stärkste Reduktion der Druckanstiegsrate. Bei frühen Einspritzungen war die Wirkung geringer, was auf die Benetzung der Zylinderwand zurückgeführt wurde, die auch einen messbaren Wassereintrag ins Schmieröl lieferte. Einspritzungen, die erst nach Zündung der Kalten Flamme stattfanden, waren praktisch wirkungslos.

Aus der Betrachtung der Literatur lassen sich zusammenfassend einige Schlüsse für die Nutzung von Wasser ziehen:

⁷Nach ersten Versuchen mit Diesel wurde aufgrund intensivem Kraftstoffeintrag ins Schmieröl sowie hohen uHC-Emissionen das leichtsiedende Naphtha verwendet.
- Während anfänglich der Ersatz der üblichen Wasser-Mantelkühlung durch Direkteinspritzung von Wasser untersucht wurde, ist dies aufgrund der hohen nötigen Wassermengen aus dem Fokus geraten. Derzeit wird die Wasserzugabe vor allem aus Emissionsgründen angedacht oder eingesetzt.
- Aufgrund des geringeren Systemaufwandes an Bord werden in Fahrzeuganwendungen primär stabilisierte Emulsionen eingesetzt. Für Schiffsmotoren sind darüber hinaus getrennte bzw. geschichtete Einspritzungen von Wasser sowie die Ansaugluftbefeuchtung im Feld anzutreffen.
- Neben eigenen Publikationen zur Kombination der homogenen Kompressionszündung mit Wasserzugabeverfahren sind dem Autor nur die Arbeiten von Christensen und Johansson [CJ99] und Kaneko et al. [KAOM02] bekannt. Dabei erwies sich eine Saugrohreinspritzung des Wassers ohne eine intensive Ansaugluftvorheizung als wirkungsarm, da das Wasser nicht im erforderlichen Maße verdampfte. Eine Direkteinspritzung kann nur in einem begrenzten Zeitfenster stattfinden, um einerseits Wassereintrag ins Schmieröl zu vermeiden und andererseits noch rechtzeitig vor der Zündung zu kühlen.

Während die homogene Kompressionszündung bei niedriger und mittlerer Last schon intensiv erforscht wurde, sind deren Probleme bei hoher Last – im Wesentlichen der Anstieg der Druckanstiegsrate, das Auftauchen von Druckoszillationen, die zunehmenden Ruß- und NO_x -Emissionen – bislang ungelöst. Auf der anderen Seite sind die vorteilhaften Auswirkungen des Wassers bei konventionellen Brennverfahren, die im Wesentlichen auf der Kühlung durch die hohe Verdampfungsenthalpie beruhen, bekannt. In dieser Arbeit wird in Folge aufgezeigt, wie sich die Wasserzugabe auf die homogene Kompressionszündung auswirkt und in welchem Maße die beschriebenen Nachteile reduziert werden können. Die Kombination von homogener Kompressionszündung mit Kraftstoff-Wasser-Emulsionen wird hierbei zum ersten Mal untersucht.

3.3.3 Verschleiß

Verschleiß umfasst die Materialbeanspruchung durch tribologische Beanspruchung, Erosion, Kavitation, Korrosion sowie daraus abgeleitete Mischformen. Gegenüber Dieselkraftstoff weisen die Stoffeigenschaften von Wasser deutliche Nachteile bei mehreren dieser Verschleißarten auf. Im Bereich des Einspritzsystems treten dabei folgende Schädigungsmöglichkeiten auf:

- Die niedrige Viskosität verringert die Schmierwirkung zwischen bewegten Teilen und erhöht damit die tribologische Beanspruchung.
- Der höhere Dampfdruck von Wasser im Vergleich zu den v.a. langkettigen Kohlenwasserstoffen im Dieselkraftstoff (siehe Abbildung 2.4) erhöht die Kavitationsneigung.
- Die korrosive Wirkung von Wasser führt bei konventionellen Werkstoffen im Bereich des Einspritzsystems zur Rostbildung.

Birkenhagen [Bir00] stellte fest, dass die hohen Festigkeitsanforderungen im Einspritzsystem durch rostfreie Stähle nur schwer erfüllt werden können und auch damit ein selektiver Korrosionsangriff nicht sicher auszuschließen ist. Als guter und ausreichender Korrosionsschutz im Bereich des Einspritzsystems stellte sich dagegen die Zugabe von emulgierbaren Korrosionsschutzmitteln zum Wasser dar. Bereits bei einer Zugabe von 0,1 % Korrosionsschutzöl wurde die Korrosion soweit reduziert, dass nach einem Dauerlauf (2,4·10⁶ Einspritzungen) keine Funktionsstörungen zu beobachten waren.

Neben Verschleiß im Einspritzsystem könnte bei Motorstillstand kondensierendes Wasser auch in anderen Motor- oder Abgaskomponenten zu erhöhter Korrosion beitragen. Bei Wasser-Direkteinspritzverfahren scheint der Unterschied zu konventionellen Brennverfahren jedoch gering, da zum einen nach Unterbrechen der Einspritzung während der Auslaufphase des Motors eine Spülung erfolgt und zum anderen die Abgase jeglicher Verbrennung Wasser beinhalten. Zur Vermeidung von Korrosion im Bereich des Kurbelgehäuses wird in der vorliegenden Arbeit der Eintrag von Wasser in das Schmieröl minimiert bzw. ausgeschlossen, siehe z.B. Abschnitt 6.4.5.

4 Experimenteller Aufbau und applizierte Messtechnik

4.1 Einhubtriebwerk

In dieser Arbeit kommt ein Einhubtriebwerk¹ zum Einsatz, welches am Lehrstuhl für Thermodynamik als flexibles Werkzeug zur Untersuchung der Dieselverbrennung im automobilen Maßstab ($d_{Zyl} = 78,3$ mm) aufgebaut wurde [EOM01]. Das Funktionsprinzip beruht auf einer größeren Anlage, die im Rahmen einer Studie zur Wasserstoffverbrennung in Großdieselmotoren mit einem Zylinderdurchmesser von $d_{Zyl} = 240$ mm entwickelt worden war [Dor00].



Abbildung 4.1: Schnitt durch das Einhubtriebwerk, A: Unterer Totpunkt, B: Oberer Totpunkt

¹Im englischen Sprachraum wird diese Maschine als *rapid compression and expansion machine*, kurz RCEM, bezeichnet. Es grenzt sich durch die Simulation der Kompressions- und Expansionsbewegung von einer *rapid compression machine*, kurz RCM, ab, bei welcher der Kolben nach der Kompressionsphase am Oberen Totpunkt verharrt.

Das Einhubtriebwerk zeichnet sich durch einen vibrationsarmen Betrieb aus, der aus der gegenläufigen Bewegung eines konzentrisch zum eigentlichen Kolben 3 angeordneten Massenausgleichsgewichtes 7 resultiert. Dieses befindet sich zu Versuchsbeginn nahe der Druckluft-Einlässe 6. Die Druckluft wirkt auf das Massenausgleichsgewicht und übt damit Druck auf das Hydrauliköl im Volumen 9 aus. Nach Freigabe des Schusses durch Öffnen von Ventil 13 wird die Pleuelstange 8 und damit auch der Kolben beschleunigt, wobei zunächst das Öl bis zum Verlassen der Blende 10 nur gedrosselt über Bohrung 12 überströmt. Pleuelstange und Kolben werden durch den sich aufbauenden Kompressionsdruck im Brennraum 4 sowie die definierte Scherströmung beim Einfahren des Ausgleichgewichtes in die Blende 10 wiederum abgebremst. Am Oberen Totpunkt wird durch den Brennraumdruck eine Expansionsbewegung induziert, anschließend schwingen die bewegten Teile stark gedämpft aus.

Basierend auf diesem Grundprinzip können nun verschiedene Effekte untersucht werden:

- Eine *Aufladung* lässt sich durch einen erhöhten Brennraumdruck zu Versuchsbeginn sehr einfach simulieren.
- Die Festlegung unterschiedlicher Positionen des Stellkolbens 11 bzw. das Einfügen von Verlängerungsstücken zwischen Pleuelstange 8 und Kolben 3 variiert die Position des Kolbens am Unteren Totpunkt und damit das *Verdichtungsverhältnis* ϵ .
- Die *simulierte Drehzahl* wird durch Anpassung des Antriebsdruckes, des Volumens zusätzlich montierbarer Behältnisse an den Einlässen 6 sowie der Eintauchtiefe des Ausgleichgewichtes in Blende 10 modifiziert.
- Das Einblasen von Gas (Luft / Mischung von Luft mit synthetischem Abgas) via Dralleinlässe 2 in einer frühen Phase der Kompressionsbewegung induziert eine *Drallströmung* im Brennraum.
- Durch den modularen Aufbau kann die *Kolbengeometrie* einfach geändert werden.

Da entgegen einem gewöhnlichen 4-Takt-Motor im Zylinderkopf 1 keine Ventile angebracht sind, steht hier viel Bauraum zur Verfügung. Dieser wurde beispielsweise zur Positionierung eines zweiten Injektors genutzt, siehe Abbildung 4.2, der für die getrennte Einspritzung von Kraftstoff und Wasser benötigt wurde. Daneben zeigt die Abbildung eine Skizze des Kolbens mit einer Bezeichnung der einzelnen Oberflächen.



Abbildung 4.2: A: Kolben mit Kolbenmulde, B: Positionierung von Diesel- und Wasser-Injektor bei getrennter Einspritzung

Der Kolben ist an die Geometrie einer ω -Mulde eines Dieselmotors angelehnt. Wie sich in Abbildung 4.3 erkennen lässt, wurde hierfür ein kleiner Glas-Zylinder koaxial auf einen größeren aufgeklebt. Sämtliche Glasoberflächen sind damit entweder parallel oder senkrecht zur Zylinderachse angeordnet. Die Bilder der in Abschnitt 4.3.2 beschriebenen Messtechniken geben somit die Vorgänge im Brennraum verzerrungsfrei wieder, womit die Auswertung und Analyse der Ergebnisse wesentlich vereinfacht wird. Der optisch zugängliche Bereich entspricht dem Muldendurchmesser von $d_{opt} = 49,3$ mm. Die Kolbenringe sind verhältnismäßig weit von der Kolbenkrone entfernt, damit diese in ihrem Bewegungsablauf die Teilungsstelle der Laufbuchse, die zum Öffnen der Anlage nötig ist, nicht überfahren. Der aus Teflon gefertigte 3. Kompressionsring dichtet das – im Fall der Aufladung unter Druck befindliche – Brennraumgas vor Versuchsbeginn ab.

Durch das Funktionsprinzip der Maschine kann eine – simulierte – Drehzahl



Abbildung 4.3: Kolben mit Glaseinsatz und Dichtringen

nicht direkt gemessen werden, sondern wurde aus der Kolbenbewegung im relevanten Bereich von der Einspritzung bis nach der Verbrennung ermittelt. Die Temperatur ist die zentrale thermodynamische Zustandsgröße für Wärme- und Stoffübertragung sowie die Kinetik. Aus der Abweichung der Kolbenbewegung zu derjenigen eines Realmotors lässt sich das Verhältnis der Temperatur im Einhubtriebwerk T_{EHT} zu derjenigen im Realmotor T_{RM} abschätzen², siehe Abbildung 4.4. Die simulierte Drehzahl wurde nun durch iterative Minimierung der mittleren Temperaturdifferenz ΔT ermittelt, die sich aus den gemessenen und berechneten Werten *i* im betrachteten Kurbelwinkelbereich $\theta_{min}...\theta_{max}$ mit der Gesamtzahl von n_{ges} Messpunkten in diesem Bereich gemäß

$$\Delta T = \sqrt{\frac{1}{n_{ges}} \cdot \sum_{i} \left(T_{i,EHT} - T_{i,RM} \right)^2}$$
(4.1)

ergibt.

4.2 Einspritzsysteme

Wie in Abschnitt 3.3.3 aufgeführt wurde, stellt die Nutzung von Wasser spezielle Anforderungen an das Einspritzsystem. Deshalb wurden die Standard

²Hierfür wurde ein Polytropenexponent von n = 1,37 angenommen.



Abbildung 4.4: Experiment: Hubverlauf und Temperaturverhältnis

Common-Rail-Komponenten nur für die Verwendung von reinem Dieselkraftstoff – sowohl bei dem Betrieb gänzlich ohne Wasser als auch bei der getrennten Einspritzung – genutzt. Die Standard Common Rail Anlage der 1.Generation besteht aus einem Kraftstofftank, der Vor- und Hochdruckpumpe, dem Rail sowie einem elektromagnetisch betätigten sogenannten Solenoidinjektor. Hochdruckpumpe, Rail und Injektoren stammen von der Firma Bosch.

Der Einspritzdruck des Wassers sowie der Emulsion wurde mittels einer selbstentwickelten *Druckwaage* aufgebaut. Der Druckübersetzungskolben mit einem Flächenverhältnis von 10:1 wird mit Druckluft angetrieben und wurde hochdruckseitig bis zu einem Druck von 1000 bar ausgelegt. Auch für die wasserhaltigen Medien wurde ein gewöhnlicher Common Rail Injektor eingesetzt, der nach der geringen Anzahl an Einspritzungen bei der Verwendung im Einhubtriebwerk keine Fressspuren zeigt.

Düsen

Tabelle 4.1 gibt die Eigenschaften der 3 untersuchten Düsen wieder und gibt zudem eine Übersicht, welche Düsen bzw. Düsenkombinationen im Fall der getrennten Einspritzung bzw. der Emulsionseinspritzung in Experiment und Simulation zum Einsatz kommen werden. Die Düsen sollen nachfolgend kurz mit "K" (konventionell) bzw. "E" (erodiert) sowie der Lochanzahl (6/12) abgekürzt werden:

Beschreibung	Symbol	Einheit	Düse K6	Düse E6	Düse E12
Schema			70°	70°	70°
Bearbeitung Düsenkuppe			-	erodiert	erodiert
Lochanzahl	n_{Loch}	[-]	6	6	12
Lochform			zylindrisch	zylindrisch	zylindrisch
Gesamtspraywinkel	$\Psi_{SW,ges}$	[°]	70	70	70
Lochdurchmesser Düse	D	[mm]	0,135	0,100	0,100
Minisacklochdurchm.	D_S	[mm]	0,6	0,6	0,6
Länge/Durchm. Loch	L/D	[-]	7,5	4	4
GE, Experiment, Krst. GE, Experiment, Wasser			x x		
GE, Experiment, Krst.				Х	
GE, Experiment, Wasser					Х
GE, Simulation, Krst.				Х	
GE, Simulation, Wasser					X
Emulsion, Experiment					X
Emulsion, Simulation					X

 Tabelle 4.1: Übersicht der verwendeten Düsen (GE : Getrennte Einspritzung)

- K6 Basis ist eine 6-Loch-Düse mit zylindrischen Löchern, Durchmesser D = 0,135 mm. Die Lochausführung ist somit konventionellen Dieseleinspritzdüsen ähnlich und weist einen hohen Sprayimpuls bei geringem Spraykegelwinkel und geringer Lufteinmischung auf.
- E6 In einer Variation wurde die Düsenkuppe der Basisdüse erosiv bearbeitet. Dies hat zum einen ein reduziertes Längen- zu Durchmesser-Verhältnis ($L/D \approx 4$) zum anderen einen ausgefransten Rand der Lochenden zur Folge. Beide Auswirkungen erhöhen die Spraykegelwinkel und somit die Lufteinmischung in die Sprays, womit die Gleichverteilung der Medien im Brennraum erhöht wird.
- E12 Um die Gleichverteilung weiter zu erhöhen, wurde als dritte Düse eine erodierte 12-Loch-Düse mit einem Lochdurchmesser von D = 0,10 mm verwendet.

Zwischen den Konfigurationen variiert somit der totale Düsenquerschnitt. Zur Erzielung einer konstanten Einspritzmenge unterscheidet sich deshalb die Einspritzdauer, da der Einspritzdruck bei allen Versuchen einheitlich zu 800 bar eingestellt wurde.

4.3 Messtechnik

4.3.1 Standard-Messtechnik

Die Positionsbestimmung des Kolbens wurde über eine berührungslose magnetische Abtastung eines Strichlineales (AMO, PMK-02-25) durchgeführt. Die Genauigkeit beträgt hierbei $\Delta x = 0,04$ mm. Der Zylinderdruck wurde mit einem piezo-elektrischen Druckaufnehmer (Kistler, 7061B) in Verbindung mit einem Ladungsverstärker (Kistler, 5011) bei einer Aufzeichnungsrate von f = 60,2 kHz aufgenommen. Dieser Druckaufnehmer zeichnet sich durch gute Thermoschockstabilität aus. Dessen Kühlung konnte aufgrund der konstanten Temperatur der Anlage von 100°C, die durch die einzelnen Versuche nur unmerklich beeinflusst wird, entfallen. Die Beheizung der Anlage erfolgte mittels Heizmanschetten, die Temperatur wurde über eine Messung am Zylinderkopf auf 100°C geregelt. Um eine möglichst gleichmäßige Temperierung zu erzielen, wurde der Kolben während der Aufheizphase im Bereich der Heizmanschetten positioniert.

4.3.2 Optische Messtechnik

In dieser Arbeit kommen zwei unterschiedliche, optische Verfahren zum Einsatz. Die Aufzeichnung der Bilder erfolgte mit einer Hochgeschwindigkeitskamera (Kodak Ektapro 4540, gewählte Aufnahmerate 13.500 Hz, Bildauflösung 128 x 128 Pixel).

Chemilumineszenz

Unter Chemilumineszenz versteht man die als Lichtstrahlung abgegebene Energie von Gasmolekülen, die aus einem – beispielweise durch chemische Reaktionen – angeregten Zustand in ihren Grundzustand oder allgemein ein niedrigeres Energienieveau übergehen. Die abgegebene Energie ist dabei über das Planck'sche Wirkungsquantum h direkt an eine charakteristische Frequenz f gebunden, beispielsweise im Falle des angeregten OH^{*}-Moleküles:

$$OH^* \to OH + h \cdot f$$
 (4.2)

Chemilumineszenz wird vielfach eingesetzt, um optisch und damit störungsfrei die Wärmefreisetzung lokal oder integral zu ermitteln. Problematisch ist hierbei, dass die Entstehung der angeregten Moleküle tendenziell meist nicht auf dem Hauptpfad der chemischen Kinetik liegt. Zudem wird die Deutung der Ergebnisse dadurch erschwert, dass die Chemilumineszenz ein über die Messstrecke integrierendes Verfahren darstellt, welches durch turbulente Fluktuationen sowie Gradienten der Luftzahl beeinflusst wird.

Messungen mittels Chemilumineszenz wurden sowohl im Bereich der OH*bzw. CH*- Banden, als auch integral durchgeführt. Zur spektralen Filterung wurden Farbglasfilter der Firma Schott eingesetzt, womit eine Halbwertsbreite von etwa 20 nm...35 nm erzielt wurde. Im Falle der OH*-Banden im Wellenlängenbereich um 308 nm kam ein UG11-Filter zum Einsatz, für die CH*-Banden um 430 nm wurden die Filter BG25 und GG420 kombiniert.

Schattenmesstechnik

Die Schattenmesstechnik beruht auf der Ablenkung von Licht durch eine Änderung des räumlichen Brechungsindex, siehe Abbildung 4.5. Diese Gradienten im Brechungsindex können sich sowohl durch Dichtegradienten, als auch durch Tropfen im Messvolumen ergeben. In der Skizze ist gut ersichtlich, dass die Schattenmesstechnik die einzelnen Vorgänge im Messvolumen in Sichtrichtung aufintegriert und somit die Information in Achsrichtung des Lichtstrahles verloren geht.

Für Tropfen ist in der Skizze B ersichtlich, dass Lichtstrahlen zum einen beim Eintritt in den Tropfen und zum anderen beim Austritt aus dem Tropfen abgelenkt werden. Trifft der Strahl mit dem Winkel ψ_{ein} gegenüber der lokalen Oberflächennormalen auf, so wird er gemäß dem optischen Brechungsgesetz



Abbildung 4.5: Skizze der Schattenmesstechnik sowie der Lichtreflexion und -brechung am Einzeltropfen

im optisch dichteren Medium³ zur Normalen hin gebrochen:

$$\frac{\sin\psi_{ein}}{\sin\psi_{aus}} = \frac{n_d}{n_{\infty}}$$
(4.3)

Neben der Brechung des transmittierten Strahles kommt es an jeder Phasengrenze auch noch zu einer teilweisen Strahlreflexion. Der austretende Strahl schließlich ist in der Intensität gegenüber dem Strahleintritt deutlich geschwächt und weist zudem einen Ablenkwinkel $\psi_{A,d}$ zum eintretenden Strahl auf. Die Abschwächung der Lichtintensität durch Reflexion und Strahlablenkung macht deutlich, dass Einzeltropfen und damit auch Tropfenfelder den Lichtweg von der Quelle zum Empfänger äußerst intensiv abschatten.⁴ Die Intensität des von der Lichtquelle emittierten Lichtes wird somit stark reduziert, wodurch Tropfenfelder bei der Aufzeichnung mittels Schattenmesstechnik dunkel erscheinen.

Neben dieser Ablenkung an Tropfen oder Tropfenfeldern stellen sich bei

³Der Brechungsindex n_d ist im optisch dichteren Medium größer als in der Umgebung n_{∞} . Für Luft beträgt dieser $n_{Luft} \approx 1,000$, für Wasser $n_{H_2O} \approx 1,333$ und für den in der Emulsion enthaltenen Dieselkraftstoff $n_{Diesel} \approx 1,438$, siehe Stoffwertetabelle A.5 im Anhang.

⁴In dieser Betrachtung wurde derjenige Lichtstrahl vernachlässigt, der den Tropfen zentral trifft, somit keinen Winkel zur Oberflächennormalen aufweist und in Folge auch nicht abgelenkt wird. Aufgrund der teilweisen Reflektion schattet der Tropfen jedoch auch für diesen Lichtstrahl die Kamera ab.

Konzentrations- oder Dichtegradienten Fluktuationen des Brechungsindex ein, wobei Gradienten schräg zum Lichtweg zur Ablenkung der Lichtstrahlen führen. Ohne scharfe Phasengrenze fluktuiert in diesem Fall der Brechungsindex über einen größeren räumlichen Bereich. Die Unterschiede im Brechungsindex und in Folge im Ablenkwinkel $\psi_{A,\varrho}$ sind dabei zwar deutlich geringer als im Falle des Überganges in eine Flüssigkeit, aber dennoch vorhanden. Platziert man die Kamera in großer Distanz zum Messvolumen (Brennraum) – in der tatsächlichen Anordnung größer als 1 m – erhöht man die Sensitivität des Schattenverfahrens, da schon um kleine Winkel abgelenkte Lichtstrahlen das Sichtfeld der Kamera verfehlen und somit nicht mehr detektiert werden können.

Die Detektion von Gradienten des Brechungsindex durch die Schattenmesstechnik wird von Licht überlagert, welches im Brennraum durch Chemilumineszenz und/oder Rußstrahlung entsteht. Während die Intensität der Chemilumineszenz üblicherweise deutlich geringer als die Beleuchtungsintensität durch die Lichtquelle des Schattenaufbaus ist, liefert die Rußstrahlung einen ersichtlichen Beitrag.



Abbildung 4.6: Einhubtriebwerk mit applizierter Schattenmesstechnik

Abbildung 4.6 zeigt die Schattenanordnung am Einhubtriebwerk. Das von einem Argon-Ionen-Laser erzeugte Licht wird durch einen akusto-optischen Modulator AOM synchron mit der Kamera getaktet. Dessen Öffnungsdauer wurde zu 30 μ s...50 μ s eingestellt und ist somit kürzer als die Belichtungs-

zeit der Kamera in Höhe von 74 μ s. Die Bildschärfe wurde dadurch bei hohen auftretenden Fluidgeschwindigkeiten während der Einspritzung erhöht. Anschließend wird das Licht aufgeweitet und in den Brennraum geleitet. Es durchdringt diesen vor und nach der Reflektion am Zylinderkopf zweimal, bevor es mit der Kamera aufgezeichnet wird.

Zusammenfassend lässt sich schließen, dass mittels Schattenmesstechnik der gesamte Prozess von der Kraftstoffeinbringung über die Verdampfung bis einschließlich Verbrennung in einer Sequenz abgebildet werden kann.

4.3.3 Abgasmesstechnik

Die Emissionsmessung ist am Einhubtriebwerk aufgrund der geringen Abgasvolumina im Vergleich zu einem kontinuierlich arbeitenden Motor nur erschwert durchführbar. Zur Messung der Emissionen kamen deshalb elektrochemische Sensoren zum Einsatz, wobei auf eine gute Ansprechzeit bei gleichzeitig geringer Querempfindlichkeit geachtet wurde. Diese Sensoren sind auf eine maximal zulässige Betriebstemperatur von ca. 60°C beschränkt, was auch die Temperierung des Abgasstranges limitiert. Dennoch konnte auch bei dieser Temperatur die Kondensation von Wasser verhindert werden.⁵ Dagegen gestaltet sich die Messung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen schwierig. Langkettige Kohlenwasserstoffe können schon bei deutlich höheren Temperaturen kondensieren und stehen deshalb für eine Analyse nicht zur Verfügung. Zur Anwendung kamen Sensoren der Firma International Technologies Dr. Gambert GmbH zur Ermittlung von Stickstoffmonoxid NO und des Restsauerstoffgehaltes O₂.

Die Messung von Ruß erscheint im Einhubtriebwerk praktisch unmöglich, da die Dauer zwischen Versuch und Messung im Abgasstrang sowie die dabei vom Abgas überstrichene Oberfläche groß sind. Eine Ablagerung von Ruß ist bei diesen Bedingungen wahrscheinlich, womit die Messung von Ruß-Emissionen verfälscht wird. Die Rußkonzentration während der Verbrennung

⁵Beispielsweise stellt sich bei einer in dieser Arbeit nicht unterschrittenen Luftzahl von $\lambda = 2,0$ und einem nicht übertroffenen Wasser-Kraftstoff-Verhältnis von $\Omega = 1,5$ eine Kondensationstemperatur von 51°C ein.

wurde qualitativ aus den Lumineszenzintensitäten der mittels Schattenmesstechnik durchgeführten Messungen ermittelt. Dies basiert auf der Annahme, dass die Lumineszenz mit der Rußkonzentration korreliert. In Abschnitt 2.4.3 wurde gezeigt, dass aufgrund weiterer Oxidation nach der Hauptwärmefreisetzung die Ruß-Emission im Abgas deutlich niedriger ausfällt als die Rußkonzentration während der Verbrennung. Die über die Lumineszenz beobachtete Rußkonzentration scheint sich bei einem identischen Brennverfahren aufgrund vergleichbarer Nachoxidation bei den jeweiligen Versuchen als Maß für die Ruß-Emission zu eignen.

5 Numerische Simulation

Durch Experimente unter Verwendung der Schattenmesstechnik kann ein guter optischer Eindruck der gesamten Sequenz von der Einspritzung über die Homogenisierung bis hin zur Verbrennung gewonnen werden, siehe Kapitel 6. Damit lassen sich beispielsweise makroskopische Spraygrößen ermitteln. Vergleichsweise einfach lassen sich zudem der Druck im Brennraum sowie die wichtigen Emissionswerte von CO, NO, NO₂ sowie O₂ quantifizieren. Die quantitative, orts- und zeitaufgelöste Bestimmung vieler weiterer Größen ist jedoch praktisch unmöglich. In dieser Arbeit kam deshalb die mehrdimensionale numerische Simulation zum Einsatz, die mit vertretbarem Aufwand weitere Informationen – beispielsweise die Verteilung von Kraftstoff und Wasser zum Zündzeitpunkt – liefert.¹ Basis ist hierfür eine dreidimensionale Berechnung der Strömung in einem Brennraumsektor. Die Berechnungen erfolgen mit der für technische Anwendungen bewährten Simulationsplattform STAR-CD, Version 3.26, der Firma CD-Adapco.

Die Berechnung basiert auf der sogenannten *R*eynolds-*A*veraged-*N*avier-Stokes (RANS) Aufspaltung der Strömungsgrößen in Mittelwert und turbulente Fluktuation. Zur Lösung des Problems werden durch die Aufspaltung zusätzliche Gleichungen benötigt, die sich durch die Einführung der turbulenten kinetischen Energie *k*, der turbulenten Dissipationsrate ϵ , der turbulenten Viskosität η_t sowie einem Turbulenzmodell ergeben. In dieser Arbeit kommen dabei die Konstanten der Standardform des *k*- ϵ -Turbulenzmodelles in Verbindung mit algebraischen Wandfunktionen zur Verwendung.

In diesem Kapitel sollen die wichtigsten implementierten Funktionen bzw. Einstellungen im Basiscode beschrieben werden. Die Herleitung der theo-

¹Als *numerische Simulation* sollen in dieser Arbeit mehrdimensionale Betrachtungen bezeichnet werden. Diese grenzen sich deutlich von 0-dimensionalen Berechnungen ab, die mit dem Begriff *reaktionskinetische Untersuchung* benannt sind.

retischen Grundlagen der mehrdimensionalen, turbulenten Strömungssimulation kann der einschlägigen Literatur [FP97] [Tur00], die resultierenden Gleichungen dem STAR-CD Handbuch [STA04a] entnommen werden. Zunächst folgt in Abschnitt 5.1 die Erläuterung der Vernetzung mit der Besonderheit der Zellkompression durch die Kolbenbewegung. Die Einspritzung der Fluide in den Brennraum wurde mittels Lagrangescher Betrachtung, Abschnitt 5.2, modelliert. Für die Einspritzung der Emulsion mussten dabei die in Abschnitt 2.2.3 beschriebenen Besonderheiten im Verdampfungsverhalten berücksichtigt werden. Die Zündung und Verbrennung wurden durch die Einbindung eines reduzierten Reaktionsmechanismus realisiert, siehe Abschnitt 5.4.

5.1 Vernetzung

Das Netz wurde als strukturiertes Gitter aus Hexaederelementen aufgebaut. Die Symmetrie der Anordnung erlaubt bei der getrennten Einspritzung von Wasser und Kraftstoff die Reduzierung des Rechengebietes auf eine Brennraumhälfte. Hierfür wurde eine von der Kolbenposition unabhängige Anzahl von ca. 150.000 Zellen verwendet. Emulsionen wurden mit einer achsial angeordneten 12-Loch-Düse eingespritzt. Damit ließ sich der vernetzte Sektorwinkel auf 30° beschränken, für das resultierende Sektorvolumen wurden ca. 65.000 Zellen eingesetzt. Der Spalt zwischen Kolben und Zylinderbuchse ("Feuersteg") blieb unberücksichtigt. Sämtliche Wände sind geschlossen und wurden mit einer einheitlichen Temperatur von konstant 100°C versehen. Die Verwendung von Wandfunktionen² zur Berechnung der Turbulenz in der Wandgrenzschicht fordert idealerweise einen normierten Wandabstand $y^+ = 30...150$ des Zellzentrums von der Oberfläche [STA04b]:

$$y^+ = \frac{u_{tang} \cdot l_{Zentrum}}{v}$$
(5.1)

$$\hookrightarrow l_{Zentrum} = \frac{y^+ \cdot v}{u_{tang}} \tag{5.2}$$

²Die quantitative Berechnung des Wärmeüberganges mit gegebenen Wandfunktionen stellt in Motorgeometrien zwar eine Schwachstelle üblicher CFD-Codes dar, steht hier aber nicht im Mittelpunkt des Interesses.

Damit ergibt sich, mit einer Tangential-Geschwindigkeit $u_{tang} = 1...5$ m/s sowie einer kinematischen Gas-Viskosität von $v \approx 3 \cdot 10^{-5}$ m²/s, eine sinnvolle Zelldicke parallel zur Wand von $2 \cdot l_{Zentrum} = 0, 3...9, 0$ mm. Die Wandzellgröße wurde deshalb im Bereich 0, 5...2, 0 mm gewählt.



Abbildung 5.1: Simulation: Kompression des Gitters

Um die Kompression des Brennraumes durch den Kolben abzubilden, wurden die Zellschichten oberhalb der Kolbenkrone parallel zum Zylinderkopf mit einheitlicher Dicke gestaltet. Zu Kompressionsbeginn haben diese Zellen ein Verhältnis der Länge in Achsrichtung l_a zur Länge in radialer Richtung l_r von $l_a/l_r \approx 5...10$. Durch die Stauchung werden die Zellquerschnitte zum Beginn der Kraftstoff- bzw. Emulsionseinspritzung etwa quadratisch, zum OT liegt ein Verhältnis von $l_a/l_r \approx 0, 1...0, 4$ vor. Um räumliche Diskretisierungsfehler zu minimieren, hat das Netz zum Zeitpunkt der Einspritzung mit den damit verbundenen hohen Geschwindigkeiten seine ausgewogenste Topologie, siehe Abbildung 5.1. Die radial-azimuthale Vernetzung wurde durch Einfügen von injektornahen Blöcken verbessert. Wie in Abbildung 5.2 für das 30° und 180°-Sektornetz ersichtlich, konnte damit eine gute Netzqualität hinsichtlich der Längenverhältnisse sowie möglichst rechtwinkliger Berandungen der einzelnen Zellen hergestellt werden.



Abbildung 5.2: Simulation: Ausschnitt der Netztopologie in radialazimuthaler Richtung, 30°- bzw. 180°-Modellierung

5.2 Spraysimulation nach Lagrange

Grundsätzlich sind zur Berechnung von Tröpfchenfeldern in einer Gasphase zwei Betrachtungsweisen möglich. Zum einen lässt sich das Tröpfchenfeld als Kontinuum mittels *Eulerscher Gleichungen* berechnen, zum anderen als eine hohe Anzahl disperser Partikel, die entsprechend den *Lagrangeschen Bewegungsgleichungen* durch den Brennraum bewegt werden. In dieser Arbeit wurde die in technischen Anwendungen bewährte Lagrangesche Betrachtung gewählt, da damit bei makroskopischen Spraygrößen gute Übereinstimmungen mit experimentellen Ergebnissen erzielt werden, siehe Abschnitt 6.3.6. Aus Gründen der Rechenzeit kann dabei nicht die tatsächliche Anzahl an Partikeln berücksichtigt werden. Vielmehr wird eine deutlich geringere Zahl von sogenannten Parcels eingespritzt, die jeweils Tropfen einheitlicher Eigenschaften repräsentieren.³ Diese Parcels werden mit der eingesetzten CFD-Software durch beliebig anzuordnende Einspritzstellen in den Brennraum befördert [STA04b].

Turbulenz

Die Spraysimulation wurde durch bidirektionale Kopplung der Berechnung von Gas- und Flüssigphase durchgeführt. Für jeden Zeitschritt werden somit die aktuellen Werte der Gasphase zur Berechnung des Tropfenfluges übergeben. Umgekehrt fließen die Ergebnisse der Tropfenbewegung und - verdampfung als Quellterme von Masse, Impuls und Energie in die Berechnung der Gasphase ein. Die direkte Beeinflussung der Gasphasenturbulenz durch den Tropfenflug kann mit der Software nicht berücksichtigt werden [STA04a]; Turbulenz wird lediglich indirekt durch die induzierte Gasphasengeschwindigkeit bzw. den resultierenden Geschwindigkeitsgradienten generiert. Umgekehrt werden turbulente Schwankungen der Gasphase bei der Berechnung der Gleichungen für Impuls sowie Wärme- und Stoffübertragungsraten, beispielsweise bei der Ermittlung der Tropfen-Reynolds-Zahl, berücksichtigt. Die Tropfen erfahren dabei nicht nur die mittlere Geschwindigkeit \vec{u} des Gases, sondern zusätzlich eine Geschwindigkeitsfluktuation \vec{u}' . Die Zahlenwerte der Fluktuation werden zufällig auf Werten der Gaussverteilung mit Mittelwert 0 und Standardabweichung

$$\sigma = \sqrt{\frac{2}{3} \cdot k}$$

ausgewählt, wodurch die Tropfen des Sprays turbulent dispergiert werden. Es ist jedoch anzumerken, dass aufgrund des hohen Impulses des Gesamtsprays bei dieselmotorischen Rail-Drücken sowie der hohen Tropfengeschwindigkeiten – beispielsweise liegen bei der getrennten Einspritzung mittlere Austritts-Geschwindigkeiten des Kraftstoffs von 351 m/s vor – die turbulenten Schwankungen in der Größenordnung von wenigen Metern pro Sekunde nur von untergeordneter Bedeutung sind.⁴

³Sämtliche Gleichungen für Masse-, Energie- und Impulsaustausch werden für die einzelnen Parcels auf Basis der von jedem Parcel repräsentierten Tropfengröße gelöst. Die Anzahl $0 < n < \infty$ der Tropfen pro Parcel ist üblicherweise nicht geradzahlig und resultiert aus der Massenerhaltung. In dieser Arbeit wurden 20.000 Parcels bei Emulsionsbetrieb im 30°-Sektor bzw. 78.000 bei getrennter Einspritzung im 180°-Sektor eingespritzt.

⁴Im Gegensatz dazu ist beispielsweise der Eindüsungsvorgang bei luftunterstützten Zerstäubern, welcher vom Gas-Impuls dominiert wird, stark von turbulenter Dispersion beeinflusst.

Ob für die Berechnung der Wärme- und Stoffübertragung trotz der turbulenten Schwankungsbewegungen der Gasphase eine quasi-stationäre Tropfenumströmung angenommen werden kann, lässt sich mit den entsprechenden Bedingungen nach Sirignano [Sir00] abschätzen:

$$r \cdot k_W \ll 1 \tag{5.3}$$

$$\frac{u_d}{u' \cdot r \cdot k_W} > 1 \tag{5.4}$$

Nach dem Strahlaufbruch liegen Tröpfchenradien von $r \approx 5 \cdot 10^{-6}$ m vor. Relevante Wellenzahlen k_W decken den gesamten Bereich des turbulenten Spektrums vom integralen Längenmaß l_I bis zum Kolmogorovmaß l_K ab. Mit charakteristischen Werten während der Einspritzung, siehe Anhang A.1.2, resultiert der Wellenzahlbereich:

$$k_W = \frac{1}{l_I} \dots \frac{1}{l_K} = \frac{1}{5 \cdot 10^{-3}} \dots \frac{1}{3 \cdot 10^{-6}} = 200 \dots 3, 3 \cdot 10^5 \qquad \frac{1}{m}$$
(5.5)

Bedingung 5.3 kann für derartige Tropfen somit fast bis zu den kleinsten turbulenten Spektren erfüllt werden. Die Tropfengeschwindigkeit u_d übertrifft die turbulenten Gasschwankungen u' in der Regel, womit unter der Voraussetzung von $r \cdot k_W \ll 1$ Bedingung 5.4 stets erfüllt wird. Die Annahme quasistationärer Umströmung der Tröpfchen darf somit bei der Berechnung des Wärme- und Stoffüberganges angenommen werden.

Zerstäubung und Tropfenzerfall

Den Grundlagen in Abschnitt 2.1 ist zu entnehmen, dass sich die Tröpfchenbildung auf einen primären Zerfall beim Düsenaustritt sowie einen sekundären Zerfall durch aerodynamische Kräfte aufteilt. Wir haben gesehen, dass die Größe der Tropfen sowie die Position deren Bildung modellabhängig stark schwanken kann. In dieser Arbeit kommt das Modell nach Reitz und Diwakar [RD87] zum Einsatz, welches Abbildung 2.2 c.) entspricht. Die detaillierte Simulation wird durch die Injektion von Tropfen mit dem Düsenlochdurchmesser $d_0 = D$ vereinfacht, die in Folge aerodynamisch zu kleineren Durchmessern $d < d_0$ zerfallen. Der Zerfall der Primärtropfen findet im Nahfeldbereich statt, womit die Primärtropfen den dichten Spraykern nachbilden. Dieses Modell ist nach Baumgarten [Bau06] zur Definition der Startbedingungen am Besten geeignet, wenn, wie in dieser Arbeit, zwar der Spraykegelwinkel, jedoch keine detaillierten Informationen über den Primärspray bekannt sind. Hierbei wird angenommen, dass im dichten Spray nahe der Düse zwischen der Zerteilung des Spraykerns in Tröpfchen und deren Zerfall nicht unterschieden werden kann.

Während einerseits ein sehr feines Gitter zur Auflösung der Gradienten im Nahbereich der einzelnen Tropfen sinnvoll wäre, darf andererseits zur sinnvollen Lösung der Eulerschen Gasphasengleichungen auch in dichten Spraygebieten die Flüssigphase einen Höchst-Volumenanteil nicht übersteigen [Bau06]⁵. Die Vernetzung muss deshalb beide Faktoren dieses Trade-offs berücksichtigen. In der Berechnung zeigte sich, dass die Wahl der Zellgröße nach den Bedürfnissen der Turbulenzmodellierung auch für die Spraysimulation eine sinnvolle Größe darstellt. Um die aus der Diskretisierung resultierenden, nicht vermeidbaren Fehler bei Impuls- als auch Wärme- und Stoffübertragung zu reduzieren, wurden diese Flüsse nicht auf Basis der jeweiligen Knoten- oder Zellwerte, sondern der Zellgradienten ermittelt.

Zur Erzielung einer guten Vergleichbarkeit zwischen Simulation und Experiment wurde als Basis für den eingespritzten Massenstromverlauf eine charakteristische Nadelhubkurve verwendet. Mittels Kontinuitäts- und Energieerhaltungsgleichung sowie der Berücksichtigung von Reibung lässt sich für stationäre Strömung der Massenstrom aus dem Düsen-Nadelhub bestimmen.⁶ Die Auswertung dieser Gleichungen zeigt, dass der Massenstrom degressiv mit dem Nadelhub zunimmt und bei 30% des maximalen Hubes bereits über 90% des maximalen Massenstromes erzielt werden. Charakteristische Zeiten für einen Vollhub der Nadel wurden für den eingesetzten Injektor zu 1,5 ms...2,0 ms für den Öffnungs - und 0,8 ms...1,0 ms für den Schließvorgang ermittelt. Die Zeitspannen für den Anstieg des Massenstromes zum maximalen Wert bzw. dessen Abfall wurden aufgrund der Erkenntnis, dass 90% des maximalen Massenstromes bereits bei 30% des maximalen Hubes auftreten, zu 0,5 ms bzw. 0,3 ms angenommen, siehe Abbildung 5.3.

⁵In der Simulation beträgt diese Schwelle 40% [STA04a].

⁶Ofner [Ofn01] zeigt für eine Sacklochdüse auf, dass der Druckverlust bei kleinem Nadelhub wesentlich am Nadelsitz entsteht. Bei größerem Hub dominiert der Druckverlust beim Übergang vom Sackloch in die Düsenlöcher aufgrund der starken Verengung des Strömungsquerschnittes.



Abbildung 5.3: Modellierung des Einspritzmassenstromes pro Düsenloch für Emulsionseinspritzung bzw. getrennte Einspritzung

Tropfenkollision

Für die Kollision von Tropfen wurde die in Star-CD implementierte Standard-Berechnungsweise nach O'Rourke gewählt [STA04a]. Auf der Basis von Zufallszahlen wird zwischen der Tropfenvereinigung (Koaleszenz) und dem Stoß unterschieden. Im Fall der Koaleszenz reduziert sich die Anzahl der Tropfen in den Parcels; im Fall des Stoßes wird nur Impuls ausgetauscht.

Spray-Wand-Wechselwirkung

Der Aufprall von Parcels auf die Wand wurde nach dem Modell von Bai berechnet [STA04a]. Die Klassifizierung in Regimes geschieht hierbei anhand der Gasphasen-Weber-Zahl We_g, siehe Gleichung 2.3, sowie der Tropfen-Ohnesorge-Zahl Oh_d (Index *d*: Tropfen, von Englisch *droplet*))

$$Oh_d = \frac{\eta_d}{\sqrt{\varrho_d \sigma d}} \quad . \tag{5.6}$$

Damit ergeben sich 3 Regimes für die Spray-Wand-Wechselwirkung:

- Abprallen der Tropfen unter Erhalt der Tropfengröße bei We $_g \le 5$
- Anhaften als sphärische Tropfen im Bereich 5 < We_g \leq 1320 · Oh_d^{0,36}
- Abprallen unter Bildung kleinerer Tropfen für We_g \ge 1320 · Oh_d^{0,36}

Hierbei wurde keine Wandfilmbildung berücksichtigt, da dies in ersten Simulationen besonders in den Ecken der Kolbenmulde zu Schwierigkeiten bei der Berechnung führte.

5.3 Modellierung der Emulsionsverdampfung

Wie in Abschnitt 2.2.3 geschildert wurde, weisen Kraftstoff-Wasser-Emulsionen ein spezielles Verdampfungsverhalten auf. Im vorgestellten Versuch wurde mittels Destillation ermittelt, dass durch das Verhältnis der Partialdrücke an Wasser- und Kraftstoffdampf der verdunstende Massenstrom an Wasser etwa das Doppelte des Kraftstoff-Massenstromes beträgt. Es wurde ebenfalls gezeigt, dass dieses Verhältnis auch auf den Druckbereich von $p_{\infty} = 10$ bar extrapoliert werden darf, der zum Einspritzzeitpunkt im Brennraum herrscht.

Basis für die Berechnung der Tropfenverdampfung ist die Energiegleichung 5.7, die zur Berechnung der – für jeden Tropfen einheitlichen – Temperatur T_d dient:

$$\dot{M}_{Kr} \underbrace{T_{d}}_{H_{2}O} \underbrace{V_{d}}_{T_{\infty}} = \frac{m_{d,Kr} \frac{d(c_{p,Kr} \cdot T_{d})}{dt} + m_{d,H_{2}O} \frac{d(c_{p,H_{2}O} \cdot T_{d})}{dt} = \frac{\alpha \cdot A_{d} \cdot (T_{\infty} - T_{d})}{\dot{Q}} - \Delta h_{f,Kr} \cdot \dot{M}_{Kr} - \Delta h_{f,H_{2}O} \cdot \dot{M}_{H_{2}O}$$
(5.7)

$m_{d,H_2O/Kr}$:	Masse Wasser/Kraftstoff
$c_{p,H_2O/Kr}$:	isobare Wärmekapazität Wasser/Kraftstoff
$\Delta h_{f,H_2O/Kr}$:	Verdampfungsenthalpie Wasser/Kraftstoff
A_d	:	Gesamtoberfläche Tropfen
T_d	:	(einheitliche)Tropfentemperatur
T_{∞}	:	Umgebungstemperatur
$\dot{M}_{d,H_2O/Kr}$:	verdunstender Massenstrom Wasser/Kraftstoff

Das Verfahren funktioniert nun folgendermaßen:

- Bestimmung des zugeführten Wärmestromes Q, der teilweise in das Aufheizen des Tropfens und teilweise in die Phasenumwandlungsenthalpie beim Verdunsten fließt, siehe Abschnitt 5.3.1.
- Bestimmung der verdunstenden Stoffströme \dot{M}_{Kr/H_2O} von Kraftstoff und Wasser, siehe Abschnitt 5.3.2.
- Änderung der Tropfentemperatur gemäß Gleichung 5.7.

Dabei ergeben sich Rückkopplungen primär durch die Tropfentemperatur T_d . Diese ist entscheidend für den Dampfdruck der beiden Fluide und somit für die verdunstenden Stoffströme. Eine Erhöhung der Temperatur erhöht den Dampfdruck an der Tropfenoberfläche und somit den abdampfenden Stoffstrom, wofür wiederum Energie nötig ist, die bei nicht ausreichender Wärmezufuhr aus der inneren Energie des Tropfens gedeckt wird. Im stationären Falle eines Tropfens, der in einer isobaren, isothermen Umgebung fliegt, stellt sich die Kühlgrenztemperatur ein.



Abbildung 5.4: Simulation: Tropfenradius und -temperatur bei Verdunstung von Kraftstoff-, Wasser- oder Emulsionstropfen ($\Omega_0 = 1,0$), $T_{\infty} = 400 \,^{\circ}C$, $p_{\infty} = 10$ bar, $u_d = 100$ m/s

Abbildung 5.4 zeigt den zeitlichen Verlauf der Radien und Temperaturen von Kraftstoff-, Wasser- oder Emulsionstropfen bei konstanten Umgebungsbedingungen. Die nach der Aufheizung erzielten Kühlgrenztemperaturen liegen wie

erwartet unterhalb der Siedetemperatur T_{DDK} , welche für das jeweilige Medium aus dem Umgebungsdruck p_{∞} resultiert. Die Emulsion verdunstet zweistufig, wobei sich die Radien- und damit Massenabnahme nach Aufbrauch des Wasseranteils deutlich intensiviert.

Nachfolgend sollen die Berechnungsmethoden zur Ermittlung des Wärmeübergangskoeffizienten α sowie der verdunstenden Stoffströme \dot{M}_{Kr/H_2O} beschrieben werden.

5.3.1 Wärmeübertragung

Für die Ermittlung des Wärmeüberganges wurde die übliche Vorgehensweise [TD07], [STA04a] angewandt. Hierzu kann nach der Ermittlung der Relativgeschwindigkeit u_{rel} zwischen Tropfen und umgebendem Gas mittels Tropfendurchmesser d und der kinematischen Viskosität v_{∞} die Tropfen-Reynolds-Zahl Re_d ermittelt werden:

$$\operatorname{Re}_{d} = \frac{u_{rel} \cdot d}{v_{\infty}} \quad . \tag{5.8}$$

Unter Verwendung von dynamischer Viskosität η_{∞} sowie der Wärmeleitfähigkeit λ_{∞} wird die Prandtl-Zahl *Pr* bestimmt:

$$\Pr = \frac{\eta_{\infty} \cdot c_{p,\infty}}{\lambda_{\infty}}$$
(5.9)

Für die Ermittlung der Nusselt-Zahl wurde die vielfach eingesetzte Gleichung für den Wärmeübergang am Tropfen nach Ranz und Marshall verwendet, welche in einer turbulenten Strömung gilt:

Nu = 2+0,6 ·
$$\sqrt{\text{Re}_d} \cdot \text{Pr}^{\frac{1}{3}}$$
 (5.10)

$$\alpha = \frac{\operatorname{Nu} \cdot \lambda_{\infty}}{d} \cdot \frac{Z}{e^{Z} - 1}$$
(5.11)

Hierbei stellt der letzte Term mit dem Faktor Z eine Korrektur dar, der die Überlagerung des Stoffüberganges zur Wärmeübertragung berücksich-

tigt [STA04a]:

$$Z = \frac{-c_{p,\infty} \frac{dm_d}{dt}}{\pi \cdot d \cdot \lambda_{\infty} \cdot \mathrm{Nu}}$$
(5.12)

5.3.2 Stoffübertragung

Die Bestimmung der aktuellen Verdampfungsraten \dot{M} für Wasser und Kraftstoff soll gemäß Abschnitt 2.2.3 derart modelliert werden, dass deren Verhältnis \dot{M}_{H_2O} : \dot{M}_{Kr} einen Wert von 2:1 aufweist. Dafür wurden zunächst die Verdampfungs-Massenstomdichten \dot{m} ermittelt. Um das Verhältnis der Massenströme richtig wiederzugeben, wurde anschließend die Gesamtoberfläche der jeweiligen Tropfen fiktiv auf die beiden Fluide aufgeteilt.

Analog zur Vorgehensweise bei der Wärmeübertragung kann die Stoffübertragung berechnet werden [TD07], [FVT04]. Das Pendant zur Prandtl-Zahl ist in der Stoffübertragung die Schmidt-Zahl Sc mit dem Diffusionskoeffizienten D

$$Sc_{Kr/H_2O} = \frac{v_{\infty}}{D_{Kr/H_2O}}.$$
 (5.13)

Der Nusselt-Zahl entspricht die Sherwood-Zahl Sh:

$$\operatorname{Sh}_{Kr/H_2O} = 2 + 0.6 \cdot \sqrt{\operatorname{Re}_d} \cdot \left(\operatorname{Sc}_{Kr/H_2O}\right)^{\frac{1}{3}}$$
 (5.14)

Hieraus folgen die Massenstromdichten \dot{m} über die molaren Massen M, die Dampfdrücke p_{DDK} , die Partialdrücke in der Zelle p_{part} sowie die Gasphasen-Zelltemperatur T_{Zelle} :

$$\dot{m}_{Kr/H_2O} = Sh_{Kr/H_2O} \cdot \left(\frac{M_{Kr/H_2O}}{R_m}\right) \cdot \left[\left(\frac{p_{DDK,Kr/H_2O}}{T_d}\right) - \left(\frac{p_{part,Kr/H_2O}}{T_{Zelle}}\right)\right] (5.15)$$

Für jeden Tropfen wurde nun angenommen, dass die Gesamtoberfläche des Tropfens A_d sich derart aufteilt, dass sich durch Multiplikation mit der jeweiligen Massenstromdichte \dot{m} schließlich das in Abschnitt 2.2.3 ermittelte Verhältnis der abdampfenden Massenströme \dot{M}_{H_2O} : \dot{M}_{Kr} von 2:1 ergibt:

$$\gamma = \frac{\dot{m}_{H_2O}}{\dot{m}_{Kr}} \tag{5.16}$$

$$A_{Kr} = A_d \cdot \frac{\gamma}{2 + \gamma} \tag{5.17}$$

$$A_{H_2O} = A_d \cdot \frac{2}{2+\gamma} \tag{5.18}$$

$$\dot{M}_{Kr/H_2O} = \dot{m}_{Kr/H_2O} \cdot A_{Kr/H_2O}$$
 (5.19)

Dieses Verhalten ist solange gültig, wie die Tropfen Wasser enthalten. Anschließend wird über die gesamte Tropfenoberfläche der restliche Kraftstoff in die Gasphase überführt.

5.4 Modellierung der Zündung und Verbrennung

Wie in Abschnitt 6.1.3 dargelegt werden wird, ist die hier untersuchte homogene Kompressionszündung von der chemischen Kinetik räumlich fluktuierender Selbstzündungen dominiert. Im Gegensatz zu vielen Verbrennungsregimes, bei welchen die Interaktion zwischen Turbulenz und Chemie einen entscheidenden Einfluss hat und deshalb deren Modellierung eine zentrale Rolle einnimmt, kann die Berücksichtigung turbulenter Fluktuationen auf die chemischen Umsatzraten hierbei vereinfachend vernachlässigt werden. Als Untermenge aller möglichen Modellierungsmethoden von Verbrennungsvorgängen sind für diesen Fall folgende Abstraktionsebenen möglich:

- 1. 0-dimensionale Berechnungen eines ideal gerührten Reaktors, detaillierter Reaktionsmechanismus [AMFD⁺01].
- 2. Ensemble-Mittelung mehrerer ungekoppelter 0-dimensionaler Reaktoren mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen (Temperatur, Luftzahl,...) aus Perturbationen eines mittleren Zustandes nach Fall 1., detaillierter Reaktionsmechanismus [SSM05].
- 3. (Druck-)Kopplung mehrerer 0-dimensionaler Reaktoren, detaillierter Reaktionsmechanismus [Pös06].
- 4. 3D-CFD-Berechnung des Strömungsfeldes, Zellen ähnlichen thermodynamischen Zustandes werden gemittelt und zur Berechnung der Kinetik

an ein externes Programm übergeben, detaillierter Reaktionsmechanismus [AFS⁺05].

- 5. 3D-CFD-Berechnung des Strömungsfeldes mit interner Berechnung der chemischen Umsatzraten, reduzierter chemischer Reaktionsmechanismus.
- 6. 3D-CFD-Berechnung von Strömungsfeld mit gekoppelter, interner Berechnung der chem. Umsatzraten, detaillierter chemischem Reaktionsmechanismus. Für langkettige Kohlenwasserstoffe mit entsprechend komplexer Kinetik ist dies mit derzeitigen Rechenleistungen nicht machbar.

In dieser Arbeit wurden verschiedene Abstraktionsebenen zur Erklärung der jeweiligen Phänomene gewählt. Neben 0-dimensionalen Abschätzungen (1), die wir schon in den Grundlagen kennengelernt haben, wird in Folge zudem die Druckkopplung zweier Reaktoren (3) sowie die mehrdimensionale Berechnung mit einem reduzierten Reaktionsmechanismus (5) zum Einsatz kommen.

Der eingesetzte Reaktionsmechanismus für die mehrdimensionale Simulation stammt von Maroteaux und Noel [MN06]. Er wurde speziell für die CFD-Modellierung der HCCI-Verbrennung entwickelt und im Luftzahlbereich $1 \le \lambda \le 3$ anhand detaillierter Mechanismen⁷ validiert. Die Autoren weisen darauf hin, dass zwar die Entwicklung einiger Radikale des 26 Schritte und 25 Spezies umfassenden Mechanismus von detaillierteren Mechanismen abweicht. Die Zündverzugszeiten werden jedoch korrekt wiedergegeben, womit dieser Mechanismus für die CFD-Simulationen dieser Arbeit tauglich ist. Wie im folgenden Abschnitt gezeigt werden wird, kann auch bei der Modellierung der thermischen Stickoxide auf die korrekte Wiedergabe von Zwischenspezies oder Radikalen verzichtet werden.

Wird die mehrdimensionale CFD-Berechnung mit der Berechnung der chemischen Umsatzraten verbunden, so entspricht dies einem Feld an Reaktoren, die durch Austausch von Masse, Energie und Impuls miteinander gekop-

⁷Zur Validierung diente unter anderen der gut mit experimentellen Daten übereinstimmende Mechanismus von Curran et al. [CGPW98], welcher für die 0-dimensionalen Abschätzungen verwendet wurde.

pelt sind. Die Zündung und (mehrstufige) Wärmefreisetzung erfolgt in jeder einzelnen Zelle durch lokale chemische Umsatzraten, welche von Temperatur, Druck sowie Spezieskonzentrationen abhängen. Folglich kann das Gas in einer Zelle zünden, wenn zu diesem Zeitpunkt in der Umgebung noch keine Zündung erfolgte. Von lokalen Selbstzündungen breitet sich die Verbrennung in Form der deflagrativen Flammenausbreitung durch den turbulenten Transport von Masse, Energie und Impuls aus. Abhängig von der lokalen Zündverzugszeit kann die Verbrennung in einer von frühen Zündgebieten entfernten Zelle schon dann stattfinden, wenn von dort noch keine Flüsse eingetroffen sind, oder erst durch deren zündbeeinflussende Wirkung. Im letzteren Fall wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Verbrennung von der Tubulenz beeinflusst. Entsprechend der Theorie von Zel'dovich et al., siehe Abschnitt 2.5.2, kann sich damit ein breites Spektrum an Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Verbrennung entsprechend der zündzeitbestimmenden Gradienten einstellen. Dieses Modell ist für die Simulation der sukzessiven Selbstzündungen, deren experimentell beobachtete Ausbreitungsform in Abschnitt 6.1 beschrieben werden wird, gut geeignet.

Der Einfluss turbulenter Fluktuationen auf die chemischen Umsatzraten kann bei dem untersuchten Brennverfahren vernachlässigt werden: Die Einspritzung findet – verglichen mit konventioneller Dieselverbrennung – sehr früh statt. Deshalb schließt sich an die Einspritzung eine relativ lange Verdampfungs- und Homogenisierungsphase an, in welcher Turbulenz die resultierende Temperatur- und Kraftstoffverteilung intensiv beeinflusst. Der Einfluss der Turbulenz auf die Kinetik ist hierbei jedoch gering, da eine niedrige Temperatur vorliegt und damit die chemischen Zeitskalen im Vergleich zu turbulenten Zeitskalen groß sind. Aufgrund der vorangegangen Homogenisierung liegen bei der Zündung vergleichsweise gradientenarme Felder vor, wodurch der Turbulenzeinfluss auch hier wiederum vernachlässigt werden kann, siehe auch [DHS06]. Die Anwendbarkeit des Verbrennungsmodelles ist damit zwar für die speziellen Bedingungen bei HCCI-Brennverfahren möglich, für konventionelle Brennverfahren ist es dagegen im Allgemeinen untauglich.

5.5 Modellierung der Stickoxidbildung

In der numerischen Simulation soll ein Betriebspunkt bei vergleichsweise hoher Last untersucht werden. Nach ersten experimentellen Ergebnissen ergibt sich hierfür eine beträchtliche Stickoxidproduktion von deutlich über 100 ppm. Die berechneten Temperaturen liegen aufgrund der frühen Brennlage sowie der raschen Verbrennung deutlich über 2000 K, womit primär thermisches Stickoxid gebildet wird, siehe Abschnitt 2.4.1.

Wie schon oben erwähnt, wurde die Simulation auf Basis der RANS-Modellierung durchgeführt. Hierbei werden nur Fluktuationen der Geschwindigkeit modelliert. Die Schwankungen der Temperatur sind dagegen unbekannt, haben jedoch aufgrund der starken Nichtlinearität der chemischen Reaktionsraten eine essentielle Bedeutung für die erzielten Stickoxidemissionen [WMD01]. Als Ausweg können Fluktuationen beispielsweise durch Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (engl. "Probability Density Function", kurz PDF) angenähert werden. Die PDF´s lassen sich beispielsweise empirisch konstruieren. Der Transport derer Momente (Mittelwert und Varianz) erweitert jedoch den Rechenaufwand der CFD-Simulation, was aufwändig und damit auf sehr kleine chemische Systeme beschränkt ist.

Für die in der Arbeit untersuchten Verbrennungsvorgänge bietet sich ein wesentlich einfacherer Weg an, der es mit geringem numerischen Aufwand erlaubt, die Trends der Stickoxidemissionen zwischen den beiden Verfahren der getrennten Einspritzung von Kraftstoff und Wasser sowie der Verwendung von Emulsionen abzuschätzen. Die Emissionen lassen sich in einer Postprocessing-Operation aus den mittleren Werten der RANS-Rechnung berechnen. Diese Vorgehensweise basiert auf zwei Charakteristika des untersuchten Verbrennungsverfahrens: Zum einen ist durch die frühe Zündung vor OT die Dauer der Hauptwärmefreisetzung deutlich kürzer als die Verweilzeit bei den hohen Temperaturen. Thermische Stickoxide bilden sich demnach kaum während der starken Gradienten unterworfenen Wärmefreisetzungsphase, sondern vor allem danach. Zum anderen handelt es sich um eine vorgemischte Verbrennung, in der die Kraftstoffdiffusion vor der Verbrennung zu einer Homogenisierung führt. Die im Vergleich zu einer Diffusionsflamme gradientenarmen Skalarfelder führen deshalb zwischen Hauptwärmefreisetzung und dem "Einfrieren" der Reaktion aufgrund fortschreitender Expansion zu vergleichsweise geringen turbulenten Fluktuationen.

Die Berechnung wurde auf der Basis der drei Grundgleichungen der thermischen Stickoxidbildung aus Abschnitt 2.4 durchgeführt. Die Vorwärts-Reaktionsraten $k_{f,1/2/3}$ und Rückwärts-Reaktionsraten $k_{r,1/2/3}$ der Reaktionen 2.28 bis 2.30 wurden von Turns [Tur00] übernommen. Da die Aktivierungsenergie für die Oxidation atomaren Stickstoffes gering ist und zudem bei mageren Mischungen ausreichend Sauerstoff vorhanden ist, soll der durch Gleichung 2.28 entstehende atomare Stickstoff im Modell sofort aufoxidiert werden. Damit ergibt sich die NO-Produktionsrate zu [Flu05]:

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = 2 \cdot k_{f,1} \cdot [\text{O}] \cdot [\text{N}_2] \frac{1 - \frac{k_{r,1}k_{r,2}[\text{NO}]^2}{k_{f,1}[\text{N}_2]k_{f,2}[\text{O}_2]}}{1 + \frac{k_{r,1}[\text{NO}]}{k_{f,2}[\text{O}_2] + k_{f,3}[\text{OH}]}}.$$
(5.20)

Im vorigen Abschnitt 5.4 wurde geschildert, dass die Konzentrationen von Zwischenspezies und Radikalen im reduzierten Reaktionsmechanismus nicht korrekt wiedergegeben werden. Die in Gleichung 5.20 benötigte Konzentration atomaren Sauerstoffes [O] kann deshalb nicht aus den Simulationsergebnissen übernommen werden. Vielmehr wurde diese Konzentration aus dem chemischen Gleichgewicht berechnet, da sich – verglichen mit den langen Zeitskalen der Stickoxidbildung – die Radikalkonzentrationen dem chemischen Gleichgewicht wesentlich schneller annähern. Die Gleichgewichtskonzentration von [O] lässt sich aus Temperatur und der Sauerstoffkonzentration $[O_2]$ ermitteln [Flu05]:

$$[O] = 3,97 \cdot 10^5 \cdot T^{-0.5} \cdot \sqrt{[O_2]} \cdot e^{-\frac{31090}{T}}$$
(5.21)

Die 3. Reaktion des Zel'dovich- Mechanismus, Gleichung 2.30, kann wesentlich zur NO-Produktion beitragen, wenn Radikalkonzentrationen oberhalb des chemischen Gleichgewichtes, sogenannte super-equilibrium-Konzentrationen, vorliegen. Diese super-equilibrium-Konzentrationen treten zum einen primär in unterstöchiometrischen Gebieten auf, die in dieser Arbeit eine untergeordnete Bedeutung haben. Zum anderen ist während hoher Temperaturen im Brennraum das Druckniveau (verglichen mit atmosphärischen Bedingungen) hoch, womit die Bedeutung dieser Konzentrationen deutlich abnimmt [Ben98], [BK07]. Da vergleichende Berechnungen dies bestätigten, wurde die Konzentration von [OH] in Gleichung 5.20 vernachlässigt.

Die Bildung von Stickstoffdioxid NO_2 wurde nicht berücksichtigt, weil das chemische Gleichgewicht bei den hohen Temperaturen im Brennraum zwischen Zündung und Berechnungsende der Simulation kurz nach OT deutlich auf der Seite von NO liegt, siehe Abbildung 2.11. Es ist aus diesem Grund auch allgemein in CFD-Simulationen üblich, NO_2 zu vernachlässigen. Im Kapitel 6 werden wir sehen, dass im Experiment NO_2 in derselben Größenordnung wie NO liegt. Diese Beobachtung wird primär auf die niedrige Temperatur während der langen, mehrere Minuten dauernden Verweilzeit zwischen Verbrennung und Abgasanalyse zurückgeführt werden, welche die Umwandlung in NO_2 fördert.

5.6 Eckdaten der durchgeführten Simulationen

Tabelle 5.1 gibt eine Übersicht wichtiger Daten der Simulation. Die Zeitschrittweite wurde nach dem Kriterium der maximal im Rechengebiet auftretenden Courant-Zahl Co= $\frac{u \cdot \Delta t}{l_{Zelle}}$ gewählt, welche ein Maß für die konvektive Bewegung relativ zum Gitter darstellt. Bei hohen Geschwindigkeiten während der Einspritzung entspricht dies einer Zeitschrittweite von $\Delta t \approx 10 \mu$ s.

Name	Symbol	Größe	Einheit
Kompressionsverhältnis	e	16,4	[-]
Hubvolumen	V_H	0,79	[1]
Luftzahl	λ	1,9	[-]
Wasser-Kraftstoff-Verhältnis	Ω	1,0	[-]
Zeitschrittweite	Δt	gemäß Co _{max.} < 20	[S]
Zellanzahl KW	n_{Zellen}	ca. 150.000	[-]
Zellanzahl E	n _{Zellen}	ca. 65.000	[-]
Eingedüste Parcels KW	n _{Parcel}	78.000	[-]
Eingedüste Parcels E	n _{Parcel}	20.000	[-]

Tabelle 5.1: Eckdaten Simulation, KW: getrennte Kraftstoff- und Wasser-
Einspritzung, E: Emulsion

6 Resultate und Diskussion

Um die Wirkung der Wasserzugabe zu verdeutlichen, werden wir in Abschnitt 6.1 zunächst die experimentellen Ergebnisse zur homogenen Kompressionszündung ohne Wassereinspritzung betrachten. Der Einstieg in die Nutzung von Wasser wird anschließend in Abschnitt 6.2 anhand reaktionskinetischer Betrachtungen geliefert. Darauf aufbauend können wir den Fokus auf die getrennte Wasserzugabe, Abschnitt 6.3, sowie die Verwendung von Emulsionen, Abschnitt 6.4, legen. Die Untersuchung beider Verfahren basiert auf experimentellen Untersuchungen am Einhubtriebwerk sowie je einer numerischen Simulation.

Entsprechend zur Darstellung der experimentellen Daten sollen auch die Ergebnisse der numerischen Simulationen über dem Kurbelwinkel dargestellt werden. Als Basis für die Kolbenbewegung in der Simulation dient ein charakteristischer Hubverlauf der Einhubmaschine, welcher einer simulierten Drehzahl von n = 1500 1/min entspricht.

6.1 Homogene Kompressionszündung ohne Wassereinspritzung

Die homogene Kompressionszündung mit Direkteinspritzung kann grundsätzlich in die 3 Phasen Einspritzung des Kraftstoffs, die Verdampfung und Homogenisierung sowie die Zündung und Wärmefreisetzung untergliedert werden.

6.1.1 Einspritzung des Kraftstoffs

Die Einspritzung des Kraftstoffs unterscheidet sich durch die niedrige Gasdichte aufgrund früher Einspritzlage deutlich vom klassischen Dieselbrennverfahren. Damit sind Unterschiede in den makroskopischen Strahleigenschaften wie Spraykegelwinkel oder -Eindringtiefe zu erwarten. Deshalb wurde die Spraystruktur experimentell mittels Schattenverfahren untersucht.



Abbildung 6.1: Experiment: Einspritzung bei unterschiedlicher Gasdichte, A: $\rho \approx 3 \text{ kg/m}^3$, B: $\rho \approx 9 \text{ kg/m}^3$

Die beiden Einspritzsequenzen in Abbildung 6.1 stammen aus zwei unterschiedlichen Versuchen. Sie repräsentieren eine sehr frühe Einspritzung bei etwa 100°KW vOT bei einem Aufladedruck¹ von 1,20 bar und eine spätere Ein-

¹Als Aufladedruck wird der Absolutdruck im Brennraum zu Kompressionsbeginn bezeichnet.

spritzung bei etwa 60°KW vOT, bei einem Aufladedruck von 1,70 bar. Dadurch erhöht sich die Gasdichte von etwa $\rho \approx 3 \text{ kg/m}^3$ in Sequenz A auf $\rho \approx 9 \text{ kg/m}^3$ in der Sequenz B.

Die Spraykegelwinkel wurden durch Anlegen von Tangenten an die Sprayränder ermittelt, wie für das jeweils letzte Bild mit der Nummer 6 angedeutet. Hierbei muss berücksichtigt werden, dass durch den geringen Gesamtspraywinkel zwischen den einzelnen Strahlen von $\Psi_{SW,ges} = 70^{\circ}$ die tatsächlichen geometrischen Werte für den Spraykegelwinkel ψ_G geringer bzw. für die Sprayeindringtiefe L_G größer als die in den Schattenaufnahmen (Index S) beobachteten Werte sind:

$$L_G = \frac{L_S}{\cos \chi} \tag{6.1}$$

$$\psi_G = 2 \cdot \arctan\left(\tan\frac{\psi_S}{2} \cdot \cos\chi\right)$$
(6.2)

Hierbei ist χ der Winkel zwischen Sprayachse und Zylinderkopf-Oberfläche, der sich für den Gesamtspraywinkel $\Psi_{SW,ges} = 70^{\circ}$ zu $\chi = 55^{\circ}$ ergibt.

 $\Psi_{\text{SW,ges}}$

Die geometrische Sprayeindringtiefe L_G und der Spraykegelwinkel ψ_G sind für die beiden Gasdichten in Abbildung 6.2 ersichtlich. Es zeigt sich über der Zeit nach Einspritzbeginn ein etwa linearer Eindringverlauf der Sprays. Der Einfluss der Gasdichte auf die Eindringtiefe ist durch die im Vergleich zu dieselmotorischen Studien geringe Variation der Dichte kaum merklich. Die bekanntesten Korrelationen für die Eindringtiefe von Sprays unter Verwendung von typischen Dieseleinspritzungs-Konfigurationen basieren auf Gleichung 2.4 in Abschnitt 2.1. Die für hohe Gasdichten ermittelte Korrelation zeigt mit der Proportionalität $L_G \sim \rho_g^{-0,25}$ bei zunehmender Gasdichte eine abnehmende Eindringtiefe. Zeitlich ist der Verlauf gemäß $L_G \sim \sqrt{t}$ degressiv. Dies kann bei den in dieser Arbeit vorliegenden, vergleichsweise niedrigen Gasdichten nicht bestätigt werden. Hier korrelieren die beobachteten Trends des geringen Einflusses der Gasdichte auf die Eindringtiefe sowie des zeitlichen Verlaufes der Einspritztiefe gut mit der Untersuchung von Ofner [Ofn01].



Abbildung 6.2: *Experiment: Sprayeindringtiefe und Spraykegelwinkel für die Sequenzen in Abbildung 6.1*

Er bestätigte den degressiven Verlauf der Eindringtiefe bei hohen Gasdichten von $\rho_g \ge 20 \text{ kg/m}^3$ für den Zeitraum ab t = 0,20 ms nach Spritzbeginn. Ofner untersuchte zudem Einspritzungen in eine niedrigere Gasdichte 20 kg/m³ \ge $\rho_g \ge 5 \text{ kg/m}^3$, wobei er einen etwa linearen Verlauf der Eindringtiefe über der Zeit beobachtete. Stellte er die Gasdichte noch geringer ein, so resultierte ein progressiver Verlauf der Eindringtiefe und die Geschwindigkeit der Sprayspitze nahm über der Einspritzdauer zu. Er schließt daraus, dass die gebräuchliche Gleichung 2.4 für hohe Eindringtiefen nicht gut geeignet ist, schlägt jedoch keine alternative Formulierung vor.

Der zeitliche Verlauf des Spraykegelwinkels ψ_G zeigt für die beiden untersuchten Gasdichten ein Maximum kurz nach Einspritzbeginn, Abbildung 6.2. Danach fällt der Winkel auf einen annähernd konstanten Wert ab. Dieses Verhalten ist aus der Literatur bekannt [NS96], [Ofn01]. Schwarz et al. [SKB⁺03] führten den hohen Spraykegelwinkel zu Einspritzbeginn auf ein instationäres Verhalten der Kavitation zurück, welches sie an einer transparenten 6-Loch-Düse untersuchten. Die Kavitation bildete im Spritzloch einen zeitlich fluktierenden Schlauch aus, der sich um die Spritzlochachse drehen kann. Erst bei vollständig geöffneter Düsennadel lag die Strömung stabil an der oberen Einlaufkante an. Bauer [Bau07] identifizierte die Vordrosselung im Nadelsitz als primäre Ursache für einen "badewannenförmigen" Spraykegelwinkelverlauf. Er schlug ein einfach anzuwendendes Modell für den Verlauf des Spraykegel-
winkels vor, das auf einer Spiegelung des Nadelhubes beruht.

Nach einem anfänglich größeren Spraykegelwinkel sinkt dieser bis zum Beginn des Nadelschließens (nicht dargestellt) auf ein näherungsweise stationäres Niveau, siehe $t \le 0,3$ ms in Abbildung 6.2. Für die niedrigere Gasdichte in Höhe von $\rho_g = 3 \text{ kg/m}^3$ beträgt dieser Wert $\psi_G \approx 10^\circ$, für die höhere Gasdichte von $\rho_g = 9 \text{ kg/m}^3$ liegt der Wert bei $\psi_G \approx 12,5^\circ$. Dies ist in guter Übereinstimmung mit Gleichung 2.6, welche für die eingesetzte Düse und entsprechenden Gasdichten Werte von $\psi_G = 9,9$ bzw. $\psi_G = 13,2$ liefert. Der dieser Gleichung zugrundeliegende Zusammenhang des Spraykegelwinkels ψ_G mit der Gasdichte ρ_g von

$$\psi_G \sim \rho_g^{0,26} \tag{6.3}$$

kann damit auch in dieser Arbeit bestätigt werden².

Zusammenfassend lässt sich schließen, dass die Sprays etwa linear über der Zeit in den Brennraum eindringen. Zur besseren Verteilung der Fluide könnten bei den zum Einspritzzeitpunkt vorliegenden, niedrigen Gasdichten Maßnahmen zur Reduktion der Eindringtiefe sowie Erhöhung der Spraykegelwinkel sinnvoll sein.

6.1.2 Kalte Flamme und Übergangsbereich

Steht zwischen der Einbringung des Kraftstoffs und der Verbrennung eine ausreichende Homogenisierungsphase zur Verfügung, wurde in den Versuchen eine deutlich zweistufige Wärmefreisetzung beobachtet. Dies ist der Fall bis zu einem Einspritzzeitpunkt von etwa $\theta_{EB} = 50^{\circ}$ KW vOT. Im Übergangsbereich zwischen Kalter Flamme und Hauptwärmefreisetzung lässt sich in vielen Versuchen eine interessante Glättung der Bilder feststellen, die hier näher betrachtet werden soll. Bei späterer Einspritzung (siehe beispielsweise Abbildung 3.2) oder hoher Last (siehe Abbildung 2.10) wurde der Brennverlauf dagegen tendenziell einstufig beobachtet.

In Abschnitt 4.3.2 wurde erklärt, dass die Schattenmesstechnik neben Phasen-

²Es ist anzumerken, dass die Spanne dieser Abhängigkeit in der Literatur von $\psi_G \sim \rho_g^{0,19}$ nach Reitz und Bracco [RB79] bis hin zu $\psi_G \sim \rho_g^{0,5}$ nach Naber und Siebers [NS96] reicht.



Abbildung 6.3: Experiment: Schattenaufnahmen in den Phasen A: kurz vor Kalte Flamme, B: Übergangsbereich und C: Hauptwärmefreisetzung

grenzen Gradienten im Brechungsindex der Gasphase wahrnimmt, die primär auf Konzentrations- und Dichtegradienten beruhen. Abbildung 6.3 zeigt Schattenaufnahmen zu drei charakteristischen Zeitpunkten: Kurz vor der Kalten Flamme, im Übergangsbereich sowie während der Hauptwärmefreisetzung. In der Homogenisierungsphase zwischen der letzten Einspritzung bis zur Kalten Flamme zeigt sich ein feines Muster an Dichtegradienten, siehe Bild A. Während der Kalten Flamme nehmen nun die feinen Dichtegradienten ab, wie sich im Bild B für die Übergangsphase abzeichnet. Während der Hauptwärmefreisetzung (Bild C) nehmen diese Werte schließlich wiederum intensiv zu.

Die Erklärung für die zwischenzeitliche Glättung der Bilder im Übergangsbereich ist der Ausgleich von Dichteunterschieden durch die Kalte Flamme: Abbildung 6.4 zeigt den Temperaturverlauf sowie die Dichtedifferenz zwischen zwei Reaktoren, die sich durch unterschiedliche Luftzahlen auszeichnen.³ Durch den höheren Isentropenkoeffizienten erhöht sich bei der Kompression die Temperatur im mageren Reaktor stärker, wodurch dort die Kalte Flamme früher zündet. Nachdem die Kalte Flamme beide Reaktoren erfasst

³In der Berechnung wurden zwei Reaktoren über instantanen Druckausgleich gekoppelt. Zu Kompressionsbeginn wurde im jeweiligen Reaktor eine ideale Mischung sämtlicher Komponenten angenommen. Die Temperaturunterschiede durch unterschiedliche Verdampfungskühlung durch die mit der Luftzahl variierende Kraftstoffmenge wurde nicht berücksichtigt.



Abbildung 6.4: Reaktionskinetische Simulation: Temperatur und Dichtedifferenz zweier gekoppelter Reaktoren

hat, sinkt der Dichteunterschied auf ein Minimum ab. Dies kann dadurch erklärt werden, dass im fetteren Reaktor mehr Wärme freigesetzt wird. Aufgrund der Druckkopplung wird die resultierende Druckerhöhung in eine Expansion des fetteren und eine Kompression des magereren Reaktors umgesetzt, die schließlich den Dichteunterschied minimiert.

Zusätzlich zur Reduzierung von Dichteunterschieden führt dies auch zu einer Reduktion der Temperaturunterschiede. Es ist somit in Abbildung 6.4 ersichtlich, dass sich die Zeitpunkte der Hauptwärmefreisetzung in den beiden Reaktoren trotz der deutlich unterschiedlichen Luftzahlen sehr gering unterscheiden. Entgegen der Zündzeitdifferenz in der Phase der Kalten Flamme findet die Hauptwärmefreisetzung fast gleichzeitig statt. Für den untersuchten Kraftstoff kann daraus der wichtige Schluss gezogen werden, dass sich alleine durch Luftzahlgradienten die integrale Druckanstiegsrate kaum senken lässt. Dies beruht – neben dem aufgeführten Ausgleich thermodynamischer Zustandsgrößen durch die Kalte Flamme – darauf, dass bei diesem Kraftstoff eine geringe Abhängigkeit des Zündzeitpunktes von der Luftzahl auftritt, siehe Abbildung 2.10. Bei Kraftstoffen, bei denen der Verbrennungsschwerpunkt sehr intensiv von der Luftzahl abhängt, kann dagegen mittels Luftzahlvariation die Wärmefreisetzungsdauer gestreckt werden [SD06].

Neben diesem Einfluss der Luftzahl kann auch das NTC-Verhalten bei global

einheitlicher Luftzahl zu einem Ausgleich der Dichteunterschiede führen. In heißen Gebieten wird dadurch weniger Wärme als in kälteren Zonen freigesetzt. Griffiths et al. [GW02] beobachteten in Folge während der NTC-Phase ein Verschmieren der Temperaturunterschiede.

Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass mittels Schattenmesstechnik zwischen Kalter Flamme und Hauptwärmefreisetzung eine Reduktion der Dichtegradienten beobachtet werden kann. 0-dimensionale Berechnungen zeigen in dieser Phase eine Minimierung der Dichteunterschiede zwischen Bereichen unterschiedlicher Luftzahl. Alle Bereiche, die sich lediglich durch unterschiedliche Luftzahlen auszeichnen, zeigen eine annähernd gleichzeitige Hauptwärmefreisetzung.

6.1.3 Hauptwärmefreisetzung und Flammenausbreitungsmechanismen

Nach der im vorigen Abschnitt beschriebenen Reduzierung von Dichtegradienten im Übergangsbereich, steigen diese während der Hauptwärmefreisetzung stark an. Dies ist sowohl in Aufnahmen mittels Schattenmesstechnik, Bild C in Abbildung 6.3, als auch in der oben vorgestellten Simulation mittels zweier, gekoppelter Reaktoren ersichtlich, siehe Abbildung 6.4. Dieses feine Muster an Dichtegradienten wurde bereits in den ersten optischen Aufnahmen der homogenen Kompressionszündung durch Onishi et al. [OJS⁺79] beobachtet.

Neben diesem charakteristischen Muster der Dichtegradienten im Brennraum soll nun geklärt werden, welcher Ausbreitungsmechanismus der Verbrennung die homogene Dieselverbrennung dominiert. Hierzu werden zunächst experimentelle Daten untersucht. Anhand der Analyse der Ausbreitungsgeschwindigkeit wird der Mechanismus der Flammenausbreitung bestimmt. Dieser Mechanismus dient dann als Basis für die Wahl einer geeigneten Modellierungsstrategie für die Flammenausbreitung in der numerischen Simulation.



Bestimmung der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Verbrennung

Abbildung 6.5: Experiment: OH* - Chemilumineszenz, Aufnahmerate 13,5 kHz

Abbildung 6.5 zeigt das bandpassgefilterte OH*-Chemilumineszenzsignal⁴ der Hauptwärmefreisetzung, aufgenommen mit einer Aufnahmerate von 13.500 Hz. Im Bild 1 ist die Zündung im Bereich oben rechts erkennbar. Von dieser ersten Zündstelle ausgehend breitet sich nun die Verbrennung in zwei unterschiedlichen Modi aus:

- 1. In unmittelbarer Umgebung: Der Chemilumineszenz-Signalbereich des später aufgenommenen Bildes umschließt denjenigen des früheren Bildes vollständig. Dieses Regime ist dadurch gekennzeichnet, dass zwischen jedem Verbrennungsort von Bild 2 eine Verbindung ununterbrochener Lumineszenz zur Zündstelle in Bild 1 gezogen werden kann.
- 2. In entfernten Gebieten, die von der ersten Zündstelle durch Gebiete ohne Chemilumineszenzsignal getrennt sind: Diese Gebiete lassen ein deutliches Muster der 6 Einspritzgebiete erkennen.

Wie in Abschnitt 4.3.2 vorgestellt wurde, handelt es sich bei der Chemilumineszenz um eine in Sichtrichtung integrierende Messtechnik. Die Informationen über die Position in Sichtrichtung gehen dabei verloren und es kann nur eine Aussage über die radiale Ausbreitung der Flamme getroffen werden.

Die radiale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit in unmittelbarer Nähe zur ersten Zündstelle – Regime 1 – ist in Abbildung 6.6 gezeigt. Abhängig von der

⁴Die Chemilumineszenz wird besonders bei Versuchen mit höheren Kraftstoffmengen von der Lumineszenz der Rußstrahlung deutlich übertroffen. Um eine Überbelichtung der Kamera zu vermeiden, wurde ein schmalbandiger Filter in dem jeweiligen Wellenlängenbereich der OH*- bzw. CH*-Chemilumineszenz in Verbindung mit einem Bildverstärker eingesetzt. Damit ließ sich die Ausbreitung der Verbrennung gut analysieren.



Abbildung 6.6: *Experiment: lokale Flammenausbreitungsgeschwindigkeit für den Versuch aus Abbildung 6.5*

Position in der Flammenfront variiert die Ausbreitungsgeschwindigkeit dabei stark im Bereich von etwa $u_A = 20...110$ m/s. In anderen Versuchen mit OH*- und auch CH*-Chemilumineszenzmessung wurde diese Größenordnung bestätigt, teilweise sogar mit Werten von $u_A = ...150$ m/s noch übertroffen. Beachtet werden muss hierbei, dass die experimentell beobachtete Ausbreitungsgeschwindigkeit u_A die Summe aus der Geschwindigkeit der Flammenfront u_{ff} sowie der Verschiebung der Flammenfront ins unverbrannte Gemisch durch die Expansion der heißen Gase u_{exp} darstellt.

Noch deutlich höhere scheinbare Ausbreitungsgeschwindigkeiten ergeben sich, wenn zwischen der Zündung in den entfernten Gebieten ein kausaler Zusammenhang mit der Zündung im ersten Bereich angenommen wird. Der durch den Muldenboden sichtbare Bereich beträgt 49,3 mm, womit ein maximaler Abstand zwischen Zündstellen im ersten und zweiten Bild von etwa l = 40 mm abgeschätzt werden kann. Bei einer Aufnahmerate von 13.500 Hz ergibt sich daraus eine Ausbreitungsgeschwindigkeit von $u_A \approx 540$ m/s. Dies ist in der Größenordnung der Schallgeschwindigkeit *a* des Gases im Brennraum, die vereinfachend mit den Stoffwerten von Luft bei einer Kompressionstemperatur von T = 1000 K zu

$$a = \sqrt{\kappa RT} = \sqrt{1, 4 \cdot 287 \cdot 1000} = 633$$
 [m/s] (6.4)

abgeschätzt werden kann.

Da sich die Druckstörungen mit Schallgeschwindigkeit ausbreiten, ist ein kausaler Zusammenhang zwischen den ersten Zündorten und den entfernt liegenden Gebieten demnach physikalisch möglich.

Turbulente Flammenausbreitung oder/und sukzessive Selbstzündungen?



Abbildung 6.7: Lineares und fluktuierendes Gradientenfeld

In beiden Regimes liegen die Maxima der beobachteten Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flamme deutlich über der in Anhang A.4 abgeschätzten turbulenten Flammenausbreitungsgeschwindigkeit $u_T \leq 15$ m/s. Alle Bereiche der oben beobachteten Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Verbrennung lassen sich jedoch durch sukzessive Selbstzündungen erklären. Skizze A in Abbildung 6.7 skizziert das Durchbrennverhalten durch sukzessive Selbstzündungen nach Zel'dovich et al. [ZLMS70], [Zel80] für einen räumlich konstanten Gradienten einer zündzeitbeeinflussenden Größe. Durch die Zündung des ersten Gebietes und zusätzlich durch die Kompression überlagert, erhöht sich in Folge die Temperatur des restlichen Brennraumes, wodurch auch hier die Verbrennung einsetzt. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der nacheinander ablaufenden, lokalen Zündungen ergibt sich aus dem Gradienten des Zündverzuges.⁵

⁵Der lokale Zündverzug ist dabei primär durch die Temperatur und Luftzahl bestimmt. Vereinfachend wurde hier nur ein Gradient der Temperatur angenommen.

Sind nun wie im Fall A hohe räumliche Gradienten vorhanden, breitet sich die Verbrennung nur langsam aus und die verbrennungsbedingten Druckstörungen können sich im Brennraum ausgleichen. Bild B zeigt, dass durch eine Reduktion des räumlichen Gradienten sich in Folge die Ausbreitungsgeschwindigkeit erhöht. Eine Steigerung in den Bereich der Schallgeschwindigkeit eröffnet die Möglichkeiten für die Ausbildung einer Detonation, siehe Abschnitt 2.5.2. Die obere Grenze der Ausbreitungsgeschwindigkeit stellt eine thermische Explosion einer ideal gemischten Ladung ohne jegliche Speziesoder Temperaturgradienten dar. Hierbei ergibt sich für das gesamte Gas eine gleichzeitige Reaktion, die lediglich kinetisch limitierten Reaktionsraten unterworfen ist. Dies scheint durch die experimentellen Beobachtungen nicht gegeben zu sein.

In Realität ist der Gradient nicht derart einheitlich verteilt, sondern fluktuiert über den Brennraum (Bild C). Neben der geordneten Ausbreitung entlang der lokalen Gradienten resultiert der Fall, dass Zündstellen sich über entfernte Gebiete beeinflussen können. Wie in Skizze C veranschaulicht, können die beiden Zündstellen dabei durch Gebiete geringeren Reaktionsfortschrittes voneinander getrennt sein. Die wichtige Frage, ob und falls ja welche spätere Zündung durch eine frühere Zündung ausgelöst wurde, kann damit jedoch nicht beantwortet werden. Nach der lokalen Zündverzugszeit hätte die spätere Wärmefreisetzung auch ohne die Kompression aufgrund der früheren stattfinden können. Dies wird in Abschnitt 6.1.4 anhand der Ausbildung von Druckschwingungen noch diskutiert werden.

Neben diesem Mechanismus der sukzessiven Selbstzündungen mit Ausbreitungsgeschwindigkeit u_{sp} muss davon ausgegangen werden, dass die Verbrennung lokal in ihrem Umkreis eine klassische turbulente Flammenausbreitung oder allgemeiner eine deflagrative Flammenausbreitung mit Geschwindigkeit u_{def} auslöst. Bislang unverbrannte Gebiete vor den aktuellen Wärmefreisetzungszonen können somit entweder durch die turbulente Flammenfront erfasst werden oder sie kommen zuvor schon zur Selbstzündung. Derjenige Mechanismus, welcher das jeweilige Gebiet vor der instantanen Flammenfront schneller erfasst, dominiert die lokale Umsetzung. Die in experimentellen Untersuchungen beobachtete Flamme breitet sich dadurch mit der höheren der beiden Geschwindigkeiten aus:

$$u_A = max(u_{sp}, u_{def}) \tag{6.5}$$

Dieser Mechanismus wird auch durch Beobachtungen aus der Literatur bestätigt. Loch et al. [LJW⁺05] untersuchten den Einfluss der Fremdzündung auf die homogene Kompressionszündung. Aufnahmen zeigen zwischen Funkenzündung und der Hauptwärmefreisetzung schwache Lumineszenzerscheinungen, die sich zu einem Zeitpunkt deutlich intensivieren, bei dem in anderen Versuchen die Verbrennung durch reine Kompressionszündung einsetzt. Dies lässt darauf schließen, dass sich zwar eine turbulente Flammenausbreitung einstellt, diese jedoch deutlich langsamer voranschreitet als die sukzessiven Selbstzündungen. Hultqvist et al. [HCJ⁺02] beobachteten mittels schneller PLIF-Messtechnik integrale Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Flammenfront in Höhe von 82 m/s, während die Feinstruktur der zerfurchten Flammenfront lediglich mit etwa 15 m/s voranschreitet. Sie vermuten, dass die Feinstruktur auf turbulenter Flammenausbreitung basiert. Die hohe Geschwindigkeit auf globaler Ebene wird dagegen auf den von den frühen Verbrennungen ausgehenden Druckanstieg zurückgeführt, der im unverbrannten zu einem Temperaturanstieg und in Folge zur Zündung führt.

Eine Steigerung der Turbulenz kann hierauf unterschiedliche Auswirkungen haben. Während der Zeitspanne zwischen Kompressionsbeginn und Verbrennung können über den gesamten Brennraum vorliegende Gradienten auch bei hohen Turbulenzintensitäten nicht vollständig beseitigt werden. Vielmehr führt die Turbulenz auf kleineren Skalen zu einer Vermischung. In der Abbildung 6.7 kann man dies als eine Verschiebung des Falles C zu Fall A bzw. B deuten. Christensen [Chr02] beobachtete bei der Steigerung der Turbulenz durch Variation der Kolbenmulde eine reduzierte integrale Druckanstiegsrate. Anhand übereinstimmender kinetischer und turbulenter Zeitskalen führte er dies auf turbulente Dissipationsprozesse zurück. Temperatur und Spezies – primär Radikale – werden über diesen Mechanismus aus den früher gezündeten Bereichen in umliegende Gebiete transportiert. Der exponentielle Zusammenhang der chemischen Umsatzraten mit der Temperatur führt bei einer turbulenzbedingten Absenkung der Temperatur im gezündeten Bereich zu einer stärkeren Reduktion des Gesamtumsatzes im Brennraum als durch die Temperaturerhöhung in den umliegenden Gebieten erzielt wird. Zunehmende Turbulenz reduziert deshalb bei der Modellvorstellung nach Christensen die chemischen Umsatzraten und damit auch die globale Druckanstiegsrate.

Die Folgerung aus diesen Überlegungen ist somit, dass auch sehr hohe Turbulenz die deflagrative Flammengeschwindigkeit u_{def} nicht in einen Bereich ansteigen lassen kann, der die hohen beobachteten Ausbreitungsgeschwindigkeiten u_A erklären könnte. Diese hohen Geschwindigkeiten sind durch sukzessive Selbstzündungen verursacht, die entsprechend der Höhe der Gradienten zündzeitbestimmender Größen sämtliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten $0 < u_{sp} < \infty$ der Verbrennung bis hin zur thermischen Explosion abdecken. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Verbrennung ist bei sehr hohen Gradienten und einer daraus resultierenden langsamen Flammenfortpflanzung mittels Selbstzündungen durch die turbulente Flammengeschwindigkeit nach unten begrenzt.

6.1.4 Druckschwingungen

Im Falle einer vollständigen Homogenisierung sämtlicher Skalare im Brennraum käme es zur einheitlichen Zündung und Verbrennung und es würde sich ein einheitlicher Druck ohne Oszillationen ausbilden. Eine solche Situation liegt bei 0-dimensionalen Reaktorberechnungen vor. In realen Anlagen dagegen ergeben sich Fluktuationen und damit Druckschwingungen beispielsweise durch die Einspritzstrategie [TK96], die Wärmeabfuhr über die Brennraumwände [GW02], [Dec05] oder inhomogen verteilter rezyklierter Abgase.

Die in Abbildung 4.2 gezeigte Geometrie von Kolben und -mulde lässt erwarten, dass die Frequenz auftretender Gasschwingungen mit einfachen Korrelationen für zylindrische Körper nur unzulänglich bestimmt werden kann. Auf deren Frequenzanalyse soll deshalb verzichtet und lediglich die Amplitude der gemessenen Druckschwingungen betrachtet werden.

Die in Abbildung 6.8 gezeigten Werte der Druckanstiegsrate und damit verbundener Druckschwingungsamplitude stammen von einem Betriebspunkt



Abbildung 6.8: Experiment: Druckschwingungen bei hohen Druckanstiegsraten

mit einer 4-fach-Einspritzung zwischen 100°KW und 60°KW vOT. Während bei niedrigen Druckanstiegsraten bis etwa 8 bar/°KW keine Oszillationen auftreten, beobachtet man bei einer Zunahme der Druckanstiegsrate auch eine Steigerung der Druckamplitude.

Bei Versuchen am Realmotor werden bei einer Steigerung der Last hohe Druckanstiegsraten beobachtet [Chr02], [VWWS05], [Sch03]. Aufgrund Qualitätsregelung ist dies zunächst durch eine höhere Kraftstoffkonzentration bedingt. Hierzu addiert sich jedoch im Realmotor ein thermischer Effekt, der aus der Temperaturerhöhung im Brennraum durch vorangegangene Zyklen bei hoher Last resultiert. Im Gegensatz hierzu wurde das Einhubtriebwerk bei allen Versuchen auf eine konstante Brennraumwandtemperatur von 100°C thermisch konditioniert. Die hohen Druckanstiegsraten sind hier lediglich an die höhere Kraftstoffkonzentration gekoppelt.

Ursache von Druckschwingungen

Im vorigen Abschnitt wurde experimentell beobachtet, dass die Hauptwärmefreisetzung nicht im gesamten Brennraum gleichzeitig beginnt. Gemäß Abbildung 6.9 steigen im ersten Zündgebiet durch die verbrennungsbedingte Wärmefreisetzung Temperatur und somit auch Druck an; es entsteht zum Zeitpunkt t_1 ein primäres Druckungleichgewicht im Brennraum, welches sich durch die Druckdifferenz zwischen den Druckmessstellen A und B in Höhe



Abbildung 6.9: *Ausbildung hoher Druckamplituden bei zusammentreffender Druckwelle und Wärmefreisetzung*

von Δp_1 bemerkbar macht. Der lokal höhere Druck im Gebiet der ersten Zündung ruft Bewegungen des Gases hervor, woraus sich eine mit lokaler Schallgeschwindigkeit ausbreitende Druckwelle ergibt. Zum Zeitpunkt t_2 hat diese Druckwelle das gegenüberliegende Gebiet erreicht. Trifft die an dieser Stelle verbrennungsinduzierte Druckerhöhung Δp_2 mit der von der ersten Zündung ausgesandten Druckwelle zusammen, so resultiert ein maximales Druckungleichgewicht zwischen den Stellen A und B, welches das primäre Ungleichgewicht deutlich übertrifft. Die darauf basierenden Ausgleichsbewegungen oszillieren nachfolgend im Brennraum und äußern sich bei der Druckindizierung⁶ ähnlich wie Schwingungen aufgrund klopfender Verbrennung. Dabei handelt es sich nicht um eine Detonation im eigentlichen Sinne, da die Kopplung zwischen Druckwelle und Wärmefreisetzung nur singulär und nicht über eine Lauflänge auftritt, weshalb sich geringere Druckamplituden ausbilden. Pöschl [Pös06] hat bei Detonationen, die er über die Lauflänge eines automobilen Kolbendurchmessers beobachtete, Druckwellen mit Amplituden von über 50 bar beobachtet.

Die Höhe der primären Druckdifferenz im Brennraum ist an die lokale thermische Leistung, also die Höhe der freigesetzten Wärme sowie deren Umsatz-

⁶Unter Indizierung versteht man die Druckmessung im Brennraum; indizierte Größen basieren auf dem Brennraumdruck.

dauer im entsprechenden Zündgebiet gekoppelt. Bei einer nahstöchiometrischen Ladung wird viel Wärme in kurzer Zeit freigesetzt, siehe Abbildung 2.10, woraus starke Druckdifferenzen resultieren. Aufgrund des allgemein höheren Niveaus der Kraftstoffkonzentration ist die Wahrscheinlichkeit für sehr magere Gebiete, in denen keine nennenswerte Wärmemenge freigesetzt wird, gering. Es können sich in Folge großflächigere, zusammenhängende Zündgebiete ausbilden, die die Druckungleichheiten intensivieren. Mit zunehmender Last ist deshalb eine Zunahme der Amplitude von Druckschwingungen zu erwarten.

6.2 Reaktionskinetische Betrachtung der Wassereinspritzung

Nachdem das Verständnis für die Prozesse bei der homogenen Kompressionszündung erarbeitet wurde, kann nun die zusätzliche Wasserzugabe betrachtet werden. Wichtig ist hierbei zu berücksichtigen, dass eine direkte Wassereinbringung in den Brennraum die Sauerstoff-Konzentration nicht senkt, womit sich dieses Verfahren deutlich von einer Abgasrückführung abgrenzt. Aus den Grundlagen in Abschnitt 2.3 kann deshalb geschlossen werden, dass die Reaktionsraten der Kohlenwasserstoffoxidation im Falle einer Wassereinspritzung deutlich geringer abgesenkt werden als bei Abgasrückführung. Dennoch sind aus kinetischer Sicht Reduktionen der Umsatzraten zu erwarten: Die Absenkung der Temperatur im Brennraum durch die Verdampfungskühlung reduziert die stark temperaturabhängigen chemischen Reaktionen direkt und verzögert somit die Zündung. Zudem erhöht der Wasserdampf die Masse im Brennraum und erhöht durch seine hohe Wärmekapazität die Gesamtwärmekapazität der Mischung. Exotherme Reaktionen führen in Folge zu einem geringeren Temperaturhub, weshalb für nachfolgende Reaktionen eine geringere Umsatzrate zu erwarten ist.

Methodik

Dieses grundlegende Verständnis soll nun mittels einer 0-dimensionalen Betrachtung weiter entwickelt werden. Diese Methode wurde bereits in den Grundlagen (Abschnitt 2.3) vorgestellt. In der Simulation sind die Wandwärmeübertragung sowie Leckageverluste (Blow-by) nicht berücksichtigt. Die Starttemperatur beträgt für alle hier gezeigten Fälle $T_0 = 390$ K und der Startdruck $p_0 = 1,2$ bar. Die Kraftstoffeinbringung wird nicht modelliert; zu Kompressionsbeginn liegt bereits eine Kraftstoff-Luft Mischung vor. Das Kompressionsverhältnis beträgt $\epsilon = 16, 0$.

Bei der Wassereinspritzung ist zu beachten, dass in einer 0-dimensionalen Betrachtung keine räumlichen Gradienten vorhanden sind, womit sich auch keine Phasengrenze zwischen flüssigen und gasförmigen Komponenten darstellen lässt. Somit kann in den gasgefüllten Brennraum nur Wasserdampf eingebracht werden. Die zeitliche Verteilung wird durch eine Gauss´sche Glockenkurve mit einer Halbwertsbreite von 22,5°KW modelliert, was der Öffnungsdauer des verwendeten Injektors bei maximal untersuchter Wasser-Einspritzmenge entspricht. Dies findet bei einem konstanten Einspritzzeitpunkt⁷ von 135°KW vOT statt. Zu diesem Zeitpunkt übersteigt ohne Wassereinspritzung die Temperatur im Brennraum 200°C, womit von einer merklichen Tropfenverdunstung ausgegangen werden kann.

Die Verdampfungsenthalpie des Wassers wird getrennt von der stofflichen Einbringung abgeführt (siehe Abbildung 6.12), wobei die eingespritzte Tropfengröße mit einem einheitlichen Durchmesser von $d_0 = 10 \ \mu$ m angenommen wurde. Zur Untersuchung des Tropfengrößeneinflusses wird dieser unten auch zu $d_0 = 20 \ \mu$ m variiert werden. Die Tropfen sollen nach der Aufheizphase auf die Sättigungstemperatur gemäß dem $d^2 - Gesetz$ verdampfen, wobei der jeweilige Verdampfungsmassenstrom zu einem Verdampfungswärmestrom umgerechnet wird:

$$d^{2}(t) = d_{o}^{2} - \left[\frac{4 \cdot Nu \cdot \lambda_{g}}{\rho_{f} \cdot c_{p,g}} \cdot ln(B_{q}+1)\right] \cdot t$$

Die Verdampfungszeit wird maßgeblich durch die nach Spalding benannte Wärmetransportzahl B_q beeinflusst, die sich gemäß

$$B_q = \frac{c_{p,g} \cdot (T_{\infty} - T_S)}{\Delta h_f}$$

aus der Wärmekapazität $c_{p,g}$ des umgebenden Gases, der Umgebungstemperatur T_{∞} , der Sättigungstemperatur T_S sowie der Verdampfungsenthalpie Δh_f ergibt. Die gute Eignung des d^2 -Gesetzes für Wasser sowie dessen Anwendungsweise kann der einschlägigen Literatur, z.B. Turns [Tur00], entnommen werden.

Erforderliche Wassermenge

In der kinetischen Studie soll zunächst geklärt werden, wie stark die Kühlwirkung des eingespritzten Wassers ist und wie hoch die eingespritzten Wassermengen für eine Verzögerung der Zündung zum OT sein müssen. Die Berechnung erfolgte dabei für die unterschiedlichen Luftzahlen und Wassermengen in getrennten Rechnungen.

⁷Der Einsprizzeitpunkt sei hier als das Zentrum der Gauss´schen Verteilung definiert.



Abbildung 6.10: Reaktionskinetische Simulation: Druck und Temperatur ohne und mit Wasserzugabe

Abbildung 6.10 zeigt den Druck- und Temperaturverlauf für eine Luftzahl $\lambda = 2,0$ zum einen ohne Wasserzugabe und zum anderen mit einer Wassereinspritzmenge entsprechend der Kraftstoffmenge (Ω =1,0). Im Temperaturverlauf ist deutlich der Einfluss der zu 135°KW vOT stattfindenden Wassereinspritzung ersichtlich. Von 100°KW vOT bis zur Zündung des heißeren Reaktors kann die Temperatur dauerhaft um ca. 100 K reduziert werden. Während sich im Temperaturverlauf die Kühlwirkung des Wassers deutlich bemerkbar macht, unterscheiden sich die Druckverläufe bis zur Zündung nur geringfügig.

Sowohl die Zündung der Kalten Flamme als auch der Hauptwärmefreisetzung findet in beiden Fällen etwa bei denselben Temperaturen von 770 K bzw. 1000 K statt.⁸ Im "trockenen" Fall ohne Wassereinspritzung erreicht die Kompression diese Temperaturen bereits bei 32° bzw. 20°KW vOT. Die Kühlwirkung mittels einer zugegebenen Masse von 3,3 Massen-% Wasser zur Luft (Ω =1,0 bei λ =2,0) verzögert die Zündstufen auf 13° bzw. 5°KW vOT. Aufgrund der homogenen Mischung in den 0-dimensionalen Reaktoren erfolgt die Hauptwärmefreisetzung explosionsartig im gesamten Volumen. In der Simulation wurde die Wärmeübertragung nicht berücksichtigt, weshalb nach der Wärmefreisetzung Temperatur und Druck bis zum Oberen Totpunkt noch deutlich an-

⁸Dies ist ein erster Hinweis, dass das Wasser zwar einen physikalischen Einfluss auf die Zündung hat, chemisch jedoch bei Zündbedingungen als inert zu betrachten ist.

steigen.9



Leistung und Wirkungsgrad

Abbildung 6.11: Reaktionskinetische Simulation: Beeinflussung von Leistung und Wirkungsgrad durch Wasserzugabe

Grafik 6.11 zeigt als Ergebnis der reaktionskinetischen Simulation den Einfluss der Wassereinspritzung zum einen auf die indizierte spezifische Leistung, welche auf einen Hubraum von V_H =11 normiert wurde und zum anderen auf den indizierten Wirkungsgrad des Hochdruckprozesses. Der Ausgangspunkt ist hierbei die oben erläuterte Kompressionszündung von Heptan, welche bei dem vorliegenden Kompressionsverhältnis von $\epsilon = 16,0$ zu einer sehr frühen Zündung neigt. Der Anstieg der erzielbaren Leistung ist deshalb im Wesentlichen auf die oben geschilderte Verschiebung der Zündung nach spät zurückzuführen, da durch den niedrigeren Druck Kompressionsarbeit

$$W_V = -\int p \, dV \tag{6.6}$$

eingespart wird.

Der maximale Leistungsanstieg durch die Wassereinspritzung beträgt unabhängig von der Last bzw. Luftzahl etwa 10%. Erhöht man die Wassereinspritzmenge über diesen Bestpunkt hinaus, so wird die Zündung immer weiter in

⁹Im Einhubtriebwerk dominiert hier die Wärmeübertragung derart, dass nach der Wärmefreisetzung trotz Kompression der Druck kaum mehr ansteigt oder sogar abfällt, siehe z.B. Abbildung 6.17.

die Expansionsphase verschleppt, was zu einer Leistungsminderung führt. Bei extremen Wassermengen wird die Verbrennung vollständig unterdrückt. Bei einer Luftzahl von $\lambda = 1, 0...2, 0$ zündeten die Reaktoren gerade noch bei dem letzten dargestellten Punkt der Kurven in Abbildung 6.11. Mehr Wasser verhindert dann die Zündung vollständig. Hierbei muss berücksichtigt werden, dass die zugegebene Wassermenge sich sowohl aus dem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis Ω als auch der Luftzahl λ ergibt. Der Vergleich der Verläufe für $\lambda = 1,0$ und $\lambda = 2,0$ zeigt, dass eine Halbierung der Last etwa eine Verdopplung des maximalen Ω erlaubt. Dabei ist die Wassermenge konstant und kann somit als limitierender Faktor für die Zündung identifiziert werden.

Die Variation der Wassereinspritzmenge fand bei konstanter Luft- und Kraftstoffmenge bei Kompressionsbeginn statt, Wandwärmeverluste wurden nicht berücksichtigt. Damit spiegelt sich bei den entsprechenden Luftzahlen der Verlauf der Leistung auch im Wirkungsgrad (rechte Grafik in Abbildung 6.11) wider. Auf den jeweiligen Ausgangspunkt bezogen steigert sich dieser ebenfalls um ca. 10%. Die Steigerung des Wirkungsgrades mit der Luftzahl ist auf die niedrigere Maximaltemperatur zurückzuführen, wodurch sich die Dissoziation des Brennraumgases verringert. Die Dissoziation reduziert den verbrennungsbedingten Temperatur- und damit auch den Druckhub besonders stark bei niedrigen Luftzahlen und mindert die Expansionsarbeit.

Auswirkung der Tropfengröße



Abbildung 6.12: Reaktionskinetische Simulation: Einfluss der Tropfengröße

Nun soll mit der reaktionskinetischen Simulation der nötige Tropfendurchmesser des eingespritzten Wassers abgeschätzt werden. Während die Tropfen bislang zu $d_0 = 10 \ \mu m$ angenommen wurde, sollen nun in einer getrennten Berechnung Tropfen mit einem größeren Durchmesser von $d_0 = 20 \ \mu m$ eingebracht werden. Abbildung 6.12 stellt den resultierenden Temperaturverlauf sowie den für die Verdampfung aufzuwendenden Wärmestromverlauf dar. Modelliert wurde der eingespritzte Massenstrom wie oben mit einem Maximum bei 135°KW vOT. Es ist ersichtlich, dass der für die Verdampfung aufzuwendende Wärmestrom der kleineren Tropfen mit nur geringer Verzögerung der Einspritzmenge folgt und ein Maximum bei 120°KW vOT aufweist. Die Tröpfchen verdampfen zügig und bis zur Zündung vollständig. Anders dagegen verhalten sich die größeren Tropfen mit $d_0 = 20 \ \mu$ m. Nachdem diese nur zögerlich verdampfen, sind zur Zündung der Kalten Flamme noch Flüssiganteile vorhanden, weshalb beide Wärmefreisetzungsstufen früher stattfinden. Da die Temperaturabsenkung durch die kleineren Tröpfchen früher stattfindet und somit während der Kompression ein niedrigerer Druck im Brennraum vorhanden ist, wird hier auch weniger Verdichtungsarbeit zugeführt. Durch die geringere zugeführte Arbeit ergibt sich allgemein im Falle einer früheren Verdampfung eine niedrigere Temperatur und damit längere Zündverzögerung. Folglich kann geschlossen werden, dass hinsichtlich der Wärmeund Stoffübertragung kleine Tropfen vorteilhaft sind; aus thermodynamischer Sicht ist das Wasser umso effektiver, desto früher - falls keine Wandfilmbildung erfolgt beispielsweise ins Saugrohr eines Realmotors - es eingebracht wird.

Chemischer Einfluss des Wassers

Abschließend soll gezeigt werden, dass Wasser keinen chemischen Einfluss auf den Zündzeitpunkt beider Wärmefreisetzungsstufen aufweist. Wie oben gezeigt, wird bei der 0-dimensionalen Simulation die Abfuhr des Verdampfungswärmestromes getrennt von der Stoffeinbringung modelliert. Statt des Wassers kann man nun jede andere im Mechanismus enthaltene Spezies stofflich einströmen lassen und einen dem Verdampfungswärmestrom des Wassers entsprechenden Wärmestrom abführen. Hierfür wurde nun Stickstoff gewählt, der im Mechanismus inertes Verhalten aufweist.



Abbildung 6.13: Reaktionskinetische Simulation: Beeinflussung von Temperatur und Formaldehyd-Massenbruch durch Eindüsung von N₂ statt H₂O

Abbildung 6.13 zeigt mittels Temperaturverlauf, dass die Zündung der Kalten Flamme sowie der Hauptwärmefreisetzung zu identischen Zeitpunkten stattfinden, wenn N_2 statt H_2O eingedüst wird. Durch die höhere Wärmekapazität des Wassers fällt zwar dessen Temperaturhub bei der Hauptwärmefreisetzung geringer aus, ansonsten liegen jedoch praktisch identische Verläufe vor. Diese Übereinstimmung zeichnet sich auch bei der wichtigen Spezies Formaldehyd ab, die sich in der Kalten Flamme bildet und während der Hauptwärmefreisetzung wiederum abbaut. Auch weitere, zündbestimmende Spezies wie z.B. OH liefern einen gut übereinstimmenden Verlauf bei Wasser- bzw. Stickstoffeindüsung. Der reaktionskinetische Einfluss des Wassers auf die Zündung ist damit vernachlässigbar. Entscheidend ist dessen Kühl- und Verdünnungswirkung auf die Ladung.

Das Wasser kann nach obigen Betrachtungen bei der verhältnismäßig geringen Temperatur während beider Zündstufen als inert betrachtet werden. Während der Hauptwärmefreisetzung steigt die Temperatur jedoch stark an und es kommt zur teilweisen Dissoziation des Wassers. Die Dissoziation soll nun anhand der Molenbrüche an OH im chemischen Gleichgewicht quantifiziert werden. Die Berechnung des chemischen Gleichgewichtes ist ein rein thermodynamisches Problem, siehe Abschnitt 2.3. Die Basis für die Berechnung stellt eine Menge an Spezies mit deren zugehörigen thermodynami-



Abbildung 6.14: Thermodynamische Simulation: Molenbruch OH im chemischen Gleichgewicht

schen Stoffdaten dar. Die zu berücksichtigenden Spezies und deren Stoffdaten wurden zum Vergleich aus verschiedenen Reaktionsmechanismen entnommen: (1) der in der CFD-Simulation eingesetzte, reduzierte Reaktionsmechanismus für n-Heptan [MN06], (2) der hinsichtlich Wasserstoff-Verbrennung – und damit auch für die Wasser-Kinetik – gut validierte Reaktionsmechanismus [CCS⁺04] sowie (3) der oftmals für die Methan-Verbrennung eingesetzte Mechanismus *GRI 3.0* [SGF⁺].

Der Ausgangszustand ist eine Mischung aus 11mol O₂ und 41,38mol N₂ bei einer Temperatur von *T* = 300 K und einem Druck von *p* = 40 bar. Entsprechend $\lambda = 1,0$ und $\Omega = 1,0$ addieren sich hierzu noch 5,56mol Wasser und/oder 1mol n-Heptan.¹⁰ Mit diesem Gemisch wurde nun isobar für verschiedene Temperaturen das Gleichgewicht bestimmt. Abbildung 6.14 zeigt den resultierenden

¹⁰Um die Gesamtmolzahl in allen Fällen gleich zu halten und damit die Molenbrüche richtig zu stellen, wurden für die Berechnungen ohne Wasser bzw. Kraftstoff deren Molmenge noch als inertes Medium hinzugefügt.

OH-Molenbruch. Während bis ca. 1000 K die OH-Konzentration sehr gering ist, nimmt sie dann durch die Dissoziation des Wassers zu. Die Spezies bzw. Stoffwerte des reduzierten Reaktionsmechanismus für n-Heptan liefern bei der reinen Zugabe von Wasser sowohl qualitativ als auch quantitativ einen gut übereinstimmenden Verlauf mit denjenigen der beiden detaillierteren Mechanismen für H_2 und CH_4 , siehe Kurven 1 bis 3, weshalb dessen Speziesumfang als ausreichend für die Analyse erscheint.

Wird nun zusätzlich Kraftstoff beigefügt, sinkt die Gleichgewichtskonzentration an OH ab (Kurve 4). Im Falle der Heptanverbrennung ohne Wasser reduziert sich dieser Wert weiter, Kurve 5. Somit kann geschlossen werden, dass die Dissoziation des Wassers bei hohen Temperaturen die OH-Konzentration anhebt. Wie im vorigen Abschnitt 2.3 dargelegt wurde, spielt OH eine zentrale Rolle bei der Hochtemperaturkinetik. Erweitert man die obige Betrachtung über das chemische Gleichgewicht hinaus, so kann auch bei der realen Verbrennung Wasser einen chemischen Einfluss haben. In der Untersuchung von Roberts et al. [RNC05] zeigt sich nach Elimination von Temperatureffekten beispielsweise eine Reduktion der Benzolkonzentration. Da Benzol die Basis für größere PAK's darstellt, wurde daraus ein positiver Effekt auf die Rußbildung geschlossen.

Zusammenfassend wurde anhand einer reaktionskinetischen Studie gezeigt, dass Wasser die Zündung effektiv zum OT verschleppen kann, wenn ohne Wasser die Verbrennung zu früh stattfindet. In Folge erhöht sich die indizierte Leistung und der indizierte Wirkungsgrad. Aus Wärme- und Stoffübertragungssicht sind kleine Tropfen wünschenswert, aus thermodynamischer Sicht eine frühe Einspritzung. Das Wasser hat auf die Zündung keinen chemischen Einfluss. Die Dissoziiation bei höheren Temperaturen kann einen chemischen Einfluss – z.B. auf die Schadstoffbildung – aufweisen; dominierend ist jedoch der physikalische Einfluss durch die intensive Kühlwirkung.

6.3 Getrennte Einspritzung von Kraftstoff und Wasser

Nach den Erfahrungen aus der 0-dimensionalen Betrachtung soll deren Anwendbarkeit nun an der Einhubmaschine sowie mittels einer detaillierteren. 3-dimensionalen Studie vertieft werden. Wie reaktionskinetisch im vorigen Abschnitt gezeigt wurde, nimmt der thermodynamische Nutzen der Wassereinspritzung mit einer Frühverlagerung der Einbringung zu. Die sehr frühe Einspritzung des Wassers ist jedoch aus zweierlei Gründen problematisch: Auf der einen Seite kann damit im Realmotor ein Wassereintrag ins Schmieröl kaum verhindert werden, was Korrosions- und Schmierprobleme nach sich zieht, siehe Abschnitt 3.3. Auf der anderen Seite wurde in der reaktionskinetischen Studie die Spray-Wand-Wechselwirkung nicht berücksichtigt. In der Einhubmaschine führt diese aufgrund der Beheizung auf 100°C – wie unten noch gezeigt werden wird - zu einer vergleichsweise langandauernden Benetzung des Kolbens. Die benetzte Fläche nimmt dabei tendenziell bei einer frühen Einspritzung zu und das Abdampfen ist gerade bei niedrigen Lasten bis zur Zündung nicht gewährleistet. Dieses Wasser ist damit praktisch wirkungslos [SS05b].

Im Vergleich zur unten beschriebenen Emulsionseinspritzung erfordert die getrennte Einspritzung von Kraftstoff und Wasser einen hohen Systemaufwand durch die zwei Einspritzsysteme, siehe Abschnitt 4.2. Gegenüber der Emulsion verdampfen die Kraftstofftröpfchen deutlich intensiver, da der Ballast der hohen Verdampfungsenthalpie des Wassers fehlt. Findet die Wassernach der Kraftstoffeinspritzung statt, homogenisiert der Impuls des Wassers das Gemisch zusätzlich.¹¹ In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass durch eine getrennte Einspritzung ein hoher Grad an Homogenität des Kraftstoffs erzielt wird. Die nicht deckungsgleiche Verteilung des Wassers beeinflusst in Folge den Brennverlauf und die Emissionen entscheidend.

¹¹In einer früheren Publikation wurde gezeigt, dass das Wasser vorteilhaft nach dem Kraftstoff eingebracht wird, siehe [SS05b].

6.3.1 Gemischbildung und Verbrennungsablauf

Zunächst soll durch die Analyse von Bildfolgen das optische Erscheinungsbild der getrennten Einspritzung von der Fluideinbringung bis zur Verbrennung aufgezeigt werden. Da die Düsen einen wesentlichen Einfluss auf die Homogenisierung der Medien haben, sollen hier zwei wesentlich unterschiedliche Konfigurationen vorgestellt werden: Zum einen konventionelle 6-Loch-Düsen (K6). Zum anderen die Düsen E6/E12, deren Kuppen mittels Erodieren bearbeitet wurden, woraus eine verkürzte Lochlänge sowie ein aufgerauter Austrittsrand resultiert (siehe Abschnitt 4.2).

Düsenkonfiguration Kraftstoff K6, Wasser K6

Abbildung 6.15 zeigt eine Sequenz beim Einsatz von konventionellen 6-Loch Düsen K6 für Kraftstoff und Wasser. Zum Einspritzbeginn (A1) sind deutlich unterschiedliche Eindringtiefen und Spraykegelwinkel der einzelnen Sprays zu sehen. Dies erklärt sich teilweise durch die um 9° zur Zylinderachse angewinkelte Einbaulage des Injektors. Rechnet man diesen Effekt heraus, so ergibt sich zum Zeitpunkt A1 auch bei den tatsächlichen Eindringtiefen eine sehr weite Streuung im Bereich $L_G = 14...38$ mm. Die höheren Eindringtiefen der linken Sprays entsprechen den in Abschnitt 6.1 ermittelten Werten. Als Ursache für die kürzere, tatsächliche Eindringtiefe auf der rechten Seite kann vermutet werden, dass hier die Luft aufgrund der Wandnähe nur schwer ausweichen kann. Links dagegen ist der Strahl stärker transversal ausgerichtet und kann somit die Luft leichter mitreißen und verdrängen. Bei den kürzeren Eindringtiefen berechnen sich leicht höhere Spraykegelwinkel von $\psi_G = 10,5^{\circ}$ im Vergleich zu ψ_G = 9, 1° bei den tiefer eindringenden Sprays. Im Rahmen der Auswertegenauigkeit entsprechen diese Winkel damit denjenigen beim zentralen Einbau der Düse.

In der Sequenz ist erkennbar, dass die Sprays aufgrund der zum Einspritzzeitpunkt niedrigen Temperatur im Brennraum nur teilweise im Flug verdampfen. Ab Bild A2 kommt es zu einem intensiven Auftreffen der Sprays auf die Kolbenmuldenwand. Die gesamte Anlage und somit auch die Kolbenmulde ist auf eine Temperatur von 100°C beheizt. Diese liegt deutlich unterhalb der Siedetemperatur langkettiger Kohlenwasserstoffanteile im Dieselkraftstoff von



Abbildung 6.15: Experiment: Sequenz einer Schattenaufnahme mit $\lambda = 3,0$, $\Omega = 0,90$, Düsen K6 (A: Diesel-Einspritzung, B: Wasser-Einspritzung, C: Homogenisierung, D: Verbrennung)

etwa 360°C [Ara05]. Daraus ist zu schließen, dass der Spray die Kolbenmuldenwand mit Kraftstoff benetzt. Höhersiedende Komponenten des anhaftenden Kraftstoffs dampfen in Folge vergleichsweise langsam ab. Später auftreffende Tröpfchen können zwar den bereits anhaftenden Film teilweise abtragen, doch gerade zum Einspritzende nimmt bei schließender Düsennadel der Impuls der Tröpfchen immer weiter ab: Eine Benetzung ist unvermeidbar.

Nicht anhaftende Tröpfchen oder wieder aus dem Film herausgelöste werden teilweise in Umfangsrichtung abgelenkt und stoßen mit dem jeweils benachbarten Spray zusammen. Im Bild A4 ist in der azimuthalen Mitte von benachbarten Sprays eine optisch dichte Zone vorhanden, die auf die Spraykollision hindeutet. Spielt man die Sequenz als Video ab, so ist gut zu erkennen, dass es in diesem Bereich wieder zu einer Rückströmung in den Zentralbereich kommt. Diese Rückbewegung fördert die Mischung von Kraftstoff und Luft deutlich und nach der Einspritzung (A5) sind im Brennraum nur noch geringe Dichtegradienten erkennbar.

In dieses Gemisch wird nun Wasser eingespritzt (Bildreihe B). Hierbei bilden sich trotz der höheren Gasdichte von 8...9 kg/m³ nur geringfügig höhere Spraykegelwinkel aus. Für die Wassereinspritzung sind die Eindringtiefen sowie Spraykegelwinkel einheitlicher. Dies könnte durch die größeren Tröpfchen bei der Wassereinspritzung (siehe Abschnitt 2.2) begründet sein. Der höhere Impuls der Tröpfchen führt zu einem einheitlicheren Spraybild, da diese träger auf Dichteänderungen oder Bewegungen des umgebenden Gases reagieren.

Obwohl die Gastemperatur kompressionsbedingt höher liegt als bei der Kraftstoffeinspritzung, verdampfen auch die Wassertröpfchen nicht vollständig im Flug. Neben den vergleichsweise großen Tropfen ist dies vor allem auf die hohe Verdampfungsenthalpie des Wassers zurückzuführen, welche in einer deutlich niedrigeren Spaldingschen Wärmetransportzahl B_q resultiert. ¹² Gemäß d²-Modell, Gleichung 6.6, ergibt sich damit auch rechnerisch eine längere Verdampfungsphase. Ab Bild B3 kommt es zum Wandaufprall. Die nachfol-

$$\frac{B_{q,H_2O}}{B_{q,Krst.}} = \frac{T_{\infty} - T_{S,H_2O}}{T_{\infty} - T_{S,Krst.}} \cdot \frac{\Delta h_{f,Krst.}}{\Delta h_{f,H_2O}} = \frac{650K - 450K}{650K - 580K} \cdot \frac{0,15 \cdot 10^6 \, J/kg}{2,0 \cdot 10^6 \, J/kg} \approx 0,2$$

¹²Nimmt man vereinfachend einheitliche Umgebungstemperatur $T_{\infty} \approx 650$ K und -druck $p_{\infty} \approx 10$ bar für beide Einspritzungen an, so lässt sich für Undecan als Referenzsubstanz für Dieselkraftstoff abschätzen:

⁽Siedetemperaturen T_S aus Abbildung 2.4, Verdampfungsenthalpien Δh_f von Wasser gemäß [Nat] und von Undecan gemäß [GHK⁺62]).

gende Querbewegung der Sprays an der Wand, die gegenseitige Spraykollision und das Rückströmen zum Zentralbereich ist mit der Kraftstoff-Einspritzung vergleichbar. Der sich ausbildende Wandfilm kann auch in der Homogenisierungsphase nicht vollständig abgetragen werden. Dies zeigt sich deutlich durch die bis zur Verbrennung existierenden Wasserfilme auf dem Glasboden, die das Muster der aufgetroffenen Strahlen widerspiegeln. Das hier anlagernde Wasser verdampft nicht vor der Zündung und trägt damit nur unzulänglich zur Kühlung der Ladung und der gewünschten Verschleppung des Brennbeginnes bei.

Die Verbrennung äußert sich in einem feinen Muster an Dichtegradienten (Bildreihe D bzw. Abbildung 6.3,C). Dieses ist charakteristisch für die homogene Kompressionszündung (siehe z.B. [OJS⁺79]) und stammt von feinskaligen Gradienten der Gemischzusammensetzung, wie bereits in Abschnitt 6.1.3 diskutiert wurde. Manche Zonen sind trotz der langen Homogenisierungsdauer sogar derart fett oder enthalten noch flüssige Tröpfchen, dass sich eine rußbildende Verbrennung ergibt, die sich in der Sequenz in Bildreihe D in Form heller Punkte beobachten lässt. Diese hell leuchtenden Punkte sind auch in Versuchen ohne Schmieröl¹³ zu beobachten und damit nicht durch Schmieröl verursacht, das durch die Kolbenbewegung in den Brennraum befördert werden könnte.

Düsenkonfiguration Kraftstoff E6, Wasser E12

Wie oben gezeigt, wird das Wasser bei der konventionellen Düsenkonfiguration nur unzulänglich genutzt. Die wandanhaftende Menge verdampft nicht vollständig bis zur Verbrennung, kühlt nicht effektiv und erfüllt somit das wichtige Ziel, die Zündung zu verschleppen, nur teilweise. Eine modifizierte Düsenart soll hier Abhilfe schaffen: Durch das Erodieren der Kuppen sowohl der Kraftstoffdüse E6 als auch der Wasserdüse E12 wurden die Löcher verkürzt $(L/D \approx 4)$ und der Austrittsrand aufgeraut, siehe Tabelle 4.1.

In der Sequenz 6.16 ist ersichtlich, dass die Düsenmodifikation die einzelnen Spraykegelwinkel für die Kraftstoffeinspritzung (Bildreihe A) deutlich gegen-

¹³Die Einzelschusscharakteristik des Einhubtriebwerkes erlaubte für einzelne Versuche den Betrieb ohne Schmieröl.



Abbildung 6.16: Experiment: Sequenz einer Schattenaufnahme, A: Diesel-Einspritzung, B: Wasser-Einspritzung, C: Verbrennung (Düsen: Diesel E6, Wasser E12)

über dem oben beschriebenen Fall der konventionellen Düse ansteigen lässt, siehe auch [SS05a]. Die Ränder der Sprays zeichnen sich deutlich unschärfer ab. Sowohl durch die höheren Spraykegelwinkel als auch den aufgerissenen Sprayrand intensiviert sich der Lufteintrag in den Spray deutlich, womit zum einen direkt die Homogenisierung verbessert wird. Zum anderen tauscht der Spray bei seinem Weg durch den Brennraum deutlich mehr Impuls mit der Luft aus, wodurch in der Gasphase eine intensivere Bewegung induziert wird. Der Sprayrand wird dadurch stark abgebremst. Im Vergleich zu der konventionellen Düse ist in Folge die Kontur des Spraybereiches zwischen Spitze und den Sprayflanken eher pfeilförmig als abgerundet. Diese Kontur zeichnet sich im Bild A1, Spray links und links unten bzw. Bild A2 Spray rechts oben besonders deutlich ab.

Welche der beiden Düsen mehr turbulente kinetische Energie in der Gasphase erzeugt, konnte nicht geklärt werden. Die konventionellen Düsenlöcher generieren kompakte Sprays mit hoher Tröpfchengeschwindigkeit, deren hohe Geschwindigkeitsgradienten zur Umgebung intensive Quellen für turbulente kinetische Energie in der Gasphase darstellen. Andererseits wird bei der bearbeiteten Düse durch den rauen Lochrand die Turbulenz der austretenden Tröpfchen erhöht, wodurch in Folge auch die turbulenten Schwankungen der Gasphase erhöht werden. Zudem werden durch die hohen Spraykegelwinkel größere Bereiche des Brennraumes erfasst.

Ein höherer Spraykegelwinkel und ein damit verbundener höherer Impulsaustausch mit dem Brennraumgas fördern die Gleichverteilung sowie die Verdampfung des Kraftstoffs. Die erhöhte Verdampfung zeichnet sich während der Einspritzung bei dem Vergleich der Druckverläufe kaum ab, siehe Abbildung 6.17. Ein wesentlicher Unterschied kann jedoch in der wandanhaftenden Kraftstoffmenge beobachtet werden. Dies äußert sich bei der konventionellen Düsenanordnung in einer wandnahen Diffusionsflamme, die zeitgleich mit der Hauptwärmefreisetzung beginnt und darüber hinaus noch lange – in manchen Versuchen über mehr als 40°KW – abbrennt. In den Schattenaufnahmen zeichnet sich die Diffusionsflamme durch eine intensive Lumineszenz im wandnahen Bereich auf der Achse der jeweiligen Sprays ab, die von Rußstrahlung herrührt. Dieses Phänomen wird bei der Beschreibung der Emissionen (Abschnitt 6.3.4) noch ausführlich erklärt werden.

Besonders wirkungsvoll sind die erodierten Düsenkuppen darüber hinaus in Bezug auf die Nutzung des Wassers. Beim gezeigten Experiment in Abbildung 6.16 wurde zusätzlich die Düsenlochanzahl beim Injektor für die Wassereinspritzung auf 12 erhöht. Die Wandbenetzung konnte zusätzlich durch eine reduzierte Ansteuerdauer des Injektors reduziert werden.¹⁴ Durch den

¹⁴Bei hohem Nadelhub ist der Druckverlust in den Düsenlöchern entscheidend für den Gesamtdurchsatz [Ofn01]. Der Lochdurchmesser ist zwar mit 0,100 mm kleiner als 0,135 mm bei der 6-Loch-Düse, durch die doppelte Lochanzahl vergrößert sich die Austrittsfläche dennoch um ca. 10%.

leicht erhöhten Durchsatz ließ sich bei konstanter Einspritzmenge eine kürzere Ansteuerdauer des Injektors vorgeben. Bis hin zu großen Einspritzmengen kann nach diesen Maßnahmen eine sehr gute Sprayverdampfung in der Flugphase beobachtet werden. Bildreihe B zeigt, dass zusammen mit der bearbeiteten Düsenkuppe hier ein in Umfangsrichtung fast lückenlos verteilter Wasserspray generiert wird, der sich demjenigen einer Hohlkegeldüse annähert.



Abbildung 6.17: Experiment: Vergleich der konventionellen Düsen K6 mit erodierten Düsen (Diesel E6, Wasser E12)

Abbildung 6.17 zeigt die resultierenden Unterschiede im Druckverlauf sowie den daraus abgeleiteten Größen zwischen konventioneller und bearbeiteter Düsenkuppe. Die Markierungen am indizierten Druckverlauf im Fall der erodierten Düsen entsprechen den Bildern in Abbildung 6.16. Es ist ersichtlich, dass bei gleicher Luftzahl sowie gleichen eingespritzten Wassermengen die Zündung mit den modifizierten Düsen später stattfindet. Dies ist eine direkte Folge der besseren Wasserverdampfung im Flug sowie der geringeren Wasserfilmbildung. Ein höherer Anteil des Wassers entfaltet somit seine Kühlwirkung, womit die Temperatur intensiver gesenkt wird. Trotz des Einflusses der Modifikation auf die Zündung kann kein nennenswerter Unterschied in der Hauptwärmefreisetzung sowie der daraus resultierenden Druckanstiegsrate beobachtet werden. In beiden Verläufen zeigen sich beginnend mit der Hauptwärmefreisetzung geringe Druckschwankungen, deren Intensität sich kaum unterscheidet. Die Ursache für Druckschwankungen sowie deren Zusammenhang mit der maximalen Druckanstiegsrate werden in Abschnitt 6.3.3 noch detailliert untersucht werden.

Zusammenfassend ist festzuhalten, dass sich durch die veränderte Düsengeometrie ein deutlicher Vorteil in der Wassereinspritzung erzielen lässt. Durch die höheren Spraykegelwinkel, den erhöhten Lufteintrag und die verkürzte Einspritzdauer resultiert eine intensivere Verdampfung des Wassers. In Folge reduziert sich der Wasser-Wandfilm, wodurch die Ladung effektiver gekühlt wird. Bei gleicher Wassermenge führt dies zu einer späteren Zündung und zu einer verzögerten Hauptwärmefreisetzung. Es wurde kein nennenswerter Einfluss der Düsenkonfiguration auf die Druckanstiegsrate beobachtet.

6.3.2 Einfluss des Wassers auf die Rußkonzentration

Mit zunehmender Kraftstoffmenge wurde in den Versuchen eine steigende Lumineszenzintensität beobachtet, wie in den entsprechenden Abbildungen für konventionelle Düsenkuppen, Abbildung 6.18 sowie für erodierte Düsenkuppen, Abbildung 6.19, ersichtlich ist. Örtlich tritt diese Strahlung dabei besonders intensiv am äußeren Bereich der Kolbenmulde auf, zeitlich nach der eigentlichen Hauptwärmefreisetzung.

Eine derart intensive Strahlung übertrifft die in den Versuchen detektierte Chemilumineszenzintensität deutlich und kann deshalb der Rußstrahlung zugeordnet werden. Wie in den Grundlagen 2.4 geschildert wurde, wird Ruß primär in fetten Zonen $\lambda < 0,6$ bei mittleren Temperaturen im Bereich T = 1500 K...1900 K gebildet. Diese Bedingungen existieren zum einen in fetten Gebieten im Brennraum als auch im diffusiv abbrennenden Wandfilm. Wie



Abbildung 6.18: Experiment: Diffusiver Abbrand wandanhaftenden Kraftstoffs, 10°KW nOT, getrennte Einspritzung, konventionelle Düsen K6

später anhand numerischer Ergebnisse gezeigt werden wird, existieren fette Gebiete besonders am äußeren Muldenrand als auch am zentralen Glaseinsatz. Besonders aus den Ecken der Kolbenmulde kann – trotz der einspritzbedingten, tumbleartigen Gasbewegung – einmal angesammelter Kraftstoff nur erschwert heraustransportiert werden.



Abbildung 6.19: Experiment: Diffusiver Abbrand wandanhaftenden Kraftstoffs, 10°KW nOT, getrennte Einspritzung, erodierte Düsen (Diesel E6, Wasser E12)

Neben fetten Zonen in der Gasphase kommt es durch die Kraftstoffeinspritzung gerade bei hohen Lasten zu einer Benetzung der Kolbenmuldenwand, wie obige Sequenzen, der mittels Schattenmesstechnik gewonnenen Aufnahmen, gut zeigen. Da die Temperatur der Kolbenmulde mit 100°C deutlich unterhalb der Siedetemperatur langkettiger Kohlenwasserstoffe des Dieselkraftstoffes liegt, kann der anhaftende Kraftstoff bis zur Zündung nur teilweise wieder abdampfen. Erst während der Hauptwärmefreisetzung steigt die Temperatur im Brennraum massiv an, was in Folge zu einem intensiven Verdampfen des wandanhaftenden Kraftstoffs führt. Dabei ergeben sich wandnah fette Bereiche, deren Abbrand wesentlich für die beobachteten Strahlungsemissionen verantwortlich sein dürfte. Aus diesem Grund werden die Lichtemissionen erst zum Ende oder nach der Hauptwärmefreisetzung mit einem Intensitätsmaximum bei etwa 10°KW nach OT beobachtet.

Zwischen den Schattenaufnahmen von Experimenten mit konventionellen bzw. erodierten Düsenkuppen sind deutliche Unterschiede hinsichtlich einzelner hell leuchtender Punkte ersichtlich. Da sich diese in der Videosequenz frei im Brennraum bewegen, kann davon ausgegangen werden, dass es sich dabei um lokal fette Zonen oder Kraftstofftröpfchen handelt, die im Flug diffusiv abbrennen. Während diese bei der Einspritzung der beiden Fluide mit Düsen konventioneller Bauart verstärkt auftreten, siehe Abbildung 6.18, können diese hellen Zonen bei der Verwendung der erodierten Düsenkuppen nicht beobachtet werden, siehe Abbildung 6.19. Die Ursache hierfür liegt in dem deutlich höheren Spraykegelwinkel, der sich in Folge der Düsenbearbeitung einstellt und bereits im vorigen Abschnitt 6.3.1 beschrieben wurde. Durch diesen höheren Spraykegelwinkel wird der Lufteintrag in die Sprays intensiviert und somit direkt die Verdampfung erhöht. Bei nicht vollständiger Verdampfung im Flug treffen die Sprays aufgrund des größeren Spraykegelwinkels auf einen größeren Kolbenmuldenbereich auf. Die gesamte Menge des bis zur Zündung flüssigen Kraftstoffs ist in beiden Fällen vergleichbar, wie wir im nächsten Abschnitt anhand der etwa gleichen Menge des Summen-Brennverlaufs feststellen werden. Im kleineren Aufprallgebiet bei der konventionellen Düse muss in Folge ein dickerer Kraftstoff-Wandfilm vorliegen. Treffen später eingespritzte Tropfen auf diesen Film, können sie daraus Tropfen herausschlagen, die deutlich größer sind als die Tropfen im Spray vor der Wand-Interaktion. Diese großen Tropfen bewegen sich nun frei durch den Brennraum, brennen diffusiv ab und stellen die Ursache für die einzelnen, hell leuchtenden Punkte im Falle der konventionellen Düse dar.

In den Abbildungen 6.18 und 6.19 ist für beide Düsenarten ersichtlich, dass durch die zusätzliche Wassereinspritzung schon bei einem Wasser-Kraftstoffverhältnis von $\Omega = 0,5$ die Strahlungsintensität und damit auch die Rußkonzentration deutlich reduziert und bei $\Omega = 1,0$ fast vollständig vermieden werden kann. Die Reduktion der Strahlungsintensität ist dabei global im gesamten Brennraum als auch lokal an den Orten der Wandbenetzung durch die Krafstoffsprays zu beobachten. Dies kann auf mehrere Effekte zurückgeführt werden:

- Der zusätzliche Impuls des eingespritzten Wassers sowie die resultierende Gasströmung erhöhen die Homogenisierung des Gemisches direkt.
- Die globale Kühlwirkung des Wassers verzögert die Zündung. Damit wird die Homogenisierungsphase verlängert. In Zonen, die durch die Kühlwirkung des Wassers unter den kritischen Temperaturbereich der Rußbildung von 1500 K...1900 K abgekühlt werden, wird unabhängig von der lokalen Luftzahl die Rußbildung deutlich reduziert.
- Das aufprallende Wasserspray könnte bereits anhaftenden Kraftstoff von der Wand abtragen und wiederum in den Brennraum befördern. Gerade bei hohen eingespritzten Wassermassen könnte das Wasser die Kolbenmuldenwand wirkungsvoll von Kraftstoff befreien.
- Das Wasser senkt die Temperatur im Brennraum und reduziert somit die Strahlungsintensität auch bei gleicher Rußmenge. Damit kann die optische Beobachtung anhand der Schattenaufnahmen nur eine qualitative Tendenz zur Rußkonzentration liefern.

Zusammenfassend lässt sich schließen, dass die Ursache für einzelne hell leuchtende Punkte bei Düsen konventioneller Bauart in der Spray-Wand-Interaktion begründet ist. Aufgrund des zusätzlichen Impulses der Wassereinspritzung, der intensiven Kühlwirkung, der resultierenden Verzögerung der Zündung, der lokalen Absenkung der Temperatur unter die Rußbildungsschwelle sowie der teilweisen Abtragung des Kraftstoff-Wandfilmes stellt die Wassereinspritzung eine wirkungsvolle Maßnahme zur Reduzierung der Rußkonzentration wurde bereits ab $\Omega = 0,5$ beobachtet, bei $\Omega = 1,0$ konnte die Rußbildung fast vollständig vermieden werden.

6.3.3 Einfluss des Wassers auf den Brennverlauf

In diesem Abschnitt werden die indizierten Druckkurven sowie die daraus abgeleiteten Wärmefreisetzungsraten analysiert. Daraus lassen sich Aussagen zum Wirkungsgrad, den erwarteten Geräuschemissionen sowie Tendenzen zu Emissionswerten, die im nächsten Abschnitt näher untersucht werden, ableiten.

Abbildung 6.20 zeigt Druck- und Brennverläufe für drei verschiedene Lastpunkte. In den entsprechenden Experimenten wurde der Diesel-Kraftstoff durch eine erodierte 6-Loch-Düse E6, das Wasser durch eine erodierte 12-Loch-Düse E12 eingespritzt. Der Graph bei mittlerer Last und einem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis von $\Omega = 0,9$ entspricht der Schattenaufnahme in Abbildung 6.16 im vorigen Abschnitt 6.3.1.

Brennverlauf

Der Brennverlauf ist bei niedriger und mittlerer Last zweistufig, die Übergänge zwischen der Kalten Flamme und der Hauptwärmefreisetzung sind jedoch fließend. Dies zeichnet sich zum einen direkt im Druckverlauf ab, zum anderen im hieraus mittels Analyse abgeleiteten Brennverlauf. Mit zunehmender Wassermenge und/oder hoher Last ist eine Abtrennung der beiden Phasen immer undeutlicher erkennbar. Vergleichbares zeichnet sich auch in der Studie von Kaneko et al. [KAOM02] ab, in der zwar kinetische Berechnungen eine intensive erste Stufe zeigen, Messungen dagegen nur eine schwache. Da der Einfluss des Wassers auf die Zündkinetik vernachlässigt werden kann (Abschnitt 6.2), scheint die Ursache hierfür in zwei anderen Phänomenen begründet. Das Wasser wird durch eine Direkteinspritzung in den Brennraum eingebracht und verteilt sich dadurch bis zur Zündung nicht homogen. Durch den Einspritzimpuls wird zwar der zuvor eingebrachte Kraftstoff homogenisiert, die lokal fluktuierende Kühlwirkung bewirkt jedoch mit zunehmender Wassermenge eine Erhöhung der Temperaturgradienten. Diese Fluktuationen führen dazu, dass sich der kinetische Fortschritt innerhalb der chemischen Oxidationskette räumlich und zeitlich unterscheidet; der zweistufige Wärmefreisetzungsverlauf wird verwischt und zeichnet sich im integralen Druckverlauf kaum mehr ab.


Abbildung 6.20: Experiment: Druck- und Wärmefreisetzungsverlauf bei getrennter Einspritzung (Düsen Kraftstoff E6, Wasser E12); Zahlenwerte entsprechend maximaler Druckanstiegsraten [bar/°KW]

Maximale Druckanstiegsraten

Unabhängig von der Last zeichnet sich im Druckverlauf mit zunehmender Wasserzugabemenge eine Senkung der maximalen Druckanstiegsraten ab,¹⁵ was deutliche Vorteile im Komfort, Wirkungsgrad sowie den erzielten Emissionen bringt: Ein langsamerer Druckanstieg resultiert in deutlich geringeren Verbrennungsgeräuschen und erhöht damit den Komfort für den Motornutzer. Weiter wird der Schwerpunkt der Verbrennung nach spät verschoben. Bei den hier vorliegenden sehr frühen Zündungen vor dem Oberen Totpunkt reduziert der niedrigere Druck die Kompressionsarbeit. Die niedrigere Temperatur und kürzere Aufenthaltszeit reduzieren die Wandwärmeverluste. Durch beide Effekte steigt der Wirkungsgrad des Brennverfahrens deutlich an, wobei dieser ein Maximum bei einem Verbrennungsschwerpunkt kurz nach OT erreicht. Diese Abhängigkeit des Wirkungsgrades vom Zeitpunkt der Verbrennung wird in vielen Publikationen aufgezeigt. Beispielsweise stellte sich bei Christensen [Chr02] an einem im HCCI -Modus betriebenen Motor ein maximaler indizierter Wirkungsgrad für einen Maximaldruck bei 7...10°KW nOT ein. Ein weiterer Vorteil einer niedrigeren Druckanstiegsrate ergibt sich daraus, dass Maximaldruck und -temperatur später erzielt werden, woraus eine niedrigere Maximaltemperatur sowie kürzere Aufenthaltszeit bei hohen Temperaturen resultiert. Beide Maßnahmen lassen niedrigere Stickoxid-Emissionen erwarten.

Die Ursachen für die Reduktion der Druckanstiegsrate durch die Wassereinspritzung sind vielfältig. Folgende Faktoren haben mit zunehmender Wassermenge eine Reduktion der Druckanstiegsrate zur Folge [SS06]:

• Die hohe Verdampfungsenthalpie sowie die hohe Wärmekapazität des Wassers kühlt die Ladung und verzögert damit die Zündung. Zum späteren Zeitpunkt ist die Geschwindigkeit durch die Kolbenbewegung geringer, womit die kompressionsbedingte Druckanstiegsrate sinkt. Nach dem OT ist die Wärmefreisetzung durch die Verbrennung der Expansion des Gases entgegengesetzt und die Druckanstiegsraten sinken noch stärker.

¹⁵Ausnahme ist der Versuch bei mittlerer Last ohne Wasserzugabe

- Setzt man voraus, dass ein hoher Anteil des eingespritzten Wassers verdampft, so steigt mit höheren Wassermengen auch die Wasserdampfmenge im Brennraum an. Die zusätzliche Wärmekapazität des Dampfes reduziert den Temperaturanstieg durch die Verbrennung. Da die chemischen Umsatzraten an die Temperatur gekoppelt sind, laufen die nachfolgenden Reaktionen langsamer ab und die Druckanstiegsrate wird vermindert.
- Bei Direkteinspritzung lässt sich das Wasser im Brennraum nicht vollkommen homogen verteilen. Daraus resultieren lokal fluktuierende Verdampfungsraten und es kann davon ausgegangen werden, dass eine Erhöhung der Wassermenge die Temperaturunterschiede im Brennraum erhöht und in Folge die Ausbreitung sukzessiver Selbstzündungen verlangsamt. Insgesamt folgt auch damit eine inverse Kopplung der Wassermenge an die Druckanstiegsrate.

Neben diesen positiven Effekten der Wasserzugabe auf die Druckanstiegsrate existiert bei Zündung vor OT auch eine gegenläufige Tendenz:

• Wie in der kinetischen Betrachtung (Abschnitt 6.2) gezeigt wurde, findet die Zündung bei ähnlicher Zündtemperatur statt. Diese Temperatur wird nun durch die Kühlwirkung des Wassers später, und damit bei höherem Druck erzielt. Da die Zündung im Mittel bei höherem Druck abläuft, ist die Wärmefreisetzung schneller.

Druckschwingungen

Während und nach der Hauptwärmefreisetzung zeigen sich ohne und bei geringer Wasserzugabe Schwingungen im Druckverlauf, deren Ursachen in Abschnitt 6.1.4 für den Fall ohne Wassereinspritzung betrachtet wurden. Wie wird dieses System nun durch die Wassereinspritzung derart verändert, dass die Druckschwingungen wie im Versuch beobachtet deutlich reduziert werden?

Der Wasserdampf hat einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Schallgeschwindigkeit und verändert somit die Ausbreitungsgeschwindigkeit akustischer Störungen nicht.¹⁶ Es existieren jedoch mehrere andere potentielle Ursachen für die Glättung des Druckverlaufs:

- Zum einen könnten unverdampfte Tropfen, die sich frei im Brennraum bewegen, eine Dämpfung der Gasbewegung bewirken. Da zum Zündzeitpunkt die flüssige Tropfenmenge jedoch aufgrund der Verdampfung stark abgenommen hat, scheint das vergleichsweise dünne Tropfenfeld eher eine untergeordnete Rolle zu spielen. Zudem kann dieser dämpfende Einfluss die Ursache des Druckungleichgewichts nicht beheben.
- Durch den Impuls der Wassereinspritzung wird die Homogenität der Kraftstoffverteilung erhöht. Die Verdampfung kühlt das Brennraumgas ab und verzögert die Zündung. Durch die verlängerte Zeitspanne zwischen Einspritzung und Zündung erhöht sich die Kraftstoff-Homogenität zusätzlich.
- Die Verteilung des Wassers im Brennraum ist nicht homogen, somit dessen Kühlwirkung nicht einheitlich. In der Simulation der getrennten Einspritzung sind in axialer Richtung des Zylinders Temperaturgradienten bis zu Werten von 50 K/mm zu Beginn der Kalten Flamme zu beobachten, Abschnitt 6.3.6. In der Simulation der Emulsionseinspritzung betragen diese bis zu 25 K/mm, Abschnitt 6.4.5. Diese hohen Gradienten führen dazu, dass die gleichzeitig reagierenden Zonen klein sind; die ausgesandten Druckstörungen in Folge geringer.

Zusammenfassend zeigt sich durch den Einsatz des Wassers bei der getrennten Einspritzung der beiden Fluide ein positiver Effekt auf den Druck- und den Wärmefreisetzungsverlauf. Durch die Verschleppung der Zündung wird der Wirkungsgrad erhöht. Die Druckanstiegsraten werden effektiv gesenkt, womit sich der Komfort erhöht und sich der Verbrennungsschwerpunkt zusätzlich

¹⁶Bei Bedingungen im Brennraum von *T* ≈ 1000 K sowie geringen Partialdrücken des Wasserdampfes kann dieser als ideales Gas mit einem Isentropenkoeffizienten $\kappa \approx 1,25$ und der Gaskonstanten von *R* = 462 J/(kg K) angenähert werden. Bei $\lambda = 2,0$ und $\Omega = 1,0$ beträgt der Volumenanteil des Wassers ca. 5%. Wird vereinfachend das restliche Brennraumgas als Luft angenommen, reduziert sich der Isentropenkoeffizient von $\kappa_{Luft} = 1,40$ auf $\kappa_{Luft+H_2O} = 1,39$ und die Gaskonstante erhöht sich von $R_{Luft} = 287$ J/(kg K) auf $R_{Luft+H_2O} = 292$ J/(kg K). Da sich die beiden Veränderungen bei der Berechnung der Schallgeschwindigkeit gemäß Gleichung 6.4 etwa aufheben, kann der Effekt der Wasserzugabe auf die Schallgeschwindigkeit vernachlässigt werden.

nach spät verschiebt, was sich weiter positiv auf den Wirkungsgrad auswirkt. Das Wasser verhindert zudem die Ausbildung von Druckschwingungen.

6.3.4 Einfluss des Wassers auf die Schadstoffemissionen

Abschließend soll nun die getrennte Einspritzung von Kraftstoff und Wasser hinsichtlich der Emissionen beleuchtet werden. Dazu wurden am Einhubtriebwerk Messungen von Kohlenmonoxid CO sowie von Stickstoffmonoxid NO und Stickstoffdioxid NO₂ durchgeführt. Die Beschreibung der Messtechnik der gasförmigen Emissionen mittels elektrochemischer Sensoren findet sich in Abschnitt 4.3.3. Dort ist auch beschrieben, weshalb die Maximaltemperatur dieser Sensoren die Messung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen ausschließt. Rußkonzentrationen ließen sich dagegen aus den optischen Messungen mittels Schattenmesstechnik abschätzen, wie in Abschnitt 6.3.2 beschrieben wurde.

Neben der Darstellung über dem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis Ω sind die Daten über der räumlich gemittelten Maximaltemperatur T_{max} dargestellt. Diese wurde aus den experimentellen Daten mittels der Druckverlaufsanalyse, siehe Anhang A.3, berechnet.

Kohlenmonoxid (CO)

CO entsteht als Zwischenprodukt bei jeder Verbrennung von Kohlenwasserstoffen als Vorstufe zur vollständigen Aufoxidation zu CO_2 , siehe Abschnitt 2.4.2. Bei der Analyse muss berücksichtigt werden, dass bei der Direkteinspritzung des Kraftstoffs bis zur Zündung keine vollständige Homogenisierung erreicht wird, womit trotz globalen Luftüberschusses lokal fette Gebiete vorliegen können. Dies wird in Abschnitt 6.3.6 für einen Betriebspunkt bei hoher Last bestätigt werden. Zusätzlich kommen bei der frühen Einspritzung hohe Kraftstoffanteile in kalte Bereiche. Die Materialtemperatur liegt im Einhubtriebwerk unterhalb derjenigen von konventionellen Motoren im Stationärbetrieb. Dies lässt gemäß der in Abschnitt 2.4.2 geschilderten Temperaturabhängigkeit der CO-Oxidation im Einhubtriebwerk tendenziell höhere CO-Emissionen erwarten.



Abbildung 6.21: Experiment: Kohlenmonoxid-Emissionen bei getrennter Einspritzung; K: konventionelle Düsen (K6), E: erodierte Düsen (Kraftstoff E6, Wasser E12)

Abbildung 6.21 gibt die ermittelten CO-Emissionen für 3 verschiedene Luftzahlbereiche, die der Betrachtung im vorigen Abschnitt entsprechen, wieder. Mit Werten im Bereich von 860...5000 ppm ist das Niveau der CO-Emissionen sehr hoch und übersteigt die Werte von konventionellen Brennverfahren deutlich. Um die bei herkömmlichen Brennverfahren deutlich niedrigeren Werte am Einhubtriebwerk zu validieren, wurden vergleichende Versuche mit einem Ansteuerzeitpunkt des Injektors zum Oberen Totpunkt durchgeführt. Diese ergeben im mittleren Luftzahlbereich mit der konventionellen 6-Loch-Düse etwa 170 ppm CO. Dies entspricht etwa dem Niveau konventioneller Motoren, welches Urlaub [Url89] für einen direkteinspritzenden Dieselmotor von 180 ppm bis 600 ppm angibt. Die Ursache für die hohen Emissionswerte sind demnach durch das Brennverfahren und nicht durch das Einhubtriebwerk oder die eingesetzte Messtechnik begründet.

In der linken Grafik ist bei mittlerer ($\lambda \approx 3$) und niedriger Luftzahl ($\lambda \approx 5$) kein Einfluss der eingespritzten Wassermenge auf die CO-Emissionen zu erkennen. Bei hoher Luftzahl dagegen steigen die Emissionen deutlich an. Die Ursache scheint dabei zum einen in der verschleppten Zündung sowie in der Kühlwirkung des Wassers zu liegen. Beides senkt die Temperatur im Brennraum unter die für die CO-Oxidation erforderlichen Werte. Die rechte Graphik in Abbildung 6.21 zeigt die CO-Emissionen über der Maximaltemperatur, welche mittels Druckverlaufsanalyse am Oberen Totpunkt ermittelt wurde. Bei dieser Auftragung zeigt sich bei niedriger Last, dass die Temperaturabsenkung mittels Wasser vor allem dann einen deutlichen Einfluss auf die Kohlenmonoxidwerte hat, wenn 1100 K unterschritten werden. Da Radikale sich unterhalb dieser Temperatur kaum bilden bzw. wieder rekombinieren, stellt diese einen Schwellwert dar, der auch aus der Literatur bekannt ist (siehe Abschnitt 2.4.2).

Aus Abbildung 6.21 ist weiterhin ersichtlich, dass die Kohlenmonoxid-Emissionen mit sinkender Luftzahl tendenziell abnehmen. Da stets mit Luftüberschuss gefahren wurde, ist hierfür der mit zunehmender Last verbundene Anstieg der Maximaltemperatur verantwortlich. Bei höheren Temperaturen steigen die Radikalkonzentrationen an und die Aufoxidation wird begünstigt. Dies wird besonders bei der Auftragung der CO-Konzentration über der Maximaltemperatur deutlich.

Eine offene Frage im Zusammenhang mit der Wassereinspritzung ist, warum die CO-Emissionen mit zunehmender Wassermenge nicht ansteigen, obwohl das Wasser effektiv kühlt und die Temperatur für die weitere Oxidation von CO eine maßgebliche Rolle spielt. Hierbei muss zunächst berücksichtigt werden, dass die Volumenanteile [ppm] der Emissionen gemessen wurden. Der höhere Volumenstrom durch den im Abgasstrang nicht kondensierten Dampf des eingespritzten Wassers erhöht dabei das Abgasvolumen und senkt damit den Volumenbruch der jeweiligen Emissionen. Dieser Effekt ist jedoch mit maximal 5%¹⁷ gegenüber den sehr viel stärkeren Änderungen der CO- oder der Stickoxid-Emissionen, welche im nächsten Abschnitt diskutiert werden, auch bei hohen Wassereinspritzmengen vernachlässigbar. Interessant ist jedoch der Einfluss durch die Dissoziation des Wassers: Wie anhand Abbildung 6.21 erläutert wurde, steigt CO nur an, wenn die Wasserzugabe bei einer volumengemittelten Maximaltemperatur unter 1500 K erfolgt. Die thermodynamische Studie in Abschnitt 6.2 hat jedoch gezeigt, dass sich bei Temperaturen ab etwa 1500 K die OH-Radikalkonzentration durch die beginnende Dissoziation des Wassers erhöht. Damit scheint die Zunahme der OH-Radikalkonzentrationen

¹⁷Für die Verbrennung von 1 mol Heptan benötigt man bei einer Luftzahl von λ = 2 104,8 mol Luft (siehe 2.3.1). Bei einem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis von Ω=1,0 wird zusätzlich 5,6 mol Wasser eingespritzt. Dieses erhöht die Abgasmolmenge von 108,8 mol auf 114,4 mol somit um etwa 5%.

durch die Dissoziation des Wassers die Abnahme der Radikalkonzentrationen aufgrund verdampfungsbedingter Temperaturabsenkung kompensieren zu können.

Stickoxide (NO_x)

In den nachfolgenden Abbildungen 6.22 und 6.23 sind die gemessenen Stickoxid-Emissionen gezeigt. Zusätzlich eingezeichnet sind die Simulationsergebnisse, die zusammen mit den experimentellen Daten diskutiert werden sollen. Auf die numerische Simulation der getrennten Injektion von Brennstoff und Wasser wird in Abschnitt 6.3.6 eingegangen werden.



Abbildung 6.22: Experiment/Simulation: NO-Emissionen bei getrennter Einspritzung; K: konventionelle Düsen (K6), E: erodierte Düsen (Kraftstoff E6, Wasser E12); x: Simulation (Kraftstoff E6, Wasser E12)

Der Einfluss der Wassereinspritzung auf die Emissionen an NO sowie NO_x , welches als Summe der Konzentrationen von NO und NO_2 ermittelt wurde, ist deutlich ersichtlich. Die NO_2 -Emissionen sind hierbei in derselben Größenordnung wie die NO-Emissionen. Aufgrund langer Verweilzeiten des Abgases im Einhubtriebwerk sowie dem Abgasstrang von mehreren Minuten, der vergleichsweise niedrigen Temperatur des Abgasstranges von 60°C sowie des hohen Restsauerstoffgehaltes wird die Umwandlung von NO in NO_2 gefördert, da bei diesen Bedingungen das chemische Gleichgewicht deutlich



Abbildung 6.23: Experiment/Simulation: NO_x-Emissionen bei getrennter Einspritzung; K: konventionelle Düsen (K6), E: erodierte Düsen (Kraftstoff E6, Wasser E12); x: Simulation (Kraftstoff E6, Wasser E12)

auf der Seite von NO₂ liegt, siehe Abschnitt 2.4.1 bzw. Abbildung 2.11. Das NO₂/NO-Verhältnis unterscheidet sich durch diese Randbedingungen deutlich von realen Motoren; bei Dieselmotoren beträgt der Anteil von NO₂ üblicherweise 10%...30% der Gesamtstickoxid-Emissionen [Hey88].



Abbildung 6.24: Simulation: Temperaturverlauf und NO-Produktion bei getrennter Einspritzung (Düsen Kraftstoff E6, Wasser E12)

Neben Messungen am Einhubtriebwerk wurde die zeitliche Entwicklung der thermischen NO-Produktion durch Postprocessing der in den folgenden Abschnitten 6.3.5 und 6.3.6 beschriebenen Ergebnisse der numerischen Simulation ermittelt. Die Modellierung der Stickoxidbildung während des Postprocessing-Schrittes findet sich in Abschnitt 5.5. Dort ist zudem näher erläutert, weshalb bei der Berechnung aufgrund des chemischen Gleichgewichtes die Konzentration an NO₂ bzw. die Umwandlung von NO zu NO₂ vernachlässigt werden kann. Im Hinblick auf die wahren Effekte bei der Verbrennung lässt sich die Stickoxidproduktion während der Verbrennung mit dem gewählten numerischen Ansatz richtig wiedergeben, wobei die berechneten NO-Emissionen mit den gemessenen NO_x-Emissionen verglichen werden müssen (siehe Abbildung 6.22 und 6.23). Da bei der Berechnung keine freien Anpassungsparameter auftreten, eignet sich diese Vorgehensweise auch zur Vorausberechnung der thermischen Stickoxidbildung.

In Abbildung 6.24 ist die zeitliche Entwicklung von NO sowie ein Ausschnitt des Temperaturverlaufes dargestellt.¹⁸ Es zeigt sich, dass die relevanten Zeitskalen bei der thermischen NO-Produktion vergleichsweise langsam sind. NO wird primär nach der Hauptwärmefreisetzung erzeugt. Nachdem die mittlere Temperatur bei 15°KW nOT auf unter 1900 K abgesunken ist, fällt die chemische Umsatzrate soweit ab, dass integral keine Änderung der NO-Konzentration mehr beobachtet werden kann. Der zu Simulationsende ermittelte Wert von etwa 270 ppm NO wird damit "eingefroren". Dieses Niveau stimmt sehr gut mit den gemessenen Gesamt-Stickoxid-Emissionen bei der Messung im Einhubtriebwerk überein. Aus der vergleichsweise langsamen Kinetik der NO-Produktion und der fast ausschließlich nach der Hauptwärmefreisetzung generierten Stickoxide kann geschlossen werden, dass der Zeitpunkt der Hauptwärmefreisetzung entscheidenden Einfluss auf das Niveau der emittierten NO-Konzentration hat.

In Abschnitt 6.3.2 wurde gezeigt, dass durch die Wassereinspritzung der Kraftstoff-Wandfilm teilweise diffusiv abbrennt. Die lokal hohen Temperaturen in diesen Zonen liefern einen wesentlichen Beitrag zur Stickoxidemission, siehe [SS05a]. Durch das Wasser kann das wandnahe, diffusive Abbrennen und somit auch die Stickoxidbildung deutlich reduziert werden.

¹⁸Der Temperaturverlauf entspricht einem Ausschnitt von Abbildung 6.25.

Zusammenfassend kann geschlossen werden, dass folgende Effekte die wesentlichen Ursachen für die deutliche Senkung der NO_x -Emissionen durch die Wassereinspritzung sind:

- 1. Die Senkung der Spitzentemperatur.
- 2. Die kürzere Aufenthaltszeit bei hoher Temperatur aufgrund verschleppter Zündung.
- 3. Die Reduktion des diffusiven Abbrands wandanhaftenden Kraftstoffs.

6.3.5 Integrale Ergebnisse der Verdampfungs- und Verbrennungssimulation

Aufgrund der positiven Erfahrungen mit den erodierten Düsen E6 für die Kraftstoff- und E12 für die Wassereinspritzung soll diese Konfiguration in einer numerischen Simulation näher untersucht werden. Die Beschreibung der zugrundeliegenden Modelle findet sich im Kapitel 5. Wie in Abschnitt 5.2 dargelegt wurde, basiert die Simulation auf der Lagrangeschen Betrachtung der Tropfenbewegung. Als Eingabe für die Simulation diente neben geometrischen Daten (Lochdurchmesser D) und den Stoffwerten des Fluides lediglich der Einspritz-Massenstrom sowie für das gewählte Zerstäubungsmodell nach Reitz-Diwakar der Spraykegelwinkel ψ_G . Daneben wurden keine Parameter angepasst, um das Ergebnis an die Experimente anzugleichen. Die Eindringtiefe der Sprays sowie deren Sprayspitzenkontur ergibt sich direkt aus der Interaktion der Tröpfchen untereinander und mit der Gasphase.

Neben den unten diskutierten ortsaufgelösten Betrachtungen soll zunächst das integrale Verhalten des Sprays in der Verdampfungsphase analysiert werden, das durch Summation über alle Zellen ermittelt wurde. Hierzu ist in Abbildung 6.25 der Temperatur- und Druckverlauf und der Verlauf der eingespritzten sowie der verdampften Kraftstoff- und Wassermenge abgebildet.

Der Vergleich der eingespritzten mit der gasförmigen Kraftstoffmasse zeigt, dass schon während der Einspritzung der Kraftstoff zu einem sehr großen Anteil verdampft. Zu Beginn der Wassereinspritzung ist fast der gesamte Kraft-



Abbildung 6.25: Simulation: Temperatur- und Druckverlauf, eingespritzte und verdampfte Massen Kraftstoff und Wasser bei getrennter Einspritzung (Düsen: Kraftstoff E6, Wasser E12). Zeitpunkte S₁ bis S₈ entsprechend Abbildungen 6.28 bis 6.31.

stoff gasförmig. Anders dagegen der Verlauf bei der Wassereinspritzung: Zu Beginn kommt es auch hier zu einem effektiven Verdampfen und die Temperatur im Brennraum wird stark beeinflusst. Über einen Zeitraum von 50° bis 20°KW vOT wird primär durch die Verdampfungsenthalpie des Wassers die volumengemittelte Temperatur fast konstant gehalten. Im Wesentlichen aufgrund der erhöhten Dichte im Brennraum¹⁹ kann die starke Temperaturbeeinflussung im Druckverlauf kaum beobachtet werden. Dieses Phänomen ist auch in den experimentellen Ergebnissen zu sehen und erschwert die zur Ermittlung der Wärmeströme durchgeführte Druckverlaufsanalyse.



Abbildung 6.26: Simulation: Verteilung der verdampften Fluide über das Volumen bei getrennter Einspritzung (Düsen: Kraftstoff E6, Wasser E12)

Abbildung 6.26 zeigt die Verteilung der Dämpfe von Kraftstoff und Wasser über dem Volumen des Brennraumes. Zu Beginn der Wassereinspritzung (50°KW vOT) bestehen über 70% des Brennraumes aus sehr mageren Gebieten, während über 20% des Volumens nah- bzw. unterstöchiometrisch mit $Y_{C_7H_{16}} > 6\%$ sind (grau markierter Bereich). Der hohe Impuls der Wassereinspritzung verbessert ab 42°KW vOT die Homogenisierung und reduziert damit das Volumen der unterstöchiometrischen Gebiete. Nach 23°KW vOT machen

¹⁹Wird im Brennraum ein Gemisch der Luftzahl $\lambda = 2$ generiert, so muss pro kg Luft ca 0,034 kg Diesel zugegeben werden, siehe 2.3.1. Bei einem Wasser- zu Kraftstoff-Verhältnis von $\Omega = 1$ kommt nochmals dieselbe Menge Wasser hinzu. Bei vollständiger Verdampfung erhöht sich demnach die Masse und bei gleichem Volumen auch die Dichte um 6,8%.

sich die einsetzenden chemischen Reaktionen durch einen Anstieg der kraftstoffarmen Gebiete bemerkbar. Besonders stark reduziert sich das Volumen mit mittlerem Kraftstoffdampf-Massenbruch $Y_{C_7H_{16}} = 4\%...5\%$. Bei der folgenden ortsaufgelösten Analyse werden wir feststellen, dass in diesen Zonen sowohl nennenswerte Kraftstoffkonzentrationen als auch hohe Temperaturen vorliegen, woraus hohe kinetische Umsatzraten folgen.

Ein Teil des Wassers wird in der Simulation sehr breitflächig auf der Kolbenmuldenwand verteilt, von wo es nur langsam wieder abdampft. Dies scheint vor allem eine Folge des gewählten Zerstäubungsmodelles nach Reitz-Diwakar zu sein, siehe Abschnitt 5.2. Bei diesem Modell haben die Tropfen am Düsenaustritt den Durchmesser des Düsenlochs $d_0 = D$ und zerfallen erst in Folge aerodynamisch. Da dieser Zerfall mit der Relativgeschwindigkeit zwischen Tropfen und Gas korreliert, nimmt er zum Sprayende aufgrund des "Windschatteneffektes" ab. Die Tröpfchen zerteilen sich nur zögerlich, verdampfen durch die niedrige Relativgeschwindigkeit und abgesenkte Temperatur im Strahl zudem langsam und verbleiben lange im Brennraum. Damit liegen beim Wandaufprall gemäß der Aufteilung in Abschnitt 5.2 tendenziell mittlere Weberzahlen Weg vor, die nicht zu einem Abprallen, sondern zum Anhaften führen, siehe Abschnitt 5.2.

Bis zum Beginn der chemischen Reaktionen ist noch etwa ein Viertel des Wassers flüssig (Abbildung 6.25) und kühlt somit nicht effektiv. Die im Zeitbereich der Kalten Flamme ansteigende Wassermenge ist vor allem auf die chemische Bildung von Wasser zurückzuführen. Dies ist auch die Erklärung, weshalb die gasförmige Wassermenge die eingespritzte Wassermenge in etwa mit dem Beginn der Hauptwärmefreisetzung übersteigt. Die Hauptwärmefreisetzung wird durch die deutliche Temperaturabsenkung der Brennraumgase durch die Wassereinbringung bis etwa 7°KW vOT verzögert. Die sukzessiven Selbstzündungen im Brennraum ergeben eine Dauer der Hauptwärmefreisetzung von 7° bis etwa 2°KW vOT. Diese Dauer sowie die maximale Druckanstiegsrate von etwa 15 bar/°KW entspricht gut den experimentell beobachteten Werten.

Überlappung der Dampfphasen von Kraftstoff und Wasser

Die Ziele der Wassereinspritzung bestehen im Wesentlichen aus der Verschleppung der Zündung sowie der Reduktion von Druckanstiegsraten, Stickoxid und Ruß. Sämtliche Ziele können nur erreicht werden, wenn das Wasser seine Kühlwirkung rechtzeitig entfaltet, wie im vorigen Abschnitt diskutiert. Zudem ist jedoch die räumliche Verteilung des Wasserdampfes relativ zum Kraftstoffdampf von essentieller Bedeutung für die Effizienz der Wassereinspritzung. Das Wasser sollte dort verdampfen, seine Kühlwirkung entfalten und durch seine hohe Dampf-Wärmekapazität die Gesamtwärmekapazität erhöhen, wo bedeutende Kraftstoffkonzentrationen vorliegen. Dadurch steigt die Effizienz der Wasserverteilung, wenn das Verhältnis aus lokalem Massenbruch an Wasserdampf Y_{H_2O} zu Kraftstoffdampf Y_{Kr} möglichst einheitlich im Brennraum vorliegt:

$$\frac{Y_{H_2O}}{Y_{Kr}} \to const. \tag{6.7}$$

Das globale Verhältnis der beiden eingespritzten Massen von Wasser und Kraftstoff ist das Wasser-Kraftstoff-Verhältnis Ω . Zur Erreichung einer möglichst guten Überlappung der beiden Dämpfe muss das lokale Verhältnis der Dampfmassenbrüche dem globalen Verhältnis Ω entsprechen:

$$\frac{Y_{H_2O}}{Y_{Kr}} \to \Omega \tag{6.8}$$

Definiert man einen lokalen Überdeckungsparameter ÜPlok

$$\ddot{U}P_{lok} = \frac{Y_{H_2O}}{Y_{Kr} + Y_{H_2O}},$$
(6.9)

dessen Zahlenwerte zwischen den Grenzen 0 bzw. 1 für verschwindende Wasser- bzw. Kraftstoffdampf-Massenbrüche liegen

$$\begin{array}{ll} Y_{H_2O} \rightarrow 0 & \qquad \ddot{\mathrm{U}}\mathrm{P}_{\mathrm{lok}} \rightarrow 0 \\ Y_{Kr} \rightarrow 0 & \qquad \ddot{\mathrm{U}}\mathrm{P}_{\mathrm{lok}} \rightarrow 1, \end{array}$$

ergibt sich eine ideale Überlappung bei $\Omega = 1,0$ zu ÜP_{ideal} = 0,50:

$$\ddot{U}P_{ideal} = \frac{\Omega}{1+\Omega}.$$

Aus diesem lokalen Überlappungsparameter der beiden Dampfphasen lässt sich durch arithmetische Mittelung über alle Zellen *i* ein integraler Überlappungsparameter $ÜP_I$ für das gesamte Brennraumvolumen *V* ermitteln, welcher vom Volumen unabhängig ist und damit einen direkten Vergleich zwischen der Simulation des modellierten 180°-Sektors bei der getrennten Einspritzung mit dem 30°-Sektor bei der Emulsionseinspritzung erlaubt:

$$\ddot{\mathbf{U}}\mathbf{P}_{\mathrm{I}} = \frac{\sum_{i} \ddot{\mathbf{U}}\mathbf{P}_{\mathrm{lok}} \cdot \mathbf{V}_{i}}{\sum_{i} \mathbf{V}_{i}}.$$
(6.10)

Zur Gewährung der numerischen Stabilität werden hierbei nur Zellen berücksichtigt, in denen zumindest einer der beiden Dämpfe vorhanden ist.



Abbildung 6.27: Simulation: Integrale Überlappung von Kraftstoff- und Wasserverteilung sowie lokale Überlappung zum Zeitpunkt 27°KW vOT

Die integrale Überlappung der beiden Dämpfe ist in Abbildung 6.27 für die getrennte Einspritzung ersichtlich. Wie oben definiert, ergibt sich der Überlappungsparameter ohne Wasserdampf zum Wert 0. Mit Beginn der Wassereinspritzung bei etwa 48°KW vOT steigt die integrale Überlappung der beiden Dämpfe an und verbessert sich aufgrund voranschreitender Verdampfung des Wassers zunehmend. Dennoch ist die Höhe der integralen Überlappung ÜP_I = 0,34 bei Beginn des chemischen Kraftstoffumsatzes (27°KW vOT)

vom Idealwert $ÜP_{ideal} = 0,50$ deutlich entfernt. Es kann zwar davon ausgegangen werden, dass durch die Verdampfung noch flüssigen Wassers auch anschließend die Gleichverteilung der beiden Dämpfe weiter zunimmt. Die weitere Zunahme des Überlappungsparameters ist jedoch durch den chemischen Umsatz von Kraftstoff beeinflusst; die Aussagekraft des Parameters nimmt dadurch stark ab. In der Graphik ist dies durch einen gestrichelten Verlauf gekennzeichnet.

In der rechten Graphik von Abbildung 6.27 ist die Verteilung des lokalen Überlappungsparameters über dem Volumen für den letzten aussagekräftigen Zeitpunkt 27°KW vOT gezeigt. Es ist ersichtlich, dass die Verteilung von UP_{lok} über dem Volumen stark variiert und im Brennraum Werte von $UP_{lok} = 0$ (nur Wasser) bis hin zu $UP_{lok} \approx 0,7$ (mehr Wasser als Kraftstoff) vorliegen.

6.3.6 Ortsaufgelöste Analyse der Verdampfungs- und Verbrennungssimulation

Die Abbildungen 6.28 bis 6.31 zeigen das ortsaufgelöste Ergebnis der Simulation. Von oben nach unten sind für 8 charakteristische Zeitpunkte folgende Ansichten bzw. Schnitte dargestellt:

- 1. Die Verteilung der Kraftstoff- und Wassertropfen.
- 2. Die Verteilung von Wasser- bzw. Kraftstoffdampf-Massenbruch Y_{H_2O} bzw. $Y_{C_7H_{16}}$.
- 3. Die Verteilung der Temperatur.

In der linken Ansicht ist jeweils ein Schnitt gezeigt, welcher parallel zum Zylinderkopf in der Mitte zwischen Zylinderkopf und Kolbenmuldenboden angeordnet ist. Rechts ist jeweils die Draufsicht auf die in der Simulation verwendete Symmetriefläche dargestellt; im Bereich des kleinen Glaseinsatzes sind dabei die Felder an der inneren Muldenwand ersichtlich. Dieser Abschnitt folgt dem zeitlichen Ablauf der Phasen von der Kraftstoffeinspritzung (Zeitpunkte S₁ und S₂), der Wassereinspritzung (Zeitpunkte S₃ und S₄), dem Regime der Kalten Flamme (Zeitpunkt S_5), der Zündung der Hauptwärmefreisetzung (Zeitpunkte S_6 und S_7), bis hin zum fast vollständigen Ausbrand am Oberen Totpunkt (Zeitpunkt S_8).

Kraftstoffeinspritzung

Der Zeitpunkt S₁ spiegelt die Situation zur Mitte der Kraftstoffeinspritzung wider. Die Temperatur im Brennraum beträgt vor der Einspritzung etwa 700 K wodurch der Kraftstoff intensiv verdampft. Hierbei steigt der Massenbruch an Kraftstoffdampf in den Zellbereichen der Strahlen bis auf Y_{C7H16}=0,25 an.²⁰ Durch die Verdampfungskühlung wird lokal im Strahl die Temperatur bis auf unter 500 K abgesenkt.

Nach dem Sprayaufbruch stellt sich in der Simulation eine pfeilförmige Kontur der Sprayspitze ein. Dies wurde anhand von Schattenaufnahmen auch experimentell beobachtet, siehe Abbildung 6.16 in Abschnitt 6.3.1. Die Ursache hierfür scheint in den großen Spraykegelwinkeln zu liegen, die zu einem sehr intensiven Impulsaustausch der äußeren Spraybereiche mit dem umgebenden Gas führen.

Durch die geneigte Montage der Injektoren, siehe Abbildung 4.2, ergeben sich tendenziell radial bzw. axial ausgerichtete Sprays. In der Simulation ist das Eindringverhalten von dieser Ausrichtung unabhängig. Die relative Ausrichtung der Sprays zum Rechengitter, siehe Abschnitt 5.2, scheint demnach einen geringen Einfluss zu haben. Die Eindringtiefe stimmt mit den experimentellen Werten gut überein.

Wassereinspritzung

Schon während der Kraftstoffeinspritzung (Zeitpunkte S1 und S2) äußert sich das intensive Verdampfen der Tröpfchen in einem deutlichen Anstieg des Kraftstoffdampf-Massenbruches $Y_{C_7H_{16}}$. Zu Beginn der Wassereinspritzung (Zeitpunkt S3) ist die Kraftstoffverteilung noch sehr inhomogen. Die Wassereinspritzung führt nun zu einer sehr kräftigen Temperaturabsenkung (S₃). Lokal sinkt im Spray die Temperatur der Gasphase bis auf unter 400 K. Nachfol-

²⁰Die Zellen der Simulation sind mit Größen im Bereich mehrerer Millimeter deutlich größer als Einzeltropfen und stellen somit einen volumetrischen Mittelwert der Dampfkonzentrationen über das Zellvolumen dar.



Abbildung 6.28: Simulation: Getrennte Einspritzung und Verbrennung I: Kraftstoffeinspritzung

S₃, 42KW vOT S₄, 35[°]KW vOT Kraftstoff Wasser s₄ S₃' 100₁ 0,12 Druck [bar] Ξ Y_{H_2O} 0[30 0,00 Masse [mg] 0,12 匸 C₇H₁₆¹ Kurbelwinkel \succ [%W nOT] 0,00 Krst. Gasphase 1000 Krst. injiziert H₂O Gasphase Temperatur [K] H₂O injiziert 400

Abbildung 6.29: Simulation: Getrennte Einspritzung und Verbrennung II: Wassereinspritzung



Abbildung 6.30: Simulation: Getrennte Einspritzung und Verbrennung III: Kalte Flamme / Hauptwärmefreisetzung



Abbildung 6.31: Simulation: Getrennte Einspritzung und Verbrennung IV: Hauptwärmefreisetzung / Oberer Totpunkt

dende Tröpfchen verdampfen in diesen kalten Bereichen nur noch zögerlich. Durch das langsame Schließen der Düsennadel ergibt sich für die spät eingespritzten Tröpfchen eine niedrige Eindringgeschwindigkeit. Durch den Windschatteneffekt weiter verstärkt, fliegen diese Tröpfchen weit in den Brennraum und es kommt in der Simulation zu einer intensiven Benetzung vor allem des Glasbodens nach abgeschlossener Wassereinspritzung ab dem Zeitpunkt S4.

Kalte Flamme, Zündung und Verbrennung

Der Zeitpunkt S5 repräsentiert das Einsetzen der Kalten Flamme. Die Kraftstoffkonzentration ist nun deutlich homogener. Dies ist zum einen in turbulenten Mischvorgängen begründet, zum anderen wird die Homogenisierung durch den Impuls des eingespritzten Wassers deutlich intensiviert. Die Kraftstoffkonzentration hat aufgrund des chemischen Umsatzes noch nicht merklich abgenommen. Die Konzentration dampfförmigen Wassers ist im äußeren Bereich der Mulde hoch, durch die Verdampfungskühlung ist hier die Temperatur am niedrigsten.

Kurz vor der Zündung liegen die Temperaturgradienten in Ebenen parallel zur Zylinderkopfoberfläche im Bereich von 3...12 K/mm. Im Abschnitt 2.5.2 wurde dargelegt, dass Temperaturgradienten im Bereich dieser Werte Detonationen auslösen können. Zel´dovich [Zel80] erzielte durch Einstellung eines Temperaturgradienten von 11 K/mm eine Kopplung von Druckwelle und Wärmefreisetzung. In axialer Richtung liegen in der Kolbenmulde deutlich höhere Gradienten im Bereich 20...50 K/mm vor. In dieser Richtung sind somit eher niedrige Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Verbrennung zu erwarten.

Ab dem Zeitpunkt S6 beginnt die Hauptwärmefreisetzung, siehe Abbildung 6.30 und 6.31. Vergleichende, nicht dargestellte Schnitte zeigen, dass die Skalare in der dargestellten Ebene sowohl die Zündung als auch die Flammenausbreitung in Ebenen parallel zum Zylinderkopf gut wiedergeben. Als erstes werden die Zündbedingungen auf der Seite des Kraftstoffinjektors im äußeren Bereich der Mulde erreicht. Zum Zeitpunkt S6 stellt sich im Brennraum ein Druckunterschied von etwa 1,0 bar zwischen der Zündstelle und der gegenüberliegenden Muldenseite ein (nicht dargestellt). Die Verbrennung

breitet sich ausgehend von der Zündstelle mittels sukzessiver Selbstzündungen primär transversal durch den Brennraum aus, wie durch die Änderungen der Skalare von Zeitpunkt S₆ zu S₇ deutlich wird. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der sukzessiven Selbstzündungen in dieser Richtung liegt im Bereich $u_{sp} = 80...240$ m/s. Dies ist deutlich geringer als die Ausbreitungsgeschwindigkeit der von der frühen Zündung ausgesandten Druckstörung, die mit über 600 m/s voranschreitet. Etwa zum Zeitpunkt S7 hat diese Druckwelle den unteren Muldenrand erreicht, und es kommt auch hier zur Zündung. Ob diese Zündung eine Folge der von der primären Zündstelle ausgesandten Druckwelle darstellt, kann aus der Simulation nicht geschlossen werden. Die Reflexion und Fokussierung der Druckwelle aufgrund der runden Geometrie des Brennraumes kann einen immensen Einfluss auf die Verbrennung haben und bei der mehrstufigen Entflammung sogar ursächlich für die Ausbildung einer Detonation verantwortlich sein [Pös06]. Ob sich auch hier eine Detonation ausbildet, kann durch das eingesetzte Softwarepaket nicht geklärt werden. Dennoch ist festzuhalten, dass die Zündung am unteren Muldenrand etwa zu einem Zeitpunkt stattfindet, bei dem die von der primären Zündstelle ausgehende Druckwelle auftrifft.

Diese beiden Zündungen führen in weiterer Folge zu einem schnellen Abbrand der Ladung, womit schon vor der OT-Lage des Kolbens – Zeitpunkt S8 – die Verbrennung abgelaufen ist. In Abbildung 6.25 zeigt sich deshalb eine maximale Druckanstiegsrate von ca. 15 bar/°KW. Die hohe Geschwindigkeit der sukzessiven Selbstzündungen übertrifft die experimentellen Beobachtungen in Abschnitt 6.3.1. Das Auftreten von mehreren Zündstellen im Brennraum, die durch Bereiche geringeren Reaktionsfortschrittes voneinander getrennt sind, ist jedoch in Übereinstimmung mit den experimentellen Beobachtungen.

Nach der Verbrennung zeigt sich in der Bildsequenz von Abbildung 6.31 ein vollständiger Kraftstoffumsatz, wobei verbrennungsbedingt die Wasserkonzentration stark ansteigt. Die Temperatur ist zwischen Glaseinsatz und äußerem Bereich der Kolbenmulde am höchsten. Die Darstellung der Tropfen zeigt auch nach der Verbrennung noch flüssiges Wasser, das somit die gewünschte Kühl- und Verdünnungswirkung nicht im vollen Ausmaß erfüllt. Zusammenfassend lassen sich folgende Schlüsse aus der Simulation ziehen:

- Die auf der Lagrangeschen Betrachtungsweise basierende Simulation gibt die experimentell beobachteten Eindringtiefen gut wieder.
- Der Kraftstoff ist bei der Zündung mit der Luft gut gemischt.
- Die Dämpfe von Kraftstoff und Wasser überlappen sich zu Beginn des chemischen Kraftstoffumsatzes nur mäßig.
- Anteile des eingespritzten Wassers lagern sich besonders am Glasboden ab. Sie verdampfen nicht vollständig bis zur Zündung und entfalten damit nicht ihr volles Kühlpotential.
- Die Temperaturgradienten in Ebenen parallel zur Zylinderkopfoberfläche sind geringer als in axialer Richtung.
- Die Verbrennung breitet sich zunächst von einer Zündstelle mit hohen Geschwindigkeiten aus. Bevor diese Entflammung den gesamten Brennraum erreicht, kommt es zur Zündung eines weiteren Gebietes, das durch Bereiche geringeren Reaktionsfortschrittes von dem ersten getrennt ist.

6.4 Kraftstoff-Wasser Emulsionen



6.4.1 Gemischbildung und Verbrennungsablauf

Abbildung 6.32: *Experiment: Sequenz einer Emulsionseinspritzung (A1-A5)* und Verbrennung (B1-B5)

Abbildung 6.32 zeigt eine charakteristische Sequenz der Emulsionseinspritzung und -verbrennung. Der zugehörige Kolbenhub ist Abbildung 6.33 zu entnehmen, in welcher die Zeitpunkte, an denen die jeweiligen Bilder aufgenommen wurden, markiert sind.

Aufgrund der hohen Verdampfungsenthalpie des Wassers ist für die Emulsion eine niedrige Verdampfungsrate zu erwarten. Um den Strahlimpuls zu reduzieren, die Spraykegelwinkel zu erhöhen und damit die Lufteinmischung in den Strahl zu forcieren, wird bei der Emulsionseinspritzung die modifizierte 12-Loch-Düse gemäß der Beschreibung in Abschnitt 4.2 verwendet. Diese Düse kam auch schon für die getrennte Wassereinspritzung im Abschnitt 6.3 zum Einsatz.

Bildreihe A zeigt, dass die Emulsion im Flug nicht vollständig verdampft. Ab Bild A3 treffen die Sprays auf die Kolbenmuldenwand auf. Aus dem in Bild 6.33 oben links skizzierten Verlauf der Kolbenposition ist ersichtlich, dass für den gewählten Einspritzzeitpunkt der Spray primär auf die äußere Muldenwand auftrifft. Durch den flachen Winkel ist davon auszugehen, dass ein Großteil des Sprays zunächst in axialer Richtung zum Muldenboden umgeleitet wird und dann am Boden entlang wieder zur Zylinderachse zurückströmt. Der dortige Glaseinsatz bewirkt wieder eine Rückführung zum Zylinderkopf, womit insgesamt eine tumbleartige Drallströmung in der Kolbenmulde induziert wird. Nur geringe Sprayanteile können in den Bereich zwischen Kolbenkrone und Zylinderkopf eintreten, womit eine Benetzung der Laufbuchse ausgeschlossen ist. In den Experimenten konnte nach Öffnen des Einhubtriebwerkes eine derartige Benetzung der Laufbuchse durch Kraftstoff oder Wasser ebenfalls nicht festgestellt werden.



Abbildung 6.33: *Experiment: Druck- und Wärmefreisetzungsverlauf für die Sequenz aus Abbildung 6.32*

Neben diesem radial-axialen Bewegungsmuster des Sprays wird durch den Spray-Wand-Kontakt zudem die azimuthale Verteilung forciert. Mit der erodierten 12-Loch-Düse wird bei der frühen Einspritzung ein Gesamtspraykegelwinkel von etwa 20° pro Düsenloch erzeugt. Der Spraykegelwinkel ist hierbei geringer als bei der Wassereinspritzung mit derselben Düse, wie im Abschnitt 6.3 beobachtet wurde. Der Unterschied könnte teilweise in der niedrigeren Gasdichte begründet sein. Da der Einspritzzeitpunkt der Emulsion etwa demjenigen der Kraftstoffeinspritzung bei der getrennten Einspritzung entspricht, fand bei letzterer die Wasserzufuhr später und somit kompressionsbedingt bei einer höheren Dichte statt.

Da der Spraykegelwinkel kleiner als der jeweilige Sektorwinkel von 30° ist, wird die Emulsion azimuthal nicht homogen in den Brennraum eingespritzt. Mit dem Auftreffen des Sprays auf die äußere Muldenwand sowie den Muldenboden ist jedoch auch eine azimuthale Bewegung in die jeweiligen Strahlzwischenräume in den Schattenaufnahmen zu beobachten. Teile von je zwei benachbarten Strahlen bewegen sich dadurch zueinander und prallen in der azimuthalen Mitte zwischen zwei Sprayachsen aufeinander. Dies verstärkt neben der oben beschriebenen axial-radialen Bewegung den Rücktransport von Sprayanteilen von der Kolbenmuldenwand in den Zentralbereich der Mulde. Zum Zeitpunkt A5 zeigt Abbildung 6.32 ein einheitlich dunkles Bild im gesamten optisch zugänglichen Bereich, welches auf eine hohe Gleichverteilung – zumindest in radialer und azimuthaler Richtung – schließen lässt.

Spielt man die Aufnahmen der Hochgeschwindigkeitskamera schnell ab, lässt sich gut erkennen, dass die Bilder aufgrund der Tropfenverdampfung zunehmend heller werden. Im Vergleich zur Kraftstoffeinbringung bei der getrennten Einspritzung, siehe Abschnitt 6.3.1, geht das Verdampfen der Emulsion deutlich langsamer von statten. Zum einen kann dies darauf zurückgeführt werden, dass bei der Einspritzung der Emulsion größere Tröpfchen als bei der Kraftstoffeinspritzung gebildet werden, siehe Abschnitt 2.2.2. Zum anderen ist dies im Ballast des Wassers begründet, dessen hohe latente Wärme das Fluid nur zögerlich verdampfen lässt.

Für den dargestellten Betriebspunkt bei niedriger Last und damit mäßiger Einspritzmenge wird vor der Wärmefreisetzung (Zeitpunkt B1) etwa das Helligkeitsniveau vor der Kraftstoffeinspritzung erzielt. Bei höheren Fluidmengen ist zu diesem Zeitpunkt das Bild noch deutlich dunkler, was auf hohe Mengen noch unverdampften Fluides schließen lässt. Aufgrund geringer Fluktuationen des optischen Musters lässt sich auf einen direkten Übergang von der Verdampfungs- in die Wärmefreisetzungsphase schließen. Der in Abschnitt 6.1.2 geschilderte Rückgang der Dichtegradienten nach der Kalten Flamme, welcher zu einer Glättung der Bilder bei den Versuchen ohne Wassereinspritzung im Übergangsbereich führt, konnte bei den Versuchen mit Emulsion nicht oder nur sehr abgeschwächt beobachtet werden. Auch der zugehörige Druck- und Wärmefreisetzungsverlauf (Abbildung 6.33) zeigt kein deutlich 2-stufiges Verhalten.

Während der Hauptwärmefreisetzung, Bild B2, können ein deutliches Muster von lokalen Dichtegradienten sowie einzelne helle Bildpunkte durch lokal fette Zonen oder abbrennende Tropfen beobachtet werden. Die Verbrennung unterscheidet sich somit bei geringer Last kaum von den Versuchen ohne bzw. mit einer getrennten Wasser-Einspritzung. Für niedrige Lasten können keine wandnahen, hell leuchtenden Diffusionsflammen beobachtet werden, die mit zunehmender Kraftstoffmenge eine Quelle für Ruß darstellen.

6.4.2 Einfluss des Wassergehaltes auf die Rußkonzentration

Wie wir in Abschnitt 6.3.2 für den Fall der getrennten Einspritzung von Kraftstoff und Wasser gesehen haben, stellt die Wasserzufuhr eine aus mehreren Gründen sehr effektive Maßnahme zur Reduktion der Rußkonzentration im Brennraum dar. Können diese positiven Erfahrungen auch bei der Nutzung der Emulsion bestätigt werden?

Wenn die globale Luftzahl einen Wert von $\lambda = 3,0$ erreicht oder darunter fällt, kann ohne oder mit wenig Wasserzugabe im äußeren Bereich der Kolbenmulde eine intensive Lumineszenz beobachtet werden, wie in Abbildung 6.34 deutlich zu sehen ist. Diese Strahlung kann auf die schlecht vorgemischte, fette Verbrennung wandnahen bzw. -anhaftenden Kraftstoffs zurückgeführt werden. Emulsionen ab einem Wassergehalt von $\omega = 0,415$, entsprechend $\Omega =$ 0,71, reduzieren die Lumineszenz und damit die Rußbildung auch bei höhe-



Abbildung 6.34: Experiment: Einfluss des Wassers auf die Rußbildung bei Emulsionsbetrieb, 10°KW nOT (Düse E12)

ren Lasten deutlich. Die Ursachen hierfür sind vielfältig und wurden in Abschnitt 6.3.2 für die getrennte Einspritzung ausführlich diskutiert. Während dort der Impuls der zusätzlichen Wassersprays zur Erhöhung der Homogenität gesorgt hat, ist nun der Impuls der Emulsion höher als derjenige einer reinen Kraftstoffeinspritzung, weil mit zunehmendem Wassergehalt die Einspritzdauer angehoben werden muss, um eine konstante Kraftstoffmasse zu injizieren.²¹

²¹Hierfür sei – wie in den entsprechenden Experimenten – eine unveränderte Düse bzw. konstanter Raildruck angenommen.

Wie wir im vorigen Abschnitt anhand einer charakteristischen Filmsequenz gesehen haben, unterscheidet sich die Verdampfung der Emulsion deutlich von der Verdampfung des Kraftstoffs bei der getrennten Einspritzung. Durch größere Tropfen sowie den Ballast des Wassers ist bei der Emulsion die Verdampfung des Kraftstoffs langsamer und bei höheren Lasten bis zur Zündung nicht vollständig, wie sich auch in der numerischen Simulation, Abschnitt 6.4.5, zeigen wird. Dies lässt auf einen dickeren Wandfilm, stärkere Rußbildung und in Folge eine intensivere Lumineszenz schließen. In Abschnitt 6.3.2 wurde aufgezeigt, dass die Spray-Wand-Interaktion für die Ausbildung großer Tropfen verantwortlich ist, die beginnend mit der Hauptwärmefreisetzung diffusiv abbrennen. Auch bei der Emulsion können diese Tropfen als helle Leuchtpunkte beobachtet werden.

Neben der Rußbildung aufgrund diffusiven Abbrandes von flüssigen Kraftstoff- bzw. Emulsionsmengen bildet sich Ruß in fetten Bereichen der Gasphase. Die bessere Übereinstimmung der beiden Dämpfe in der Gasphase (siehe Abschnitt 6.4.5) fördert beim Einsatz der Emulsion, dass in Bereichen hoher Kraftstoffkonzentration Wasser zur Kühlung und damit Unterdrückung der Rußbildung vorhanden ist. Dennoch ist mit Verwendung der Emulsion in den Versuchen eine insgesamt höhere Lumineszenz und damit Rußbildung zu sehen, wie durch den Vergleich der Abbildungen 6.18 und 6.19 für die getrennte Einspritzung sowie 6.34 für die Emulsion deutlich wird. Der Nachteil der höheren unverdampften Kraftstoffmasse scheint sich bei der Verwendung der Emulsion durch die bessere Übereinstimmung von Kraftstoff und Wasser damit nur teilweise wieder auszugleichen.

Zusammenfassend kann gefolgert werden, dass durch den Ballast des Wassers die Emulsionstropfen langsamer verdampfen. Die Benetzung der Wand ist dadurch gerade bei hohen Einspritzmengen intensiver als bei der getrennten Einspritzung. Trotz Vorteilen durch eine bessere Überlappung von Kraftstoff und Wasser sind bei Verwendung der Emulsion höhere Lumineszenzintensitäten zu beobachten. Da jeweils ähnliche Wassermengen verglichen wurden, kann daraus auf höhere Rußkonzentrationen geschlossen werden.



6.4.3 Einfluss des Wassergehaltes auf den Brennverlauf

Abbildung 6.35: Experiment: Druck- und Wärmefreisetzungsverlauf bei Emulsionsbetrieb (Düse E12); Zahlenwerte entsprechend maximaler Druckanstiegsraten [bar/°KW]

Abbildung 6.35 zeigt den Druck- und Brennverlauf für eine globale Luftzahl im Bereich $\lambda = 2, 0...4, 5$. Die Versuche mit einem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis von $\Omega = 0$ wurden mit dem für die Emulsionsherstellung verwendeten Basiskraftstoff durchgeführt und können somit direkt mit den Emulsionen verglichen werden.

Bei dem Basiskraftstoff alleine zeigt sich besonders bei niedriger Last ein zweistufiger Brennverlauf. Mit Zugabe von Wasser wird die integrale Wärmefreisetzungsrate zeitlich verlängert und der Bereich der Kalten Flamme kann im Druckverlauf nur noch erahnt werden. Dies äußert sich besonders deutlich im Wärmefreisetzungsverlauf²² bei niedriger Last. Während das Einsetzen der Kalten Flamme unabhängig vom Wassergehalt etwa bei 25°KW bis 30°KW vOT beobachtet werden kann, sind deren Intensität ohne Wasser hoch und die Zeitspanne bis zur Hauptwärmefreisetzung kurz. Durch die Zugabe von Wasser werden die Temperatur global gesenkt und die lokalen Temperaturgradienten erhöht, wie in Abschnitt 6.4.5 anhand numerischer Ergebnisse gezeigt werden wird. Während die niedrigere Temperatur die chemischen Umsatzraten senkt, führt die Erhöhung der Temperaturgradienten zu der beobachteten Verlängerung der Dauer der Kalten Flamme.

Sobald die Hauptwärmefreisetzung beginnt, wird die maximale Druckanstiegsrate vom Wassergehalt der Emulsion bei einer Zündung vor OT nur geringfügig beeinflusst. In Abschnitt 6.3.3 wurden die 4 Einflussparameter auf die maximale Druckanstiegsrate erläutert. Tabelle 6.1 zeigt deren Veränderung durch das in der Emulsion enthaltene Wasser sowie die jeweilige Auswirkung auf die maximale Druckanstiegsrate auf. In den Versuchen, Abbildung 6.35, war die maximale Druckanstiegsrate vom Wassergehalt der Emulsion unbeeinflusst, weshalb sich diese Faktoren gegenseitig aufzuheben scheinen. Lediglich die Verzögerung bis nach OT, die bei der mittleren Luftzahl durch ein beträchtliches Wasser-Kraftstoff-Verhältnis von $\Omega > 1$ erzielt wurde, hat die gewünschte Absenkung der Druckanstiegsrate zur Folge.

²²Es ist anzumerken, dass die Auswertung des Druckverlaufes durch die geringen Wärmefreisetzungsraten der Kalten Flamme sowie der überlagerten Verdampfungskühlung der Ladung gerade bei höheren Wassermengen an die Grenzen der Auswertegenauigkeit gelangt.

Einflussparameter EP	Änderung	Ursache	folglich
	EP durch		$dp/d\theta$
	H_2O		
Kompressionsgeschw.	Ļ	Verzögerung der Zündung Richtung OT	Ļ
Moldichte (Konzentr.)	1	Voranschreitende Kompression	1
Wärmekapazität	↑	hohe Wärmekapazität Wasserdampf	Ļ
Temperaturgradienten	↑ (lokal inhomogene Kühlwirkung	Ļ

Tabelle 6.1: Beeinflussung der maximalen Druckanstiegsrate $dp/d\theta$	durch das
in der Emulsion enthaltene Wasser	

Bei Luftzahlen von $\lambda \leq 3,0$ werden ohne Wasser beginnend mit der Hauptwärmefreisetzung Druckoszillationen beobachtet. Diese Schwingungen werden mit zunehmendem Wassergehalt reduziert. Die in Abschnitt 6.3.3 aufgeführten Gründe für die Unterdrückung von Druckschwingungen durch das zugegebene Wasser gelten auch bei der Nutzung von Emulsionen.

6.4.4 Einfluss des Wassergehaltes auf die Schadstoffemissionen

Abschließend werden die Schadstoff-Emissionen von CO sowie Stickoxiden bei der Verwendung der Emulsionen dargestellt. Wie bei der Darstellung der getrennten Wassereinspritzung sollen diese sowohl als Funktion des Wasser-Kraftstoff-Verhältnisses Ω als auch der räumlich gemittelten Maximaltemperatur T_{max} aufgetragen werden.

Kohlenmonoxid (CO)

Abbildung 6.36 zeigt die Resultate der CO-Messung bei der Einspritzung von Emulsionen. Das Niveau ist mit Werten im Bereich von 1200 ppm bis 2800 ppm hoch und entspricht damit weitgehend den in Abschnitt 6.3.4 aufgeführten Werten für die getrennte Einspritzung. Ein deutlicher Unterschied kann lediglich im Falle eines sehr mageren Betriebes ($\lambda \approx 5$) und gleichzeitig hohen Wassermengen beobachtet werden. Die Emulsion liefert hier aufgrund der höheren Maximaltemperaturen von $T_{max} > 1300$ K keine höhere CO-Emission; bei getrennter Einspritzung stiegen die CO-Werte dagegen bis über 4000 ppm an.



Abbildung 6.36: Experiment: Kohlenmonoxid-Emissionen bei Verwendung von Emulsionen; Düse E12

Bei der Nutzung der Emulsion kann damit keine Abhängigkeit der CO-Emission vom Wassergehalt oder der globalen Luftzahl beobachtet werden.

Stickoxid-Emissionen (NO_x)

Analog zur Beschreibung der Stickoxid-Emissionen in Abschnitt 6.3.4 werden diese auch für die Verwendung der Emulsion anhand experimenteller und numerischer Ergebnisse erläutert.

Die experimentellen Daten zeigen eine deutliche Verbesserung der Stickoxid-Emissionen, wenn der Wassergehalt der Emulsion erhöht wird. In vergleichenden Versuchen (nicht dargestellt) lieferte die Verwendung des reinen Emulsions-Basiskraftstoffes ohne Wasser bei einer Luftzahl von $\lambda \approx 2$ NO-Emissionen bis zu 240 ppm und NO_x-Emissionen bis zu 700 ppm. Diese Werte werden schon durch die Basisemulsion deutlich unterboten und können durch eine weitere Erhöhung des Wassergehaltes nochmals um etwa 50% reduziert werden, wie die Abbildungen 6.37 und 6.38 zeigen. Eine deutliche Reduktion der Emissionen kann auch bei mittleren Luftzahlen erzielt werden. Bei hohen Luftzahlen ist der Einfluss auf das niedrige Niveau von zumeist unter 50 ppm dagegen gering.

Das Niveau der Stickoxid-Emissionen ist gerade im wichtigen Fall einer hohen Last bei der Nutzung der Emulsion niedriger als bei der getrennten Wassereinspritzung: beispielsweise resultieren bei $\lambda \approx 2,0$ und $\Omega \approx 0,75$ im Fall der getrennten Einspritzung NO_x-Emissionen von etwa 300 ppm, im Fall der Emulsion dagegen lediglich 200 ppm und damit etwa ein Drittel weniger. Bei mittleren und niedrigen hier betrachteten Lasten wird der Unterschied geringer oder zeigt einen uneinheitlichen Trend.



Abbildung 6.37: Experiment/Simulation: Stickstoffmonoxid-Emissionen bei Verwendung von Emulsionen, x: Simulation; Düse E12



Abbildung 6.38: Experiment/Simulation: Stickoxid-Emissionen bei Verwendung von Emulsionen, x: Simulation; Düse E12

Stickoxid-Emissionen in dieser Größenordnung sind durch den thermischen Bildungsweg nach Zel'dovich dominiert, siehe Abschnitt 2.4.1. Dies wird in der
Auftragung der Emissionen über der Maximaltemperatur besonders deutlich. Es ist eine klare Korrelation der Emissionen mit der Temperatur zu beobachten, die Luftzahl oder der Wassergehalt haben darüber hinaus keinen direkten Einfluss auf die NO_x -Emissionen.

Der dominierende thermische Bildungsweg der Stickoxide wird weiter durch die numerische Simulation untermauert. Diese wurde bei einer globalen Luftzahl von $\lambda \approx 2,0$ und einem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis $\Omega = 1,0$ durchgeführt. Der Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen liefert eine sehr gute Übereinstimmung sowohl bei der Auftragung über dem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis als auch über der örtlich gemittelten Maximaltemperatur im Brennraum. Auch der Trend zu niedrigeren Stickoxidwerten bei der Nutzung der Emulsion wird durch die Simulation bestätigt. Dies ist zu einem großen Teil auf die um 3°KW bis 4°KW spätere Zündung bei der Nutzung der Emulsion zurückzuführen, wie der Vergleich der Abbildung 6.39 mit 6.24 zeigt. Wieder zeigt sich die vergleichsweise langsame Kinetik der NO-Bildung. Bei der Verbrennung der Emulsion wird während der Hauptwärmefreisetzung bis OT nur etwa ein Drittel des Endwertes produziert. Zum Zeitpunkt 15°KW nOT "friert" die Bildung bei einer mittleren Temperatur von unter 1900 K ein.



Abbildung 6.39: Simulation: Temperatur und NO-Produktion; Düse E12

Neben der mittleren Temperatur im Brennraum ist die lokale Maximaltemperatur aufgrund der exponentiellen Temperaturabhängigkeit der Stickoxidbildung von großer Bedeutung. Bei der Emulsion wird eine lokale Maximaltemperatur von deutlich unter 2500 K erzielt, Abbildung 6.39. Bei der getrennten Einspritzung, Abbildung 6.24, zeigte sich dagegen eine um etwa 150 K höhere Maximaltemperatur. Bei der Diskussion des Verdampfungsverhaltens der Emulsion 2.2.3 haben wir gesehen, dass die Verwendung der Emulsion zunächst keine Gleichverteilung der beiden Dämpfe erzeugt. Dennoch scheint die niedrigere lokale Maximaltemperatur bei der Verwendung der Emulsion auf die bessere Überlappung der Wasser- mit der Kraftstoffverteilung im Brennraum zurückzuführen zu sein, die im folgenden Abschnitt 6.4.5 aufgezeigt werden wird. Damit kann neben der Senkung der Maximaltemperatur auch die Zündung effektiver verzögert werden.

Zusammenfassend lässt sich schließen, dass durch die Erhöhung des Wassergehaltes der Emulsion die Stickoxid-Emissionen deutlich reduziert werden können. Emulsionen nutzen gerade bei hohen Lasten das Wasser effizienter als eine getrennte Einspritzung. Die Ursache hierfür ist zum einen die bessere Überlappung der Wasser- mit der Kraftstoffverteilung als auch die spätere Zündung. Diese Trends sind auch aus konventionellen Dieselbrennverfahren bekannt. Die experimentell beobachtete Verringerung um etwa ein Drittel gegenüber der getrennten Einspritzung wird in der Simulation noch leicht übertroffen.

6.4.5 Integrale Ergebnisse der Verdampfungs- und Verbrennungssimulation

Die numerischen Ergebnisse der Emulsionseinspritzung sollen hier integral, im nächsten Abschnitt dann ortsaufgelöst betrachtet werden. Es wurde derselbe Betriebspunkt wie bei der getrennten Einspritzung mit einer globalen Luftzahl von $\lambda \approx 2,0$ und $\Omega = 1,0$ berechnet.

Der berechnete Temperatur- und Druckverlauf ist in Abbildung 6.40 dargestellt. Während 0-dimensionale Reaktorberechnungen einen deutlich 2stufigen Wärmefreisetzungsverlauf zeigen, siehe Abschnitt 6.1, äußert sich dieses Zündverhalten im integralen Druckverlauf nur geringfügig. Bei etwa 23°KW vOT steigen sowohl die maximale als auch die volumengemittelte Temperatur leicht an. Die Ursache hierfür liegt zum einen in der zu diesem Zeitpunkt noch nicht abgeschlossenen Verdampfung. Zum anderen fluktuiert der chemische Reaktionsfortschritt räumlich aufgrund von Gradienten der Temperatur und der Luftzahl im Brennraum. In den globalen Daten äußert sich dies durch eine zeitlich verlängerte Wärmefreisetzungsphase durch sukzessiven chemischen Umsatz an den verschiedenen Orten.

In Abbildung 6.40 sind weiterhin die Massenverläufe von Kraftstoff und von Wasser dargestellt. Hier ist deutlich die zu Beginn erhöhte Verdampfungsrate des Wassers gegenüber dem Kraftstoff ersichtlich. Für wasserhaltige Einzeltropfen wurde in der Simulation vorgegeben, dass diese doppelt so viel Wasser wie Kraftstoff abdampfen, siehe Abschnitt 5.3. Dieses Verhältnis spiegelt sich zu Beginn auch im Ensemble der Tropfen wider (bis ca. 53°KW vOT). Danach ist die Steigung beider Kurven annähernd konstant, wobei die Kraftstoffdampfmenge langsamer als die Wasserdampfmenge ansteigt, wodurch integral das Verhältnis von Wasserdampf- zu Kraftstoffdampfmasse von dem für die Einzeltropfen vorgegebenen Wert 2:1 immer weiter abweicht. Der Grund liegt darin, dass nach Aufbrauchen des Wasseranteiles von früh eingespritzten Tropfen nur noch Kraftstoff verdunstet. Aufgrund der deutlich niedrigeren Verdampfungsenthalpie des Kraftstoffs steigt damit die Verdampfungsrate der nur noch Kraftstoff enthaltenden Tropfen stark an, siehe Abbildung 5.4.

Analog zur getrennten Einspritzung zeigt sich auch für die Emulsion, dass in der Simulation nicht das komplette Fluid verdampft. Hierfür ist besonders die hohe Verdampfungsenthalpie des Wasseranteiles der Emulsion verantwortlich. Wie im Fall der getrennten Einspritzung, Abschnitt 6.3.5, basiert dies zusätzlich auf der Abnahme der Relativgeschwindigkeit zwischen spät eingedüsten Tropfen niedriger Austrittsgeschwindigkeit und der durch früher eingedüste Tropfen induzierten Gasbewegung ("Windschatteneffekt"). In der Simulation wird dieser Effekt verstärkt, da der Tropfenzerfall im eingesetzten Zerstäubungsmodell auf aerodynamischen Kräften beruht und Phänomene in der Düse, z.B. Kavitation, vernachlässigt werden, siehe Abschnitt 5.2.

Abbildung 6.41 zeigt die Verteilung des Kraftstoffs und des Wassers über dem normierten Volumen. Im Vergleich zur getrennten Einspritzung, siehe Abbildung 6.26, macht sich die geringe Verdampfungsmenge des Kraftstoffs im geringeren Massenbruch $Y_{C_7H_{16}}$ bemerkbar. Bei Beginn des chemischen Umsatzes (23°KW vOT) ist über 40% des Volumens mit einem Kraftstoffdampf-



Abbildung 6.40: Simulation: Temperatur- und Druckverlauf, eingespritzte und verdampfte Massen an Kraftstoff und Wasser bei Emulsionseinspritzung; Düse E12



Abbildung 6.41: Simulation: Verteilung der verdampften Fluide über das Volumen bei Emulsionsbetrieb (Düse E12)

Massenbruch von $Y_{C_7H_{16}}$ < 1 sehr mager. Zu diesem Zeitpunkt beträgt der grau markierte Bereich des nah- bzw. unterstöchimetrischen Volumenanteiles nur etwa 15%. Dennoch darf hieraus nicht geschlossen werden, dass bei der Verwendung von Emulsionen mit einer geringen Rußbildung zu rechnen ist, da noch verhältnismäßig große Mengen an Flüssigkeit unverdampft sind. Wie wir im weiteren Verlauf sehen werden, haften diese bis zur Zündung und teilweise über die Verbrennung hinaus an der Muldenwand an. Dieser flüssige Kraftstoffanteil ist dann auch der Grund für die bei höheren Lasten beobachtete Rußstrahlung.

In Abbildung 6.42 ist der Verlauf der Überlappung²³ von Wasser- und Kraftstoffdampf ersichtlich. Die Überlappung ergibt sich kurz nach Einspritzbeginn aus dem modellierten Verhältnis der abdampfenden Massenströme von Kraftstoff und Wasser in Höhe von 2:1. Nachdem der Wasseranteil in den einzelnen Tropfen aufgebraucht ist, dampfen diese lediglich Kraftstoff ab. Dadurch nähert sich der Kraftstoffdampf-Massenbruch dem Wasserdampf-Massenbruch an, die Überlappung verbessert sich und strebt gegen den für $\Omega = 1,0$ idealen Wert von $ÜP_{ideal} = 0,50$. Zu Beginn der Kalten Flamme ergibt sich mit $ÜP_I = 0,53$ im Vergleich zu $ÜP_I = 0,34$ bei der getrennten Ein-

²³Definition siehe Abschnitt 6.3.5.



Abbildung 6.42: Simulation: Integrale Überlappung von Kraftstoff- und Wasserdampf sowie lokale Überlappung zum Zeitpunkt 27°KW vOT bei Emulsionsbetrieb (Düse E12)

spritzung, Abschnitt 6.3.5, eine deutlich bessere integrale Überlappung. Die hohe Güte der Überlappung im Fall der Emulsionseinspritzung zeigt sich neben dem integralen Parameter besonders deutlich in der geringen Varianz der Verteilung des Überlappungsparameters über das Volumen, vergleiche hierzu Abbildung 6.42 mit 6.27.

6.4.6 Ortsaufgelöste Analyse der Verdampfungs- und Verbrennungssimulation

Abbildung 6.43 schildert die Situation im Brennraum für die relevanten Zeitpunkte im Emulsionsbetrieb, wobei die Punkte S₁ bis S₅ den Markierungen im Druckverlauf von Bild 6.40 entsprechen. Im Gegensatz zur getrennten Einspritzung wurden hier nur die Schnitte im azimuthalen Zentrum des berechneten Sektors gezeigt, da die Gradienten in azimuthaler Richtung geringer sind als bei der getrennten Einspritzung. Die im vorigen Abschnitt gezeigte Überlappung der Dämpfe ist auch in den räumlichen Schnitten zu beobachten. Der Massenbruch dampfförmigen Wassers Y_{H_2O} ist dabei in der gesamten Einspritz- und Homogenisierungsphase deutlich höher als derjenige des Kraftstoffs $Y_{C_7H_{16}}$. Dies ist im Verdampfungsverhalten der Emulsion begründet, die in der Simulation für wasserhaltige Einzeltropfen durch die Verdampfung eines doppelt so hohen Wasser- wie Kraftstoffmassenstroms modelliert wurde. Besonders hohe Mengen beider Fluide verdampfen während und nach der Einspritzung tief in der Kolbenmulde, besonders im Bereich des inneren Glaseinsatzes. Hier werden deshalb bis zur Zündung die höchsten Konzentrationen sowie die niedrigsten Temperaturen beobachtet.

Durch die Einspritzung wird eine tumbleförmige Gasbewegung in der Kolbenmulde induziert, die im äußeren Bereich zum Muldenboden und im inneren Bereich zum Zylinderkopf strömt. Damit werden die Dämpfe aus der Mulde heraus in Richtung des Zylinderkopfs bewegt und in Folge wird die Gleichverteilung der Medien im Brennraum gefördert. Während dies zum Zeitpunkt S₄ für den Wasserdampf gut ersichtlich ist, hat in dem zylinderkopfnahen Bereich die Menge des Kraftstoffdampfes aufgrund der hier höheren Temperaturen bereits durch chemische Reaktionen abgenommen. Durch die Gasbewegung wird zwar Wasserdampf und kühles Fluid aus der Mulde heraustransportiert, die direkte Kühlwirkung durch verdampfende Tröpfchen findet hier jedoch nur geringfügig statt. Zum Zeitpunkt S₄ betragen die Temperaturgradienten im Brennraum 3...25 K/mm, die hohen Werte liegen in axialer Richtung vom Muldenboden zum Zylinderkopf vor.

Die Skalarfelder zum Zeitpunkt S₅ zeigen, dass die Hauptwärmefreisetzung im zylinderkopfnahen, radial mittigen Bereich der Kolbenmulde beginnt, da hier eine ausreichende Reaktandenkonzentration mit einem hohen Temperaturniveau zusammenfällt. Die Verbrennung breitet sich von hier aus primär in die Kolbenmulde aus, in geringerem Ausmaß wird auch oberhalb der Muldenbzw. der Kolbenkrone Wärme freigesetzt. Durch den höheren Temperaturgradienten schreiten die sukzessiven Selbstzündungen langsamer voran als bei der getrennten Einspritzung. In Abbildung 6.40 zeigt sich während der Hauptwärmefreisetzung eine näherungsweise konstante Druckanstiegsrate von ca. 11 bar/ °KW. Auch danach findet sich noch flüssiges Fluid, besonders an den Wänden der Mulde. Das Abdampfen von wandanhaftendem Fluid ist in der Simulation geringer als im Experiment, da sämtliche Wände mit der konstanten Temperatur von 100°C modelliert wurden. In Realität erwärmen sich dagegen die Wände durch Wärmezufuhr von den heißen Brennraumgasen.



Abbildung 6.43: Simulation: Einspritzung und Verbrennung der Emulsion; Düse E12

Zusammenfassend lässt sich aus der numerischen Simulation schließen, dass die Emulsion deutlich schlechter verdampft als der reine Kraftstoff. Bis zur Zündung und auch noch nach der Verbrennung sind deshalb noch vergleichsweise große Mengen an Kraftstoff und Wasser flüssig. Dennoch führt die bessere Überlappung der beiden Felder zu einer tendenziell besseren Kühlung an Orten, wo sich Kraftstoff befindet. In Folge kommt es zu einer späteren Zündung. Die Druckanstiegsraten sind in der Simulation bei gleichem Wasser-Kraftstoff-Verhältnis etwas geringer als bei der getrennten Einspritzung.

7 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde anhand experimenteller sowie numerischer Untersuchungen das Verhalten der Wasser- bzw. der Emulsionseinspritzung auf die homogene Dieselverbrennung dargestellt. Dabei wurde der gesamte Prozess von der Kraftstoffeinbringung über die Homogenisierung einschließlich Zündung und Verbrennung betrachtet. Zudem wurde der Einfluss des Wassers auf die Stickoxid- und Kohlenmonoxid-Emissionen untersucht. Die verschiedenen Betriebspunkte konnten hinsichtlich der Rußkonzentration während der Verbrennung mittels Lumineszenz qualitativ verglichen werden.

Zunächst wurde die *homogene Dieselverbrennung ohne Wasserzugabe* betrachtet. Anhand von Schattenaufnahmen ließ sich das Eindringverhalten von Kraftstoffsprays in eine Atmosphäre beobachten, die aufgrund früher Einspritzung eine geringe Temperatur und Dichte aufweist und sich dadurch von der konventionellen Dieseleinspritzung unterscheidet. Dabei wurde festgestellt, dass die Eindringtiefe der Sprays etwa linear mit der Zeit korreliert und nur gering von der Dichte der Gasatmosphäre beeinflusst wird. Die Spraykegelwinkel steigen während der Einspritzung zunächst an und fallen dann auf einen konstanten Wert ab. Die zeitlich gemittelten Spraykegelwinkel korrelieren mit der Gasdichte mit $\psi_G \sim \rho_g^{0,25}$. Sowohl diese Proportionalität als auch die tatsächlichen Winkel bestätigen frühere Publikationen. Der Kraftstoff verdampft in der Flugphase nicht vollständig und trifft auf die Kolbenmuldenwand auf. Teile des Sprays verharren an der Wand, andere prallen ab und induzieren eine tumbleartige Muldenströmung.

Die Verbrennung zeichnet sich bei einer frühen Einspritzung und einer guten Homogenität durch einen 2-stufigen Wärmefreisetzungsverlauf aus. Nach der Kalten Flamme kommt es in der Übergangsphase zu einer Reduktion der Dichtegradienten, was sich in Form reduzierter Intensitätsgradienten bei Aufnahmen mittels Schattenmesstechnik bemerkbar macht. Die Hauptwärmefreisetzung zeigt sich optisch in Form eines feinen, durch Dichtegradienten hervorgerufenen Musters. Bei geringer Last ist außer wenigen leuchtenden Punkten keine Rußstrahlung zu sehen. Mit zunehmender Last steigt besonders im äußeren Bereich der Kolbenmulde die Lumineszenzintensität deutlich an. Der bei der Einspritzung teilweise an der Muldenwand anhaftende Kraftstoff dampft bis zur Zündung nicht vollständig ab. Erst nach dem massiven Temperaturhub durch die Hauptwärmefreisetzung verdampft der noch flüssige Kraftstoff und verbrennt aufgrund unvollständiger Mischung fett und damit rußerzeugend.

Die Wassereinspritzung wurde zunächst 0-dimensional modelliert. Dabei stellte sich heraus, dass – ausgehend von einer zu frühen Zündung bei der Kombination von Diesel mit einem Kompressionsverhältnis von $\epsilon = 16$ – die Verzögerung der Zündung zum OT deutliche thermodynamische Vorteile bietet und somit Leistung und Wirkungsgrad eines Motors positiv beeinflusst. Aus thermodynamischer Sicht ist eine möglichst frühe Einspritzung des Wassers zu bevorzugen, da die hohe Verdampfungsenthalpie des Wassers den Brennraumdruck absenkt und damit die kompressionsbedingte Volumenänderungsarbeit reduziert. Durch eine Abschätzung der Tropfenverdampfung mit dem d^2 -Gesetz zeigte sich, dass die Tropfengröße entscheidenden Einfluss auf die Kühlwirkung und damit die gewünschte Zündzeitverlagerung aufweist. Reaktionskinetisch hat das Wasser keinen Einfluss auf die Zündung. Die Dissoziation des Wassers bei den verbrennungsbedingt hohen Temperaturen kann jedoch die Emissionswerte beeinflussen.

	Getrennte Einspritzung	Emulsion
Verzögerung Zündung	+	++
Senkung Druckanstiegsrate	+	0 (+)
Reduktion Druckoszillationen	++	++
Reduktion Ruß	++	+
Reduktion NO _x	+	++
Einfluss auf CO	0 (-)	0

Tabelle 7.1: Einfluss des Wassers bei den untersuchten Verfahren (++: sehr po-
sitiv, +: positiv, o: neutral, -: negativ, - -: sehr negativ)

Basierend auf den 0-dimensionalen Erkenntnissen *wurde die Wasserzugabe am Einhubtriebwerk sowie numerischen Simulationen anhand konventioneller sowie erodierter Düsen untersucht,* wobei Tabelle 7.1 die wesentlichen Resultate der beiden analysierten Verfahren zusammenfasst. Für beide Verfahren wurde gezeigt, dass ein Wasser-Kraftstoff-Verhältnis von $\Omega \approx 1,0$ nötig ist, um die Hauptwärmefreisetzung in den Bereich des Oberen Totpunkts zu verzögern. Die Effizienz des Wassers konnte dabei durch die Bearbeitung der zunächst untersuchten konventionellen Düsenkuppen gesteigert werden und liegt dann im Bereich der 0-dimensionalen Berechnungen. Schattenaufnahmen zeigten dabei eine deutliche Erhöhung der Spraykegelwinkel, womit der Lufteintrag in die Sprays intensiviert und damit die Verdampfung erhöht wurden.

Die *Druckanstiegsrate der Hauptwärmefreisetzung* wird durch die Emulsion nur gesenkt, wenn diese die Zündung bis nach OT verzögert. Die getrennte Einspritzung des Wassers hat dagegen stets einen dämpfenden Einfluss. Hierfür scheinen die höheren Temperaturgradienten in axialer Richtung verantwortlich zu sein, die die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Reaktionszonen deutlich reduzieren. In transversaler Richtung sind die Gradienten geringer, was jedoch nicht zur Bildung von Detonationen führte.

Ohne Wasserzugabe wurden teilweise intensive *Druckschwingungen* beobachtet. Die Druckamplituden werden durch das Zusammentreffen der von ersten Wärmefreisetzungszonen ausgesandten Druckwelle mit der Wärmefreisetzung in der gegenüberliegenden Brennraumhälfte deutlich verstärkt. Die Steigerung der Last wirkt sich durch die höhere Wärmefreisetzung in kürzerer Zeit besonders förderlich auf das Druckungleichgewicht im Brennraum aus. Mit beiden Wasserzugabeverfahren reduziert Wasser die Umsatzraten durch seine hohe Wärmekapazität und verringert die Druckunterschiede. Die räumlich inhomogene Kühlwirkung des Wassers verstärkt die Temperaturgradienten und reduziert die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Reaktionszonen. Sowohl bei der getrennten Wassereinspritzung als auch beim Einsatz von Emulsionen wird eine deutliche Reduktion der Druckoszillationen beobachtet. Es zeigte sich, dass die *Rußkonzentration* mit zunehmender Wassereinspritzmenge deutlich reduziert werden kann. Bei der getrennten Einspritzung konnte dies darauf zurückgeführt werden, dass durch den zusätzlichen Impuls des Wassers sowie die verzögerte Zündung die Homogenität des Gemisches zur Hauptwärmefreisetzung zunimmt. Auf die Nachoxidation des Rußes hat die Dissoziation des Wassers, beispielsweise zu OH-Radikalen, einen zusätzlichen positiven Einfluss. Auch bei der Verwendung von Emulsionen stieg der Sprayimpuls im Vergleich zur Kraftstoffeinspritzung durch das zusätzliche Wassers deutlich an. Durch den hohen Ballast des Wassers verdampften die Tropfen der Emulsion jedoch schlechter und benetzten die Wand intensiver. Dies zeigte sich auch in der numerischen Simulation. Dennoch wurde auch mit der Emulsion die Rußkonzentration leicht verringert, bei gleicher Wassermenge war die Reduktion jedoch geringer als bei der getrennten Einspritzung.

Neben der Reduktion der Rußkonzentration verringerte das Wasser zudem die Bildung von *Stickoxiden* in der wandnahen Diffusionsflamme. Darüber hinaus kühlt es die Gasphase im gesamten Brennraum und führt mit der verzögerten Zündung zu einer deutlichen Reduktion der Gesamt-Stickoxidemission. Der große Einfluss der verzögerten Zündung auf die vergleichsweise langsame Chemie der thermischen Stickoxidbildung wurde durch die numerische Simulation deutlich nachgewiesen. Sowohl Simulation als auch Experiment zeigten die effektivere Nutzung des Wassers beim Einsatz von Emulsionen. Dies beruht im Wesentlichen auf der zwar nicht idealen, jedoch deutlich besseren Überlappung der Kraftstoff- und Wasserverteilung.

Die *Kohlenmonoxid-Emissionen* waren im Vergleich zu einem konventionellen Brennverfahren auf einem sehr hohen Niveau. Bei niedriger Last wurde bei der getrennten Einspritzung von Wasser eine weitere Zunahme der CO-Emissionen beobachtet, die auf eine Senkung der Temperatur unter die Oxidationsschwelle von ca. 1100 K zurückgeführt wurde. Bei mittlerer und höherer Last werden die CO-Emissionen von der Luftzahl sowie der zugegebenen Wassermenge kaum beeinflusst.

Die Wasserzugabe ist ein interessanter Weg, die homogene Kompressionszündung zu hohen Lasten auszuweiten. Sowohl bei getrennter Einspritzung als auch bei der Nutzung von Emulsionen sind dabei Wasserzugabemengen in der Höhe der Kraftstoffmengen nötig. Um die bei hohen Einspritzmengen auftretenden Wandfilme zu reduzieren und die Homogenität weiter zu erhöhen, scheinen neben der in dieser Arbeit vorgestellten Bearbeitung der Düsenkuppen weitere Einspritzmaßnahmen – beispielsweise Mehrfacheinspritzungen – sinnvoll. Um den hohen Wasserverbrauch zu verringern, könnte eine Kombination mit einer AGR-Strategie sinnvoll sein. Damit ließen sich ohne Wassereinspritzung niedrige Lasten abdecken, die hinsichtlich Druckanstiegsraten, Druckoszillationen, Stickoxid- und Ruß-Emissionen weniger problematisch sind. Wasser könnte dann bei steigender Last zugegeben werden und den Betriebsbereich zu deutlich höheren Lasten und akzeptablen Leistungsdichten erweitern.

A Anhang

A.1 Charakteristische Kennzahlen

A.1.1 Einspritzung und Zerstäubung

Wie in Abschnitt 2.1 beschrieben, dienen Ohnesorge-Zahl, Düsen-Reynolds-Zahl und Gas-Weber-Zahl zur Kategorisierung der Zerstäubung und Tropfenzerteilung.

Für die Berechnung dieser Größen wurden die Stoffwerte für Dieselkraftstoff und Wasser aus Abschnitt A.5 sowie die Düsengeometrie (Lochdurchmesser D = 0,135 mm) der eingesetzten 6-Loch-Düsen verwendet. Der Einspritzdruck der beiden Fluide beträgt in dieser Arbeit stets 800 bar, der Druck im Brennraum je nach Einspritzzeitpunkt 10...40 bar.

1. Die *Düsen-Ohnesorge-Zahl* Oh_D setzt die Fluideigenschaften der flüssigen Phase (dynamische Viskosität η_f , Dichte ρ_f , Oberflächenspannung σ) in Beziehung zur Geometrie (Düsenlochdurchmesser *D*):

$$Oh_{D} = \frac{\eta_{f}}{\sqrt{\rho_{f} \sigma D}}$$
(A.1)

$$Oh_{D,Diesel} = \frac{2,16 \cdot 10^{-3}}{\sqrt{830,5 \cdot 0,026 \cdot 0,135 \cdot 10^{-3}}} = 0,040[-]$$

$$Oh_{D,H_{2}O} = \frac{0,64 \cdot 10^{-3}}{\sqrt{998 \cdot 0,0692 \cdot 0,135 \cdot 10^{-3}}} = 0,0066[-]$$

2. Die *Düsen-Reynolds-Zahl* Re_D gibt Auskunft über die Turbulenz in der Düse:

$$\operatorname{Re}_{D} = \frac{u_{m} \cdot D \cdot \varrho_{f}}{\eta_{f}} \tag{A.2}$$

$$\operatorname{Re}_{D,Diesel} = \frac{215 \cdot 0.135 \cdot 10^{-3} \cdot 830,5}{2,16 \cdot 10^{-3}} \approx 1,1 \cdot 10^{4}[-]$$

$$\operatorname{Re}_{D,H_{2}O} = \frac{196 \cdot 0.135 \cdot 10^{-3} \cdot 998}{0,64 \cdot 10^{-3}} \approx 4,1 \cdot 10^{4}[-]$$

Hierfür ist zusätzlich die mittlere Geschwindigkeit u_m im Düsenloch nötig. Diese liegt aufgrund Reibung bis zu 50% (nach Ofner [Ofn01]) unter der reibungsfrei nach dem Ansatz von Bernoulli ermittelten Geschwindigkeit $u_{Bernoulli}$:

$$u_{m} \approx 0,5 \cdot u_{Bernoulli} = 0,5 \cdot \sqrt{\frac{2(p_{Rail} - p_{Kammer})}{\rho_{f}}}$$
(A.3)
$$u_{m,Diesel} = 0,5 \cdot \sqrt{\frac{2(800 \cdot 10^{5} - 30 \cdot 10^{5})}{830,5}} = 215 \text{ [m/s]}$$
$$u_{m,Wasser} = 0,5 \cdot \sqrt{\frac{2(800 \cdot 10^{5} - 30 \cdot 10^{5})}{998}} = 196 \text{ [m/s]}$$

3. Zur Berücksichtigung der aerodynamischen Kräfte der im Brennraumgas bewegten Tröpfchen dient die *Gasphasen Weber-Zahl* We_G . Setzt man für den Tropfendurchmesser *d* den Düsendurchmesser *D*, so ergibt sich für einen Tropfen mit mittlerer Austrittsgeschwindigkeit u_m direkt am Düsenaustritt ein Maximalwert:

We_G =
$$\frac{u_m^2 \cdot d \cdot \rho_G}{\sigma}$$
 (A.4)
We_G $\leq \frac{215^2 \cdot 0, 135 \cdot 10^{-3} \cdot 6}{0,026} = 1440[-]$

A.1.2 Turbulente Skalen

Turbulente Fluktuationen spielen bei sämtlichen Prozessen von der Zerstäubung (Abschnitt 2.1), der Wärme- und Stoffübertragung (siehe Abschnitt 5.2), der Homogenisierung und der deflagrativen Flammenausbreitung eine wichtige Rolle (Abschnitt 2.5.1). In der Simulation wird die turbulente kinetische Energie k und die Dissipationsrate ϵ abgespeichert. Während der Einspritzung (Index E) ergeben sich diese Größen zu:

$$\epsilon_E \approx 1 \cdot 10^5 \dots 2 \cdot 10^5 [\text{m}^2/\text{s}^3]$$

 $k_E \approx 50 \dots 100 [\text{m}^2/\text{s}^2]$

bzw. vor dem Beginn der Hauptwärmefreisetzung (Index H):

$$\epsilon_H \approx 1 \cdot 10^4 \dots 4 \cdot 10^4 \left[\text{m}^2/\text{s}^3 \right]$$

$$k_H \approx 20 \dots 40 \left[\text{m}^2/\text{s}^2 \right]$$

Daraus lassen sich verschiedene Größen ableiten. Falls nicht anders angegeben, sind die Korrelationen dem Standardwerk von Tennekes und Lumley [TL72] entnommen:

1. Das integrale Längenmaß l_I kann beim Standard k- ϵ -Modell aus turbulenter kinetischer Energie k und Dissipationsrate ϵ abgeschätzt werden [Bau06]:

$$l_{I} \approx \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\epsilon}$$

$$l_{I,E} = 3,5...5 \text{ [mm]}$$

$$l_{LH} = 6...9 \text{ [mm]}$$
(A.5)

Dies entspricht etwa einem Zehntel der Brennraumgeometrie (Durchmesser Zylinderbuchse $d_{Zyl} = 78,3$ mm, Durchmesser Kolbenmulde $d_{Mulde} = 49,3$ mm). Heywood [Hey88] gibt für das integrale Längenmaß in Verbrennungsmotoren einen Wert von ca. $l_I \approx 2$ mm bzw. 20% des OT-Abstandes zwischen Kolben und Zylinderkopf an. Bei dem hier verwendeten Kolben mit einer tiefen Mulde scheint die Übertragung auf 20% der Muldentiefe besser geeignet, was einem Wert von etwa 3,6 mm entspricht.

2. Das kleinste Längenmaß nach Kolmogorov l_K lässt sich allgemein aus Dissipationsrate ϵ und kinematischer Viskosität v abschätzen:

$$l_K = \left(\frac{\nu^3}{\epsilon}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{A.6}$$

$$l_{I,E} \approx 3 [\mu m]$$

 $l_{I,H} \approx 4 [\mu m]$

3. Beim Standard k- ϵ -Modell wird zudem isotrope Turbulenz angenommen, womit k und u' direkt gekoppelt sind:

$$u' = \sqrt{\frac{2}{3}k}$$
(A.7)

$$u'_{E} = 5...8 [m/s]$$

$$u'_{H} = 3,5...5 [m/s]$$

4. Die turbulente Reynolds-Zahl Re_t kann mit den Werten aus der Simulation k, ϵ und $\nu \approx 2 \cdot 10^{-6}$ m²/s abgeschätzt werden:

$$Re_{t} = \frac{u' \cdot l_{I}}{v} \approx \frac{u'}{v} \cdot \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\epsilon} = \sqrt{\frac{2}{3}} \cdot \frac{k^{2}}{\epsilon v}$$
(A.8)

$$Re_{t,E} = 1 \cdot 10^{4} \dots 2 \cdot 10^{4} [-]$$

$$Re_{t,H} \approx 1,5 \cdot 10^{4} [-]$$

A.2 Gültigkeit der Siedepunkterniedrigung

In Abschnitt 2.2.3 wurde aufgeführt, dass Emulsionen aufgrund ihrer Mischungslücke sich durch eine Siedepunkterniedrigung auszeichnen. Die Gültigkeit dieser Annahme soll nun anhand typischer Werte bei der Einspritzung von Emulsionstropfen abgeschätzt werden. Wie in Skizze A von Abbildung A.1 angedeutet, besteht jeder Tropfen der Emulsion aus Kraftstoff- und aus Wasserphase. Die Oberfläche des Emulsionstropfens setzt sich aus Flächen der beiden beteiligten Fluide zusammen. Damit sich die Partialdrücke der beiden Fluide gegenseitig beeinflussen können und somit die beschriebene Siedepunkterniedrigung auftritt, dürfen die Abstände zwischen den Oberflächen der einzelnen Phasen nicht zu groß sein. Innerhalb eines charakteristischen Diffusionszeitmaßes τ_{diff} muss ausreichend Dampf von einem Bereich in den angrenzenden diffundieren können, um dort einen merklichen Partialdruckanteil beizusteuern. Wie Abbildung 6.12 entnommen werden kann, ergibt sich die Verdampfungsdauer für die oben ermittelte Tropfengröße $d \approx 10 \ \mu\text{m}$ zu etwa $t_{Verd} \approx 2 \ \text{ms}$. Das charakteristische Diffusionszeitmaß soll vereinfachend als 1/10 der mittleren Verdampfungsdauer t_{Verd} angenommen werden: $\tau_{diff} = 0, 2 \ \text{ms}$.



Abbildung A.1: Ausgleich von Massenbruch-Gradienten, schematisch

Betrachtet werden sollen nun die Dämpfe direkt an der Oberfläche eines Tropfens, Abbildung A.1. Skizze A zeigt einen Emulsionstropfen, Skizze B den vereinfachend planar modellierten Ausschnitt an der Tropfenoberläche. Zu einem Anfangszeitpunkt t_0 , z.B. kurz nach Austritt des Tropfens aus dem Zerstäuber, liege oberhalb des flüssigen Kraftstoffs, Bereich I, lediglich Kraftstoffdampf, oberhalb des Wassers, Bereiche II, lediglich Wasserdampf vor. Neben der Diffusion¹ von abdampfendem Fluid senkrecht zur Oberfläche führt der Konzentrations-Gradient zwischen den Bereichen I und II zu einer zusätzlichen Diffusion parallel zur Oberfläche. Diese Diffusion verschmiert mit der Zeit die räumlichen Verläufe des parallel zur Oberfläche aufgetragenen Kraftstoff-Massenbruchs Y_{Kr} , wie aus den Verläufen zu den Zeitpunkten $t_0...t_3$ deutlich wird. Die Front der Kraftstoffkonzentration schreitet dabei mit dem Eindringmaß $L_{e,m}$, exemplarisch für den Zeitpunkt t_1 eingezeichnet, in die Bereiche II oberhalb des flüssigen Wassers voran. Dieses Stoff-

¹Die Konvektion durch Tropfenbewegung soll hier nicht betrachtet werden. Diese führt zu einem zusätzlichen Molekültransport zwischen den Bereichen und verbessert damit die Gültigkeit der Siedepunkterniedrigung.

Diffusionslängenmaß $L_{e,m}$ lässt sich aufgrund der Analogie zwischen Wärmeund Stoffübertragung aus dem charakteristischen thermischen Diffusionslängenmaß $L_{e,th}^2$ zweier zum Zeitpunkt t_0 zusammengefügter Körper unterschiedlicher Anfangstemperatur abschätzen, wenn man identische stoffliche (*D*) und thermische (*a*) Diffusionskoeffizienten annimmt (Lewis-Zahl Le= a/D = 1):

$$L_{e,th} \approx \sqrt{a \cdot t}$$
 (A.9)

für
$$D = a \hookrightarrow L_{e,m} \approx \sqrt{D_{Kr/H_2O} \cdot \tau_{diff}}$$
 (A.10)

Nach [FVT04] lässt sich der Diffusionskoeffizient D_{Kr/H_2O} von Kraftstoffdampf – hierfür wurde entsprechend Abschnitt 2.2.3 Undecan gewählt – in Wasserdampf gemäß der Gleichung nach Hirschfelder/Bird/Spotz berechnen:

$$D_{Kr/H_2O} = A \cdot \frac{T^{1,5} \cdot \sqrt{\frac{1}{M_{Kr}} + \frac{1}{M_{H_2O}}}}{p \cdot \left(V_{c,Kr}^{1/3} + V_{c,H_2O}^{1/3}\right)^2 \cdot \Omega_{LJ}} = 1,57 \cdot 10^{-6} [m^2/s] \quad (A.11)$$
$$A = \left(1,21 - 0,0278 \cdot \sqrt{\frac{1}{M_{Kr}} + \frac{1}{M_{H_2O}}}\right) \cdot 10^{-8}$$

$$\begin{split} M_{H_2O} &= 18[\text{kg/kmol}] \text{ Molmasse Wasser} \\ M_{Kr} &= 156[\text{kg/kmol}] \text{ Molmasse Undecan} \\ T &= 500[\text{K}] \text{ Temperatur} \\ p &= 10[\text{bar}] \text{ Druck} \\ V_{c,H_2O} &= 0,057[\text{m}^3/\text{kmol}] \text{ kritisches Volumen Wasser} \\ V_{c,Kr} &= 0,660[\text{m}^3/\text{kmol}] \text{ kritisches Volumen Undecan} \\ \Omega_{LJ} &\approx 1,35[\text{-}] \text{ Lennard-Jones-Potenzial Undecan bei } T_r = \frac{T}{T_c} = \frac{500}{637} \end{split}$$

Setzt man den so ermittelten Diffusionskoeffizienten sowie das oben abgeschätzte Diffusionszeitmaß in Gleichung A.10 ein, so ergibt sich ein charakteristisches Stoff-Diffusionslängenmaß zu $L_{e,m} = 17,7\mu$ m. Aufgrund der Symmetrie des Modells entspricht dies der halben Breite des von Wasser bedeckten Oberflächenbereichs L_{H_2O} . Da somit die Stoff-Diffusion innerhalb des

²Eine nähere Beschreibung des thermischen Diffusionslängenmaßes findet sich z.B. bei Polifke und Kopitz [PK05].

charakteristischen Zeitmaßes über Distanzen voranschreitet, die größer als der Tropfendurchmesser sind ($2 \cdot L_{e,m} = 35, 4\mu m > 10\mu m \approx d_{Tr}$), kann von ausreichender Diffusion zwischen beiden Phasen und somit der aufgezeigten Siedepunktbeeinflussung ausgegangen werden.

A.3 Druckverlaufsanalyse

Die Druckverlaufsanalyse beruht auf einer 0-dimensionalen Betrachtung des Brennraumes. Für die Gase wurde dabei ideales Verhalten angenommen. Die gesuchte Wärmefreisetzung dQ_{Kr} durch die Verbrennung des Kraftstoffs wird aus dem 1.Hauptsatz ermittelt:

$$\frac{dQ_{Kr}}{d\theta} = \frac{dU}{d\theta} - \frac{dQ_W}{d\theta} + p \cdot \frac{dV}{d\theta} - \sum \left(\frac{dm}{d\theta} \cdot \Delta h_f\right)$$
(A.12)

Die Volumenänderungsarbeit $p \cdot \frac{dV}{d\theta}$ kann hierbei direkt aus den Messdaten ermittelt werden. Die Berechnung des totalen Differentiales der inneren Energie $U = m \cdot c_v \cdot T$ ist in die partiellen Ableitungen

$$\frac{dU}{d\theta} = c_v \cdot T \cdot \frac{dm}{d\theta} + m \cdot T \cdot \frac{dc_v}{d\theta} + m \cdot c_v \cdot \frac{dT}{d\theta}$$
(A.13)

aufzuspalten, wobei sämtliche Änderungen der Masse *m*, spezifischen isochoren Wärmekapazitäten c_v sowie der Temperatur *T* zu berücksichtigen sind. Die temperatur- und druckabhängigen Stoffdaten für c_v wurden hierbei aus der Stoffdatenbank des NIST [Nat] entnommen. Die Verdampfung $\frac{dm}{d\theta}$ von Kraftstoff und von Wasser wurde in eine Flugphase sowie die Wandfilmbildung aufgeteilt. Während beider Phasen, deren Dauer in Abhängigkeit des Einspritzzeitpunktes θ_{EB} aus repräsentativen Schattenaufnahmen gewonnen wurde, verdampft der Kraftstoff vereinfachend gleichförmig \dot{m} = konst. Der Wandwärmeübergang wurde nach der Korrelation von Woschni [Wos70] ermittelt:

$$\dot{Q}_{W} = \alpha \cdot A \cdot (T - T_{W})$$

$$\alpha = 130 \cdot d_{Zyl}^{-0.2} \cdot p^{0.8} \cdot T^{-0.53} \cdot \left(C_{1} \cdot u_{m} + C_{2} \cdot \frac{V_{H} \cdot T_{0}}{p_{0} \cdot V_{0}} (p - p_{geschl.})\right)^{0.8} (A.14)$$

Im Einhubtriebwerk wird während eines Versuches die Oberflächentemperatur nur unwesentlich über die anfängliche Temperatur von 100°C angehoben, we shall diese als konstante Wandtemperatur T_W angenommen wurde. Die mittlere Kolbengeschwindigkeit u_m wurde aus dem jeweiligen Versuch ermittelt, die wärmeübertragende Oberfläche A ergibt sich aus der Geometrie und dem entsprechenden Hubverlauf. Die Konstante C_1 wird für Verdichtungsund Expansionsphase von Woschni zu $C_1 = 2,28 + 0,308 \cdot u_{tang} / u_m$ für reale Motoren empfohlen, wobei die Tangentialgeschwindigkeit der Ladung u_{tang} sowie die mittlere Kolbengeschwindigkeit u_m einfließen. In realen Motoren liegen nach der Aufheizphase die Temperaturen von Kolben, Zylinderkopf und Buchse deutlich höher als im Einhubtriebwerk. Damit sind im Einhubtriebwerk höhere Wärmeverluste zu erwarten, was sich beispielsweise im Unterschied zwischen maximalem Hub und maximalem Brennraumdruck (thermodynamischer Verlustwinkel) im geschleppten Betrieb zeigt, der mit 1°KW...2°KW deutlich höher als im Realmotor (0,3°KW...0,5°KW) ausfällt, siehe hierzu auch [Eis03]. Bei der Auswertung erwies sich deshalb ein Wert von $C_1 = 15$ als sinnvoll. Die weitere Konstante in diesem Ansatz, welche die Drucküberhöhung zwischen befeuertem Maximaldruck p und geschlepptem Maximaldruck p_{geschl} beinhaltet, wurde vernachlässigt: $C_2 = 0$.

Wie erläutert, wurde die Verdampfungsrate bei der Druckverlaufsanalyse modelliert. Die Abweichung zwischen tatsächlicher und modellierter Verdampfungsrate nimmt tendenziell mit zunehmender Wassermenge zu. Auf der anderen Seite zeichnet sich die Abkühlung der Brennraumgase durch das Wasser zwar deutlich im Temperaturverlauf, kaum jedoch im Druckverlauf ab. Dieses Phänomen ist im Zusammenspiel von Temperatur, Dichte und Druck begründet und wird im Abschnitt 6.3.5 anhand von Simulationsergebnissen erläutert. Es ist deshalb zu erwähnen, dass die Genauigkeit der Druckverlaufsanalyse mit zunehmender Wassermenge abnimmt.

A.4 Turbulente Flammengeschwindigkeit

Anhand von theoretisch hergeleiteten bzw. experimentell ermittelten Korrelationen lässt sich die turbulente Flammengeschwindigkeit abschätzen. Hierfür ist zum einen die Kenntnis der laminaren Flammengeschwindigkeit u_l als auch charakteristischer turbulenter Schwankungsbewegungen u' nötig. Die laminare Flammengeschwindigkeit für benzinartige Kraftstoffe wird in mehreren Quellen [Turns/Heywood] als Funktion von Temperatur, Druck und Luftzahl gebildet³:

$$u_l = u_{l,ref} \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{\gamma} \left(\frac{p}{p_{ref}}\right)^{\beta} \qquad \text{[m/s]} \qquad (A.15)$$

mit
$$u_{l,ref} = 0,305 - 0,549 \cdot \left(\frac{1}{\lambda} - 0,826\right)^2 [m/s]$$
 (A.16)

Hiermit ergeben sich für die Bedingungen bei Zündbeginn (T = 700...900K, p = 30...45bar, $\lambda = 0, 5...3$) laminare Flammengeschwindigkeiten im Bereich von $u_l = 0, 1...1, 85$ m/s. Besonders stark schlägt sich in diesen Korrelationen der Einfluss der Luftzahl nieder, wobei sich maximale Flammengeschwindigkeiten bei einer Luftzahl von $\lambda = 0, 83$ ergeben.

Die turbulente Flammengeschwindigkeit u_t lässt sich nun mittels Korrelationen aus der laminaren Flammengeschwindigkeit u_l abschätzen. Turns [Tur00] zitiert Gleichungen nach Damköhler

$$u_t/u_l = (1 + \frac{u'}{u_l}),$$
 (A.17)

nach Clavin und Williams

$$u_t / u_l = \left(0.5 \left[1 + \left(1 + 8 \cdot C \cdot u'^2 / u_l^2 \right)^{0.5} \right] \right)^{0.5},$$
(A.18)

mit der Konstanten $C \approx 1$ und nach Klimov

$$u_t/u_l = 3,5(u'/u_l)^{0,7}.$$
 (A.19)

³In die Gleichung fließt auch noch der Anteil rezyklierter Abgasbestandteile ein, die hier nicht berücksichtigt werden sollen.

Heywood [Hey88] zeigt grafisch auf, dass unter motorischen Bedingungen der Bereich der turbulenten Flammengeschwindigkeit abhängig vom Turbulenzgrad weit streuen kann. Alle Ansätze basieren auf einem Anstieg der turbulenten Flammengeschwindigkeit durch turbulente Geschwindigkeitsfluktuationen. Experimentell wurden in dieser Arbeit keine Messungen von Geschwindigkeiten bzw. Geschwindigkeitsfluktuationen durchgeführt. Um dennoch charakteristische turbulente Flammengeschwindigkeiten abschätzen zu können, soll hierfür ein typischer Wert aus den numerischen Simulationen verwendet werden (siehe Abschnitt 6). Zwischen Einspritzung und Verbrennung betragen diese etwa $u' = 3,5 \text{ m/s} |^4$. Für die oben berechneten laminaren Flammengeschwindigkeiten im Bereich $u_l = 0, 1...1, 85 \text{ m/s}$ ergeben sich damit turbulente Flammengeschwindigkeiten im Bereich von

- $u_{t,Damk\"ohler} = 36...2, 9 \cdot u_l = 3, 6...5, 35 \text{ [m/s]}$
- $u_{t,ClavinWilliams} = 7, 1...1, 8 \cdot u_l = 0, 7...3, 3 \text{ [m/s]}$
- $u_{t,Klimov} = 42...5, 5 \cdot u_l = 4, 2...10, 1 \text{ [m/s]}$
- $u_{t,Heywood} = 30...8, 1 \cdot u_l = 3, 0...15, 0 \text{ [m/s]}$ |⁵

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass sich eine deflagrative Verbrennung in einem turbulenten Feld deutlich schneller als in einem ruhenden ausbreitet. Unter motorischen Verhältnissen und den in dieser Arbeit charakteristischen Geschwindigkeitsfluktuationen von u' = 3,5 m/s liegen turbulente Flammengeschwindigkeiten $u_t \lesssim 15$ m/s vor.

⁴Dieser berechnete Wert korreliert gut mit experimentellen Messwerten mittels Laser Doppler Anemometrie. Christensen [Chr02] bestimmte vor der Verbrennung u' = 2...3 m/s an einem Kolben mit quadratischer Kolbenmulde.

⁵In der Grafik nach Heywood ist zusätzlich das Verhältnis von maximalem Druck im Brennraum bei gefeuertem bzw. geschlepptem Motor berücksichtigt. Zur Abschätzung wurde hierfür ein Wert von 3 gewählt, der etwa einer stöchiometrischen Verbrennung entspricht, siehe Abschnitt 2.3.1.

Name	Dichte	Wassergehalt	kinem. Viskosität	Oberflächen-	Brechungs-
			(40°C)	spannung	index
Symbol	Q	ω	ν	σ	n
Einheit	[kg/m ³]	[-]	$10^{-6} [m^2/s]$	[mN/m]	[-]
Dieselkrst.	830,5 (15°C)	< 0,2%	2,6	26	1,438
Quelle	[Ara05]	DIN EN 590	[Ofn01]	[Ofn01]	[FVT07]
Emulsion	893,3 (25°C)	0,46 (Ω=0,86)	11,2	26,6	-
Quelle	[FVT07]	-	[FVT07]	[FVT07]	-
Wasser	998 (25°C)	1	0,64	69,2	1,333
Quelle	[TD07]	-	[TD07]	[TD07]	[FVT07]

A.5 Stoffdaten Kraftstoff, Wasser und Emulsion

Die Emulsion erscheint milchig-opak, weshalb die Angabe eines Brechungsindex nicht sinnvoll erscheint.

Literaturverzeichnis

- [AFS⁺05] ACEVES, S. ; FLOWERS, D. ; SMITH, J. ; MARTINEZ-FRIAS, J. ; ESPINOSA-LOZA, F. ; ROSS, T. ; BUCHHOLZ, B. ; KILLINGSWORTH, N. ; WESTBROOK, C. ; PITZ, W.: Numerical Modeling of HCCI Combustion. In: SAE International HCCI Symposium, Lund, Schweden, 2005
- [AMFD⁺01] ACEVES, S. ; MARTINEZ-FRIAS, J. ; DIBBLE, R. ; GIRARD, J. ; FLO-WERS, D. ; SMITH, J.R. ; AU, M.: HCCI Combustion: Analysis and Experiments. In: SAE 2001-01-2077 (2001)
- [AMH⁺99] AKAGAWA, H. ; MIYAMOTO, T. ; HARADA, A. ; SASAKI, S. ; SHIMAZA-KI, N. ; HASHIZUME, T. ; TSUJIMURA, K.: Approaches to Solve Problems of the Premixed Lean Diesel Combustion. In: SAE 1999-01-0183 (1999)
- [Ara05] ARAL: Kraftstoffanalyse im Auftrag des Lehrstuhls für Thermodynamik, Aral-Forschung Global Fuel Technolgy Bochum, 2005
- [Bau06] BAUMGARTEN, C.: *Mixture Formation in Internal Combustion En*gines. Springer, 2006
- [Bau07] BAUER, W.: Empirisches Modell zur Bestimmung des dynamischen Strahlkegelwinkels bei Diesel– Einspritzdüsen, Technische Universität München, Diss., 2007
- [Ben98] BENGTSSON, K.: Experimental and Numerical Study of the NOx Formation in High-Pressure Lean Premixed Combustion of Methane, ETH Zürich, Diss., 1998

- [Bir00] BIRKENHAGEN, S.: Untersuchungen zur direkten Reduktionsmittel- und Wassereinspritzung bei mittelschnellaufenden Dieselmotoren, Technische Universität Hamburg-Harburg, Diss., 2000
- [BK07] BRÜCKNER KALB, J.: *Beitrag zur Entwicklung eines für Gasturbinen tauglichen Sub-ppm-NOx-Verbrennungsverfahrens*, Technische Universität München, Diss., 2007
- [BKHM05] BÜCKER, C. ; KREBBER-HORTMANN, K. ; MORI, S.: Bewertung verschiedender Betriebsstrategien für die Kontrollierte Selbstzündung. In: SALBER, W. (Hrsg.) ; LANG, O. (Hrsg.): Kontrollierte Selbstzündung Haus der Technik e.V., 2005
- [BLB03] BERTOLA, A.; LI, R.; BOULOUCHOS, K.: Influence of Water-Diesel Fuel Emulsions and EGR on Combustion and Exhaust Emissions of Heavy Duty DI-Diesel Engines equipped with Common-Rail Injection System. In: SAE 2003-01-3146 (2003)
- [Boc94] BOCKHORN, H.: Soot Formation in Combustion. Springer, 1994
- [Bor01] BORN, C.: Schadstoffreduzierung am DI-Dieselmotor durch Emulsionseinspritzung, RWTH Aachen, Diss., 2001
- [BRD⁺00] BEDFORD, F.; RUTLAND, C.; DITTRICH, P.; RAAB, A.; WIRBELEIT,
 F.: Effects of Direct Water Injection on DI Diesel Engine Combustion. In: SAE 2000-01-2938 (2000)
- [Can] www.cantera.org
- [CCS⁺04] CONNAIRE, M. O.; CURRAN, H J.; SIMMIE, J. M.; PITZ, W. J.; WEST-BROOK, C.K.: A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. In: *International Journal of Chemical Kinetics* 36 (2004), S. 603–622
- [CGPW98] CURRAN, H.J.; GAFFURI, P.; PITZ, W.J.; WESTBROOK, C.K.: A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation. In: Combustion and Flame 114 (1998), S. 149–177

[Chr02]	CHRISTENSEN, M.: HCCI Combustion -Engine Operation and Emission Characteristics, Lund Institute of Technology, Diss., 2002
[CJ99]	CHRISTENSEN, A. ; JOHANSSON, B.: Homogeneous Charge Compression Ignition with Water Injection. In: <i>SAE</i> 1999-01-0182 (1999)
[CJ02]	CHRISTENSEN, M ; JOHANSSON, B.: The Effect of In-Cylinder Flow and Turbulence on HCCI Operation. In: <i>SAE</i> 2002-01-2864 (2002)
[Dec05]	DEC, J.: Understanding HCCI Charge Stratification using Optical, Conventional and Computational Diagnostics. In: <i>SAE Interna-</i> <i>tional HCCI Symposium, Lund, Schweden</i> , 2005
[DHS06]	DEC, J. ; HWANG, W. ; SJÖBERG, M.: An Investigation of Thermal Stratification in HCCI Engines Using Chemiluminescence Imaging. In: <i>SAE</i> 2006-01-1518 (2006)
[Dor00]	DORER, F.S.: Kompressionsmaschine zur Simulation von Brenn- raumvorgängen in Wasserstoff-Großdieselmotoren, Technische Universität München, Diss., 2000
[Eis03]	EISEN, SM.: Visualisierung der dieselmotorischen Verbrennung in einer schnellen Kompressionsmaschine, Technische Universität München, Diss., 2003
[EOM01]	EISEN, S. ; OFNER, B. ; MAYINGER, F.: Schnelle Kompressionsma- schine - eine Alternative zum Transparentmotor. In: <i>MTZ Motor-</i> <i>technische Zeitschrift</i> 09/2001 (2001)
[Fat97]	FATH, A.: Charakterisierung des Strahlaufbruch-Prozesses bei der instationären Druckzerstäubung, Universität Erlangen- Nürnberg, Diss., 1997
[Flu05]	Fluent User Guide, Version 6.2. 2005
[FP97]	FERZIGER, J. H.; PERIC, M.: Computational methods for fluid dy- namics. Springer, 1997

- [FVT04] FVT: Vorlesungsbegleitende Unterlagen Wärme- und Stoffübertragung, Teil: Stoffübertragung. Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik, WS 2003/2004
- [FVT07] FVT: Kraftstoffanalyse im Auftrag des Lehrstuhls für Thermodynamik, Lehrstuhl für Fluidverfahrenstechnik, Technische Universität München, 2007
- [GHK⁺62] GROSSE, L. ; HENNING, F. ; KIRSCHBAUM, E. ; REITZ, O. ; SCHU-MACHER, R.: *Arbeitsmappe für Mineralölingenieure*. VDI-Verlag, 1962
- [Gül22] GÜLDNER, H.: Das Entwerfen und Berechnen der Verbrennungskraftmaschinen und Kraftgas-Anlagen. Springer, 1922
- [Gla87] GLASSMAN, I.: Combustion. Academic Press, 1987
- [GR97] GRAY, I.; RYAN, T.W.: HCCI of Diesel Fuel. In: *SAE* 971676 (1997)
- [Grü07] GRÜNWALD, J.: Verbesserung der Reduktionsmitteldispersion und -verdunstung in SCR-Abgasanlagen, Technische Universität München, Diss., 2007
- [GW02] GRIFFITHS, J.F. ; WHITAKER, B.J.: Thermokinetic Interactions Leading to Knock During Homogeneous Charge Compression Ignition. In: *Combustion and Flame* 131 (2002), S. 386–399
- [HA90] HIROYASU, H.; ARAI, M.: Structures of Fuel Sprays in Diesel Engines. In: *SAE* 900475 (1990)
- [Har83] HARRINGTON, J.A.: Water Addition to Gasoline- Effect on Combution, Emissions, Performance, and Knock. In: *SAE* 820314 (1983)
- [HCJ⁺99] HULTQVIST, A.; CHRISTENSEN, M.; JOHANSSON, B.; FRANKE, A.; RICHTER, M.; ALDÉN, M.: A Study of the Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion Process by Chemiluminescence Imaging. In: SAE (1999), Nr. 1999-01-3680

- [HCJ⁺02] HULTQVIST, A. ; CHRISTENSEN, M. ; JOHANSSON, B. ; NYGREN, J. ; RICHTER, M. ; HULT, J. ; ALDÉN, M.: The HCCI Combustion Process in a Single Cycle-High Speed Fuel Tracer LIF and Chemiluminescence Imaging. In: SAE 2002-01-0424 (2002)
- [Hey88] HEYWOOD, J.B.: Internal Combustion Engine Fundamentals. McGraw-Hill, 1988
- [Hop13] HOPKINSON, B.: A new method of cooling gas-engines. In: *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers* 85 (1913), S. 679–715
- [HS52] HAAGEN-SMIT, A.J.: Chemistry and Physiology of Los Angeles Smog. In: *Industrial and engineering chemistry* 44 (1952), S. 1342– 1346
- [Hul02] HULTQVIST, A.: Characterization of the Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion Process, Lund Institute of Technology, Diss., 2002
- [IKST99] IWABUCHI, Y.; KAWAI, K.I.; SHOJI, T.; TAKEDA, Y.: Trial of New Concept Diesel Combustion System - Premixed Compression-Ignited Combustion. In: SAE (1999), Nr. 1999-01-0185
- [JDA00] JORACH, R. ; DOPPLER, H. ; ALTMANN, O.: Schweröl-Common-Rail-Einspritzsysteme für Großmotoren. In: *MTZ Motortechnische Zeitschrift* 12 (2000), S. 854–861
- [KAO⁺99] KIMURA, S.; AOKI, O.; OGAWA, H.; MURANAKA, S.; ENOMOTO, Y.: New Combustion Concept for Ultra-Clean and High-Efficiency small DI Diesel Engines. In: SAE (1999), Nr. 1999-01-3681
- [KAOM02] KANEKO, N.; ANDO, H.; OGAWA, H.; MIYAMOTO, N.: Expansion of the Operating Range with In-Cylinder Water Injection in a Premixed Charge Compression Ignition Engine. In: SAE 2002-01-1743 (2002)

[KJ07] KNUDSEN, T.; JENSEN, F.: Erfolgreiche Bekämpfung der Emissionen am Zweitakt-Schiffsdieselmotor. In: MTZ Motortechnische Zeitschrift Sonderbeilage 50 Jahre FVV (2007) [KW03] KULL, E.; WINKLHOFER, E.: Einfluss der Geometrie eines Spritzlochmodelles auf Kavitation und Massenstrom. In: Berichte zur Energie- und Verfahrenstechnik 3.1 (2003) [LHGD06] LI, L.; HU, Z.; GAO, G.; DONG, G.: Homogeneous Charge Preparation of Diesel Fuel by Spray Impingement onto a Hot Surface at Intake Manifold. In: SAE 2006-01-3322 (2006) $[LJW^+05]$ LOCH, A.; JELITTO, C.; WILLAND, J.; GERINGER, B.; WEIKL, M.; BEYRAU, F.; LEIPERTZ, A.: Einfluss von Ladungstemperatur und AGR-Rate auf die Kompressionszündung in einem Ottomotor. In: SALBER, W. (Hrsg.); LANG, O. (Hrsg.): Kontrollierte Selbstzündung Haus der Technik e.V., 2005 [LM]LE MESURER, H.: Improvements in the Construction and Method of Working Internal Combustion Engines, Patent GB239896A [LMR75] LESTZ, S.; MELTON, R.; RAMBIE, E.: Feasibility of Cooling Diesel Engines by Introducing Water into the Combustion Chamber. In: SAE 750129 (1975) [LSZ97] LAGALY, G.; SCHULZ, O.; ZIMEHL, R.: Dispersionen und Emulsionen. Steinkopff Verlag Darmstadt, 1997 [LV03] LUNDIN, A.; VRESSNER, A.: Pressure Oscillations during Rapid HCCI Combustion. In: SAE 2003-01-3217 (2003) [Mat04] MATHIOUDAKIS, K.: Gas Turbine Test Parameters Corrections Including Operation With Water Injection. In: Transactions of the ASME 126 (2004), S. 334-341 MAROTEAUX, F.; NOEL, L.: Development of a reduced n-heptane [MN06] oxidation mechanism for HCCI combustion modeling. In: Combustion and Flame 146 (2006), S. 246-267

- [MR01] MÜLLER, E. ; RAATZ, T.: Nanopartikelemission bei homogener Dieselverbrennung. In: *Berichte zur Energie- und Verfahrenstechnik* 2001.1 (2001), S. 133–144
- [MRD⁺02] MATHEAUS, A. ; RYAN, T. ; DALY, D. ; LANGER, D. ; MUSCULUS, M.: Effects of PuriNOx Water-Diesel Fuel Emulsions on Emissions and Fuel Economy in a Heavy-Duty Diesel Engine. In: SAE 2002-01-2891 (2002)
- [MS99] MERKER, B.P.; STIESCH, G.: *Technische Verbrennung Motorische Verbrennung*. B.G.Teubner, 1999
- [Nat] National Institute of Standards and Technology (NIST): http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/
- [NF83] NAJT, P.M. ; FOSTER, D.E.: Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion. In: *SAE* (1983), Nr. 830264
- [NS96] NABER, J. ; SIEBERS, D.: Effects of Gas Density and Vaporization on Penetration and Dispersion of Diesel Sprays. In: *SAE* 960034 (1996)
- [Ofn01] OFNER, B.: Dieselmotorische Kraftstoffzerstäubung und Gemischbildung mit Common-Rail Einspritzsystemen, Technische Universtät München, Diss., 2001
- [OJS⁺79] ONISHI, S. ; JO, S.H. ; SHODA, K. ; JO, P.D. ; KATO, S.: Active Thermo-Atmosphere Combustion (ATAC) - A New Combustion Process for Internal Combustion Engines. In: *SAE* 790501 (1979)
- [OSKI99] ODAKA, M. ; SUZUKI, H. ; KOIKE, N. ; ISHII, H.: Search of Optimizing Control Method of Homogeneous Charge Diesel Combustion. In: SAE (1999), Nr. 1999-01-0184
- [Pea06] PEAL, S.: persönliche Kommunikation. Lubrizol Ltd., 2006
- [PHP00] PARK, J. W.; HUH, K. Y.; PARK, K. H.: Experimental study on the combustion characteristics of emulsified diesel in a rapid compression and expansion machine. In: *Proceedings of the Institu-*

tion of mechanical engineers, Journal of automobile engineering (2000)

- [PK05] POLIFKE, W. ; KOPITZ, J.: *Wärmeübertragung*. Pearson Studium, 2005
- [Pös06] Pöschl, M.: Einfluss von Temperaturinhomogenitäten auf den Reaktionsablauf bei der klopfenden Verbrennung, Technische Universität München, Diss., 2006
- [RB79] REITZ, R.; BRACCO, F.: On the Dependence of Spray Angle and Other Spray Parameters on Nozzle Design and Operating Conditions. In: SAE 790494 (1979)
- [RC96] RYAN, T.W. ; CALLAHAN, T.J.: Homogeneous Charge Compression Ignition of Diesel Fuel. In: *SAE* (1996), Nr. 961160
- [RD87] REITZ, R.D.; DIWAKAR, R.: Structure of High-Pressure Fuel Sprays. In: SAE 870598 (1987)
- [REF⁺00] RICHTER, M.; ENGSTRÖM, J.; FRANKE, A.; ALDÉN, M.; HULTQVIST,
 A.; JOHANSSON, B.: The Influence of Charge Inhomogeneity on the HCCI combustion process. In: SAE (2000), Nr. 2000-01-2868
- [RLH02] RIOM, E. ; LARSSON, L.O. ; HAGSTRÖM, U.: Verminderung des NOx-Ausstoßes von Dieselmotoren mit dem Humid Air Motor-Prinzip. In: *MTZ Motortechnische Zeitschrift* 5 (2002), S. 370–377
- [RNC05] ROBERTS, C. ; NAEGELI, D. ; CHADWELL, C.: The Effect of Water on Soot Formation Chemistry. In: *SAE* 2005-01-3850 (2005)
- [Sat03] SATTELMAYER, T.: Grundlagen der Verbrennung in stationären Gasturbinen. In: *Stationäre Gasturbinen, Lechner, C. (Hrsg.), Seume, J.(Hrsg.)* (2003), S. 385–445
- [Sch51] SCHMIDT, F.: Verbrennungskraftmaschinen. Oldenbourg, 1951
- [Sch03] SCHLOZ, E.: Untersuchungen zur homogenen Dieselverbrennung bei innerer Gemischbildung, Universität Karlsruhe, Diss., 2003

[SCW95] SHENG, H.; CHEN, L.; WU, C.: The Droplet Group Micro-Explosions in W/O Diesel Fuel Emulsion Sprays. In: SAE 950855 (1995)[SD06] SJÖBERG, M.; DEC, J.: Smoothing HCCI Heat-Release Rates Using Partial Fuel Stratification with Two-Stage Ignition Fuels. In: SAE 2006-01-0629 (2006) $[SGF^+]$ SMITH, G.; GOLDEN, D.; FRENKLACH, M.; MORIARTY, N.; EITENEER, B.; GOLDENBERG, M.; BOWMAN, C.T.; HANSON, R.; SONG, S.; GARDINER, W.; LISSIANSKI, V.; QIN, Z.: www.me.berkeley.edu/gri_mech/ SIRIGNANO, W.: Fluid dynamics and transport of droplets and [Sir00] sprays. Cambridge University Press, 2000 [SKB⁺03] SCHWARZ, V.; KÖNIG, G.; BLESSING, M.; KRÜGER, C.; MICHELS, U.: Einfluß von Strömungs- und Kavitationsvorgängen in Dieseleinspritzdüsen auf Strahlausbreitung, Gemischbildung, Verbrennung und Schadstoffbildung bei HD-Dieselmotoren. In: Berichte *zur Energie- und Verfahrenstechnik* 3.1 (2003) [SS05a] STEINHILBER, T. ; SATTELMAYER, T.: Vorgemischte Dieselverbrennung mit Wassereinspritzung im Hinblick auf Wärmefreisetzungsrate und Emissionen. In: SALBER, W. (Hrsg.) ; LANG, O. (Hrsg.): Kontrollierte Selbstzündung. 2005, S. 155–169 [SS05b] STEINHILBER, T.; SATTELMAYER, T.: Vorgemischte Dieselverbrennung mit Wassereinspritzung zur Steuerung von Brennbeginn und Wärmefreisetzung. In: Berichte zur Energie- und Verfahrenstechnik 5.1 (2005), S. 175–186 [SS06] STEINHILBER, T.; SATTELMAYER, T.: The Effect of Water Addition on HCCI Diesel Combustion. In: SAE 2006-01-3321 (2006) [SSK92] STOCKINGER, M.; SCHÄPERTÖNS, H.; KUHLMAN, P.: Versuche an einem gemischansaugenden Verbrennungsmotor mit Selbstzündung. In: MTZ Motortechnische Zeitschrift 53 (1992), Nr. 2000-01-2868, S. 80-85

- [SSM05] SCHIESSL, R. ; SCHUBERT, A. ; MAAS, U.: Numerische Simulation zur Regelung der Selbstzündung in CAI Motoren. In: SALBER, W. (Hrsg.) ; LANG, O. (Hrsg.): *Kontrollierte Selbstzündung* Haus der Technik e.V., 2005
- [STA04a] CD-Adapco, Star-CD Methodology, Version 3.26. 2004
- [STA04b] CD-Adapco, Star-CD User Guide, Version 3.26. 2004
- [TAKH03] TANAKA, S.; AYALA, F.; KECK, J.C.; HEYWOOD, J.B.: Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives. In: *Combustion and Flame* 132 (2003), S. 219–239
- [TD07] TD: Arbeitsunterlagen zur Vorlesung Wärme- und Stoffübertragung. Lehrstuhl für Thermodynamik, Technische Universität München, 2007
- [Tee52] TEEGEN, H.: Gemischverdichtende Zweitakt-Verbrennungskraftmaschine mit einstellbarer Kompression und Selbstzündung, Deutsches Patent Nr. 864476. Deutsches Patentamt, 1952
- [Thr89] THRING, R.H.: Homogeneous-Charge Compression-Ignition (HCCI) Engines. In: *SAE* 892068 (1989)
- [TK96] TAKEDA, Y. ; KEIICHI, N.: Emission Characteristics of Premixed Lean Diesel Combustion with Extreme Early Staged Fuel Injection. In: *SAE* (1996), Nr. 961163
- [TL72] TENNEKES, H. ; LUMLEY, J.L.: *A First Course in Turbulence*. Cambridge (Mass.), USA : MIT-Press, 1972
- [Tur00] TURNS, S.R.: An Introduction to Combustion. McGraw-Hill, 2000
- [Url89] URLAUB, A.: Verbrennungsmotoren Band 2: Verfahrenstheorie. Springer, 1989
- [VWWS05] VELJI, A. ; WAGNER, U. ; WIEMER, S. ; SPICHER, U.: An Experimental Study to Assess the Potential of HCCI Combustion with
Various Fuels for Light Duty Diesel Engines. In: *SAE International HCCI Symposium, Lund, Schweden,* 2005

- [Wac04] WACHTMEISTER, G.: persönliche Kommunikation, 2004
- [WM03] WHITE, A.J.; MEACOCK, A.J.: An Evaluation of the Effects of Water Injection on Compressor Performance. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2003* GT2003-38237 (2003)
- [WMD01] WARNATZ, J. ; MAAS, U. ; DIBBLE, R.W.: Verbrennung. Springer, 2001
- [Wos70] WOSCHNI, G.: Die Berechnung der Wandwärmeverluste und der thermischen Belastung der Bauteile von Dieselmotoren. In: *MTZ Motortechnische Zeitschrift* 12 (1970)
- [WRK⁺05] WEBERBAUER, F. ; RAUSCHER, M. ; KULZER, A. ; KNOPF, M. ; BAR-GENDE, M.: Allgemein gültige Verlustteilung für neue Brennverfahren. In: *MTZ Motortechnische Zeitschrift* 2 (2005), S. 120–124
- [WRO⁺05] WEBERBAUER, F. ; RAUSCHER, M. ; ORLANDINI, I. ; KULZER, A. ; KOPP, C.: Weiterentwicklung und thermodynamische Bewertung von Diesel-HCCI-Brennverfahren. In: Berichte zur Energie- und Verfahrenstechnik 5.1 (2005), S. 135–147
- [Zel80] ZEL´DOVICH, Y.B.: Regime Classification of an Exothermic Reaction with Nonuniform Initial Conditions. In: Combustion and Flame 39 (1980), S. 211–214
- [ZLMS70] ZEL'DOVICH, Y.B. ; LIBROVICH, V.B. ; MAKHVILADZE, G.M. ; SI-VASHINSKY, G.I.: On the Development of Detonation in a Non-Uniformly Preheated Gas. In: Astronautica Acta 15 (1970), S. 313– 321