



# BRENNSTOFFE FÜR HOMOGENE SELBST-GEZÜNDETE VERBRENNUNGSPROZESSE

## Jahresbericht 2006

Autor und Koautoren	A. Escher, Prof. Dr. K. Boulouchos
beauftragte Institution	Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme
Adresse	LAV, Sonneggstrasse 3, ETH Zentrum, 8092 Zürich
Telefon, E-mail, Internetadresse	+41 44 632 26 50, <a href="mailto:escher@lav.mavt.ethz.ch">escher@lav.mavt.ethz.ch</a> , <a href="http://www.lav.ethz.ch">www.lav.ethz.ch</a>
BFE Projekt-/Vertrag-Nummer	101514
BFE-Projektleiter	Alfons Hintermann / Fabrice Rognon
Dauer des Projekts (von – bis)	1. November 2005 - 31. Dezember 2008
Datum	8. Dezember 2006

### ZUSAMMENFASSUNG

Die vorliegende Arbeit stellt neue Ansätze zur Simulation homogener kompressionsgezündeter Brennverfahren sowie experimentelle Ergebnisse zu den Grundlagen der Selbstzündung von n-Butan und n-Heptan in einem optisch zugänglichen Einhubtriebwerk (EHT) vor. Die Arbeit hat folglich einen rechnerischen sowie einen experimentellen Teil. Eine Kernaufgabe der Simulation ist die Reduktion von detaillierten zu skelettartigen Reaktionsmechanismen. Die Mechanismen weisen eine hervorragende Übereinstimmung mit der detaillierten Chemie in einem breiten Bereich von  $\lambda$  und  $\varepsilon$  auf. Im weiteren wurden die Mechanismen für verschiedene Kraftstoffqualitäten (Cetanzahlen) optimiert. Diese Arbeit stellt zwei Ansätze für die Simulation der Verbrennung vor. Das erste Modell ist ein stochastisches Mehrzonenmodell. Es berücksichtigt die Existenz verschiedener Zonen im Brennraum, die eine stochastische Initialisierung der Temperatur und des Luftkraftstoffverhältnisses um einen Mittelwert aufweisen. Das Modell zeigte eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment innerhalb der Messunsicherheiten. Das zweite in dieser Arbeit präsentierte Konzept ist ein dreidimensionales strömungsmechanisches Modell, gekoppelt mit reduzierter Reaktionskinetik und einem CMC-Ansatz für die Schliessung der Interaktion zwischen Turbulenz und Chemie. Das Modell zeigte eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment und hat sich z.B. als fähig erwiesen, auch die grosse Sensitivität der Verbrennung auf kleinste Änderungen der AGR, wenn sehr hohe AGR-Raten verwendet werden, wiederzugeben.

Im experimentellen Teil der Arbeit wurden unter definierten Zuständen ( $\lambda$ ,  $p$ ,  $T$ , AGR) die thermodynamischen Zustände im Brennraum bei Zündung sowie die Lokalität der Zündung für die Kraftstoffe n-Butan, n-Heptan sowie kombinierte Einspritzungen von n-Butan und Diesel untersucht. Von speziellem Interesse war die Lage sowie die Beeinflussung der sog. Tieftemperatur Reaktion (LTR) und Hochtemperatur Reaktion (HTR) in Abhängigkeit von diversen Betriebsparametern. Die Grundlagenuntersuchungen der homogenen Kompressionszündung wurden an einem sehr flexiblen und optisch gut zugänglichen Einhubtriebwerk durchgeführt. Der Vergleich zwischen Experiment und den innerhalb des numerischen Teils der Arbeit entwickelten Reaktionsmechanismen für n-Butan zeigten eine gute Übereinstimmung. Mit den Resultaten sind bessere Aussagen zur Selbstzündung von homogenen Gemischen in motorischen Anwendungen in Abhängigkeit von verschiedenen Betriebsparametern möglich, insbesondere im Hinblick auf die Validierung von Simulationsalgorithmen. Darüber hinaus haben die Messungen und die Berechnungen einen wesentlichen Beitrag zum vertieften Verständnis der Grundlagen der motorischen HCCI-Verbrennung geleistet.

## Inhaltsverzeichnis

	Projektkontext	1
1.	Ausgangslage	1
2.	Ziel der Arbeit	2
3.	Ergebnisse, Reduktion von Reaktionsmechanismen	2
4.	Simulation der Zündung und Energieumsetzung in Motoren mit HCCI Brennverfahren mit Reaktornetzwerken	6
5.	3D-CFD Simulation des homogenen Brennverfahrens	9
6.	Versuchsaufbau – Einhubtriebwerk	13
7.	Ergebnisse in homogenem, teilhomogenem und dual-fuel Betrieb	14
8.	Diskussion	25
9.	Schlussfolgerungen	25

## Projektkontext

Der erfolgreiche Abschluss im März 2006 des Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) Cluster Projektes Nr. 811 „Theoretische und experimentelle Untersuchungen der homogenen Dieselerbrennung“, welches auch vom BFE unterstützt wurde (BFE Projekt 40070, Verfügung Nr. 79887), setzte einen Grundstein für weitere Forschungsarbeiten an der ETH im Bereich der homogenen, selbstgezündeten Verbrennungsprozesse. Im Clusterprojekt waren neben der ETH Zürich die Universität Stuttgart (Teilprojekt TP1), die Universität Braunschweig (Teilprojekt TP2) sowie die Fachhochschule HTW Dresden (Teilprojekt TP3) beteiligt. Der Abschlussbericht im Heft R 535 (2006) der FVV wurde im Rahmen der Informationstagung Motoren / Turbomaschinen in Würzburg im September 2006 vorgestellt. Die abgeschlossenen Arbeiten bilden nicht nur eine sehr gute Ausgangslage für eine optimale und effiziente Weiterführung der im Jahr 2007 beginnenden Folgeprojekte, sondern zeigen durch den Zuspruch der Fortsetzung am Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme (LAV) der ETH Zürich eine grosse Wertschätzung der Forschungsarbeiten. Das BFE beteiligt sich im Rahmen des hier berichteten Projektes finanziell am hauptsächlich von der FVV getragenen Clusterprojekt „Kraftstoffkennzahlen für homogene Dieselerbrennung“. Die FVV hat darüber hinaus das Projekt „Future Fuels for Diesel – Ignition and Combustion Fundamentals“ am LAV bewilligt, welches zeitgleich mit dem Projekt „Kraftstoffkennzahlen“ im Jahr 2007 starten soll.

## 1. Ausgangslage

Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der selbstgezündeten, im Idealfall homogenen Dieselerbrennung stehen im Zentrum des Interesses der motorischen Brennverfahrensentwicklung seit mindestens 10 Jahren, dies abgesehen von älteren vereinzelt Versuchen, ein solches System zu realisieren.

Dem Potential nach Reduktion der Stickoxid- und Russpartikelemissionen bis gegen null stehen Herausforderungen gegenüber, welche mit der typischerweise äusserst schnellen Energieumsetzung und dem damit einhergehenden Lärm, aber auch mit der Schwierigkeit, den Verbrennungsbeginn – in Abwesenheit von externer Zündung bzw. später Kraftstoffeinspritzung – im ganzen Kennfeldbereich kontrollieren zu können. Insbesondere bei höheren Lasten – und eher bei niedrigen Drehzahlen – kommt die Selbstzündung üblicherweise zu früh mit schwerwiegenden Konsequenzen für Spitzendruck, thermodynamischen Wirkungsgrad usw. Zusätzliche Schwierigkeiten ergeben sich aus dem instationären Betrieb für den Fahrzeugantrieb und den von Zylinder-zu-Zylinder streuenden thermischen bzw. thermochemischen Daten ( $T$ ,  $\lambda$ , AGR).

Nebst umfangreichen Arbeiten bei der Brennverfahrensentwicklung sind grundlegende Untersuchungen betreffend die detaillierte Reaktionskinetik verschiedener Komponenten von üblichen Kraftstoffen getätigt worden. Auch dadurch konnte der Einfluss höherer Mengen von Abgasrückführung im mittleren Lastbereich geklärt und einige Gesetzmässigkeiten der von der Temperatur exponentiell abhängigen Reaktionskinetik als begrenzende Faktoren für die Erweiterung des HCCI-Systems hin zu höheren Lasten erkannt werden. Um die Realisierbarkeit des HCCI-Konzeptes in einem möglichst breiten Bereich des Dieselmotorkennfeldes zu ermöglichen, sind sogar verschiedene Kombinationen von einzelnen Ölfraktionen mit stark unterschiedlichen Zündeigenschaften, jeweils für einzelne Last- / Drehzahlbereiche vorgeschlagen worden. Die Praxistauglichkeit solcher Systeme ist natürlich äusserst gering. In den letzten Jahren wurden Systeme zumindest in der Entwicklung dargestellt, welche eine Kombination von einem HCCI-Betrieb im Niedriglast- und einem herkömmlichen Diffusionsverbrennungsbetrieb im Hochlastbereich vorsehen. Die Schwierigkeit, ein einzelnes Einspritzsystem auf die Anforderungen beider Modii abzustimmen, ist dabei offensichtlich.

Auf der Simulationsseite führte die Schwierigkeit, detaillierte Reaktionsmechanismen – die ja für die Selbstzündung sehr wichtig sind – mit CFD-Codes zu koppeln, zu Mehrzonenansätzen, die stochastisch formuliert sind und sehr vereinfacht miteinander interagieren, dafür jeweils die komplexe Chemie in einzelne Reaktoren abbilden können.

Optische Messtechniken wurden in entsprechend zugänglichen Motorbrennräumen ebenfalls demonstriert; die Verbindung mit realistischen thermodynamischen Randbedingungen des Motorbetriebes und mit den entsprechenden Simulationsmethoden in genügender Tiefe war jedoch nicht immer gegeben.

## 2. Ziel der Arbeit

Für die zukünftige Gestaltung von emissionsarmen und umwandlungseffizienten HCCI-Systemen ist die gezielte Abstimmung der Kraftstoffeigenschaften mit den Anforderungen des Motorbetriebs in der jeweiligen Anwendung von grosser Bedeutung. Dabei liegt der Schwerpunkt auf realisierbaren Mehrkomponentenkraftstoffen – und zwar entweder auf herkömmlichen oder solchen, die im Sinne eines „designer-fuel“ entsprechend konfiguriert werden können. Es ist gleichzeitig festzuhalten, dass die Cetan-Zahl bzw. der Cetan-Index für die Anforderungen des HCCI-Verbrennungsmodus möglicherweise nicht mehr geeignet und die entsprechenden Prüfverfahren veraltet sind, womit die Aussagekraft dieser Kennzahlen für die hier vorgesehene Anwendung nicht gegeben ist.

Die Herleitung aussagekräftiger Kennzahlen für das Selbstzündverhalten einer geeignet definierten Kraftstoffmatrix und für von zukünftigen Brennverfahren vorgegebene thermochemische Randbedingungen, ist das wesentliche Ziel des Vorhabens. Für die erfolgreiche Bewältigung der Aufgabe wird eine systematische Vorgehensweise entlang einer Prozesskette definiert. Diese reicht von Stosswellenrohrexperimenten für die Bestimmung des Selbstzündverhaltens unter perfekt homogenen Bedingungen bei einer „infinitesimal“ schnellen Verdichtung über die Herleitung einer reduzierten, weitgehend phänomenologischen Kinetik und deren Validierung für motornahe Bedingungen an einem flexibel und optisch möglichst zugänglichen Einhubtriebwerk (EHT) bis zu motorischen Versuchen an je einem PKW- und LKW-Einzylindermotor. Wichtig dabei ist, dass die relevanten Betriebsparameter von den Anforderungen des Motors her definiert werden und die Schnittstellen der einzelnen Module der Prozesskette effizient gestaltet sind.

## 3. Ergebnisse, Reduktion von Reaktionsmechanismen

Im Schlussbericht 2005 vom BFE Projekt „Erarbeitung von Grundlagen für innovative Brennverfahren und motorische Arbeitsprozesse“ wurden die Startmechanismen validiert und die Reduktionsmethoden vorgestellt. Der gewählte detaillierte Startmechanismus für n-Heptan war derjenige von Hewson von der Universität in San Diego, CA. und besitzt 67 Spezies und 285 Reaktionen [1]. Der n-Butan Mechanismus ist ein Submechanismus des von Curran et al. am Lawrence Livermore National Laboratory entwickelten Iso-Oktan Mechanismus und besteht aus 385 Spezies und 1895 Reaktionen [2]. Beide Mechanismen hatten sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Zündverzügen. Die gewählten Reduktionsmethoden waren die Reaktionspfadanalyse [3] und die Wärmefreisetzungsanalyse der individuellen Reaktionen. Die Analysen erfolgten unter mageren HCCI relevanten Bedingungen [s.

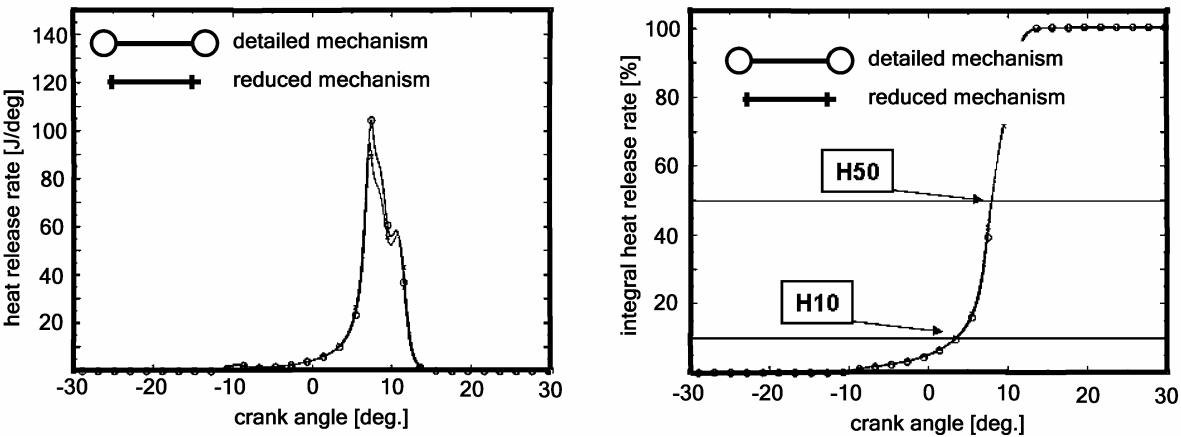
Tabelle 1]. Die Bedingungen wurden so gewählt, dass sie einem typischen Wert der homogenen experimentellen Untersuchungen mit n-Butan von TP1 (S. Haas, Universität Stuttgart) entsprachen.

$V_{\text{Hub}}$	therm. $\varepsilon$	$\Lambda$	Drehzahl	$p_{\text{Zyl}}$ bei ES	$T_{\text{Zyl}}$ bei ES
537.7 cm <sup>3</sup>	16.6	3.8	1200 U/min	1.38 bar	328 K

Tabelle 1: Randbedingungen für die Wärmefreisetzungs- und Reaktionspfadanalyse für die Initialisierung des homogenen Reaktors

**ERGEBNISSE DER REDUKTION VON REAKTIONSMECHANISMEN MIT WÄRMEFREISETZUNGSANALYSE DER INDIVIDUELLEN REAKTIONEN**

In Figur 1 werden die berechnete Wärmefreisetzungsrate und dessen Integral in einem homogenen Reaktor unter HCCI relevanten Randbedingungen mit detaillierter und skelettartiger Reaktionskinetik verglichen. Die Übereinstimmung ist sehr gut. Figur 2 zeigt die Differenz in Grad Kurbelwinkel zwischen der Rechnung eines homogenen Reaktors mit dem detaillierten Mechanismus und dem skelettartigen Mechanismus für den 10% Wärmeumsatzpunkt (links) und den 50% Wärmeumsatzpunkt (rechts) für das in Tabelle 2 ersichtliche  $\varphi$ -Kennfeld. Die Rechnungen wurden für unterschiedliche Verdichtungsverhältnisse (x-Achse) und unterschiedliche Luftkraftstoffverhältnisse (y-Achse) ausgeführt. Die maximale Abweichung beim 50% Wärmeumsatzpunkt ist -0.5 °KW. Das bedeutet, dass im ungünstigsten Fall der skelettartige Mechanismus 0.5 °KW nach dem detaillierten Mechanismus 50% umgesetzt.

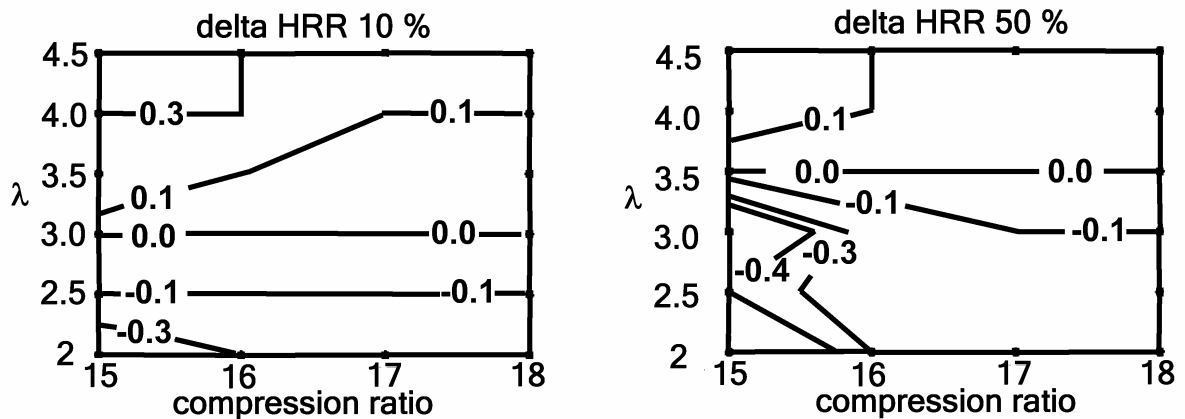


Figur 1: Vergleich der Wärmeentwicklung (links) und der integralen Wärmeentwicklung (rechts) zwischen detaillierter (385 Spezies, 1895 Reaktionen) und skelettartiger (140 Spezies, 453 Reaktionen) n-Butan Chemie in einem homogenen Reaktor unter HCCI relevanten Randbedingungen,  $n = 1200$  U/min,  $\lambda = 3.8$ ,  $\varepsilon = 16.6$ ,  $V_H = 537.7$  cm<sup>3</sup>

$\lambda$ [-]	2	2.5	3	3.5	4	4.5
Verdichtungsverhältnis	15 / 16 / 17 / 18					
Drehzahl [U/min]	1200					

Druck bei IVC [bar]	1.2	1.33	1.39	1.61	1.84	2.07
Brennstoffmasse [mg]	18	16	14	14	14	14
Luftmasse [mg]	542.9	603.2	633.4	738.9	844.5	950.1
Temperatur bei IVC [K]	352	352	352	352	352	352
Restgasanteil [%]	0					

Tabelle 2: Daten für die Betriebspunkte im  $\lambda$ - $\varepsilon$  Fenster. Die Punkte wurden mit Verdichtungsverhältnis 15, 16, 17 und 18 gerechnet

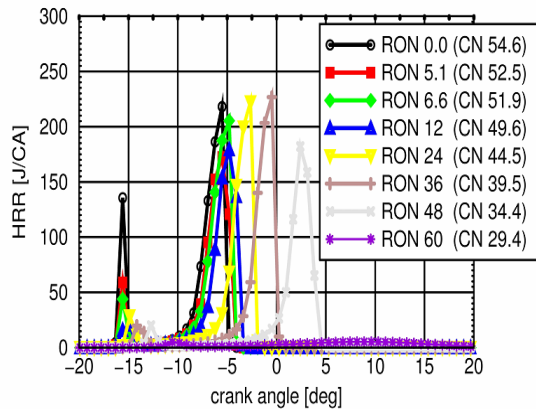


Figur 2: Differenz (°KW) der integralen Wärmeentwicklung beim Erreichen von 10 % (links) bzw. 50% Umsetzung (rechts) zwischen detaillierter (385 Spezies, 1895 Reaktionen) und skelettartiger (140 Spezies, 453 Reaktionen), *n*-Butan Chemie in einem homogenen Reaktor für unterschiedliche  $\lambda$  und  $\varepsilon$ ,  $n = 1200 \text{ U/min}$ ,  $\lambda = 2 \div 4.5$ ,  $\varepsilon = 15 \div 18$ ,  $V_H = 537.7 \text{ cm}^3$

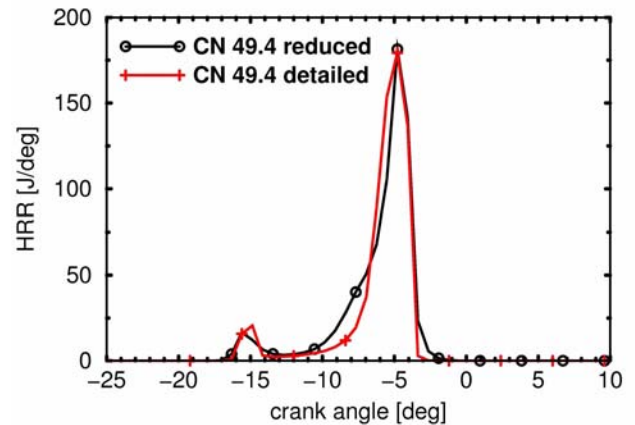
In einem grossen  $\square$  Fenster ist die Übereinstimmung zwischen der detaillierten und der reduzierten *n*-Butan Chemie hervorragend.

## OPTIMIERUNG DES REDUZIERTEN N-HEPTAN MECHANISMUS FÜR UNTERSCHIEDLICHE CETANZAHLEN

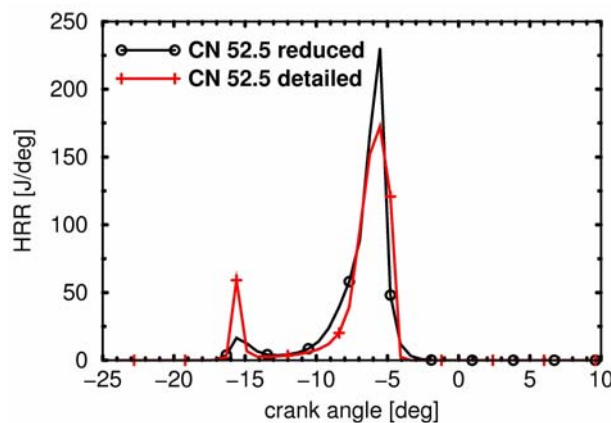
Da sich die Kraftstoffqualitäten verändern können, wurde im Projekt beschlossen der reduzierte *n*-Heptan Mechanismus für unterschiedliche Cetanzahlen zu adaptieren. Mittels einer Sensitivitätsuntersuchung der pre-exponentiellen Faktoren der einzelnen Reaktionen konnten die entscheidenden Reaktionen für die Lage der Verbrennung identifiziert werden. Die unterschiedlichen Cetanzahlen wurden in einem ersten Schritt mit einem PRF-Mechanismus des Lawrence Livermore National Laboratory mit 1034 Spezies und 4236 Reaktionen simuliert [4]. Figur 3 zeigt Berechnungen mit diesem PRF-Mechanismus für unterschiedliche Cetanzahlen.



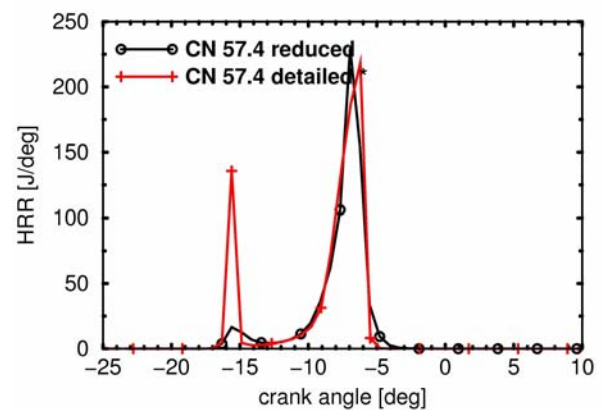
Figur 3: Wärmefreisetzung für homogene Selbstzündung für unterschiedliche Cetan-zahlen (Randbedingungen siehe Tabelle 1)



Figur 4: Wärmefreisetzung des reduzierten und detaillierten Mechanismus für eine Cetanzahl von 49.4



Figur 5: Wärmefreisetzung des reduzierten und detaillierten Mechanismus für eine Cetanzahl von 52.5



Figur 6: Wärmefreisetzung des reduzierten und detaillierten Mechanismus für eine Cetanzahl von 57.4

Wie aus Figur 4, Figur 5 und Figur 6 ersichtlich ist, zeigen die adaptierten reduzierten Mechanismen eine sehr gute Übereinstimmung mit dem detaillierten Mechanismus für unterschiedliche Cetanzahlen. Einzig bei den Cool-Flames ist die Übereinstimmung etwas schlechter bei hohen Cetanzahlen.

## ZUSAMMENFASSUNG REAKTIONSKINETIK

Anhand von Wärmefreisetzungsanalyse der einzelnen Reaktionen und der Reaktionspfadanalyse konnte jeweils ein validierter Startmechanismus für n-Butan (385 Spezies, 1895 Reaktion) respektive einer für n-Heptan (67 Spezies, 285 Reaktionen) erfolgreich auf skelettartige Mechanismen reduziert werden. Für n-Butan wurden mehrere reduzierte Mechanismen entwickelt. Die Güte der Mechanismen ist für die betrachteten Fälle ziemlich unabhängig von der Spezieszahl, obwohl, wie zu erwarten ist, ist die Übereinstimmung des reduzierten Mechanismus mit der grössten Spezieszahl am besten. Die skelettartige Mechanismen für n-Butan haben 140 Spezies und 453 Reaktionen, 43 Spezies und 127 Reaktionen und 22 Spezies und 57 Reaktionen. Der reduzierte Mechanismus für n-Heptan hat 24 Spezies und 63 Reaktionen. Mittels dieser Reduktion konnte die Rechenzeit eines homogenen Reaktors verglichen mit der Rechnung mit dem detaillierten Mechanismus für den Fall mit n-Butan als Kraftstoff um ca. einen Faktor 10 (140 Spezies) bis zu einem Faktor 100 (22 Spezies) reduziert werden. Im Falle von n-Heptan wurde die Rechenzeit eines homogenen Reaktors um den Faktor 3 reduziert.

## 4. Simulation der Zündung und Energieumsetzung in Motoren mit HCCI-Brennverfahren mit Reaktornetzwerke

In der Literatur sind unterschiedliche Ansätze für die Modellierung des homogenen Dieselmotors zu finden. Die Modellierungsansätze gehen von einfachen homogenen Reaktoren bis komplexen 3D-CFD Simulationen. In diesem Kapitel wird ein Mehrzonenmodell mit Reaktornetzwerken vorgestellt und mit Ergebnissen der Universität Stuttgart (TP1) validiert.

### METHODOLOGIE DES MEHRZONENMODELLS

Der Ausgangspunkt der Entwicklung ist ein Modell, das einen homogenen Reaktor mit variablem Volumen repräsentiert. Eingangsgrößen dieses Modells sind neben den geometrischen Abmessungen des Brennraums, die Temperatur, der Druck und die Gemischzusammensetzung bei Einlassschliesst. Mit den Gleichungen (Gl. 1), (Gl. 2) und (Gl. 3) wird das Zylindervolumen in Abhängigkeit des Kurbelwinkels berechnet.

$$V(\varphi) = S(\varphi) \cdot \pi \cdot \frac{B^2}{4} + V_c \quad (1)$$

$$S(\varphi) = H \cdot \frac{1}{2} (1 - \cos(\varphi) + \frac{L_s}{4} (1 - \cos^2(\varphi))) \quad (2)$$

$$V_c = \frac{V_{Hub}}{\varepsilon - 1} \quad (3)$$

Für den homogenen Reaktor gilt die Energieerhaltungsgleichung (Gl. 4).

$$\frac{dT}{dt} = \frac{1}{m \cdot c_v} \left( \frac{dQ_B}{dt} - p \frac{dV}{dt} - \frac{dQ_W}{dt} \right) \quad (4)$$

Wobei die Energiezufuhr durch Verbrennung  $dQ_B/dt$  mit detaillierter Chemie berechnet wird.

$$\frac{dQ_B}{dt} = V \cdot \sum_{i=1}^{N_s} \dot{w}_i \cdot M_i \cdot u_i \quad (5)$$

Dazu wurden Chemkin II Subroutinen verwendet und für die Integration des steifen Differentialgleichungssystems den impliziten Integrator DVODE verwendet. Die Wandwärmeverluste werden mit einem Ansatz nach Woschni modelliert (Gl. 6 und Gl. 7).

$$\frac{dQ_W}{dt} = \alpha_w \cdot A_z \cdot (T - T_w) \quad (6)$$

$$\alpha_w = \alpha_{scaling} \cdot 130 \cdot B^{-0.2} \cdot p^{0.8} \cdot T^{-0.53} \cdot (C_1 \cdot c_m + C_2 \cdot \frac{V_H \cdot T_1}{V_1 \cdot p_1} \cdot (p - p_{zs}))^{0.8} \quad (7)$$

Der Parameter  $\alpha_{scaling}$  wurde im Rahmen dieser Arbeit von 0.01 bis 1 variiert. Für die Konstante  $C_1$  wird der Wert  $2.28 + 0.308 \cdot \text{cu/cm}$ . Die Drallzahl  $\text{cu/cm}$  beträgt für den betrachteten Motor 1.23. Für die Konstante  $C_2$  wird der Wert für direkteinspritzende Dieselmotoren gewählt. Den Autoren ist bewusst, dass das von Woschni entwickelte Modell, für das HCCI-Brennverfahren ungeeignet ist. In der Literatur werden adaptierte Versionen des Wandwärmemodells für HCCI Brennverfahren vorgeschlagen. Diese adaptierten Versionen wurde ebenfalls im Rahmen dieser Arbeit untersucht, sie führte jedoch - über viele Betriebspunkte betrachtet - nicht zu besseren Ergebnissen. In der vorliegenden

Arbeit gilt die Modellannahme, dass alle Zonen die gleiche Wahrscheinlichkeit haben die Wand zu berühren und demzufolge werden die Wandwärmeverluste zu Massenanteilen allen Zonen entnommen. Im Modell gilt die ideale Gasgleichung (Gl. 8).

$$p \cdot V = m \cdot R \cdot T \quad (8)$$

Es wird ein stark vereinfachtes Modell für den Feuersteg (FST) eingesetzt. Dazu wird eine neue Zone eingeführt die das Volumen des Feuerstegs repräsentiert. In diesem Volumen wird keine Chemie gerechnet. Der Feuersteg hat ein konstantes Volumen. Die Temperatur wird mit derjenigen der Wand gleichgesetzt, da das sehr kleine Volumen eine grosse gemeinsame Oberfläche mit der Wand hat und somit durch Temperaturdiffusion auf die Wandtemperatur gekühlt bzw. erhitzt wird. Der Druck entspricht dem Zylinderdruck. Die im Feuersteg gefangene Masse ist direkt vom Zylinderdruck abhängig, da die anderen Parameter konstant gehalten werden. Massenänderungen im Feuerstegvolumen werden durch die Zylinderzonen ausgeglichen. Der Ausgleich findet nach Massenanteilen statt.

Das Mehrzonenmodell besteht aus mehreren soeben beschriebenen Reaktoren. Die physikalische Kopplung der Zonen ist durch einen Druckausgleich und eine Volumenarbeit zwischen den Zonen gegeben. Die Zonen werden über die Länge eines Zeitschritts als homogene Reaktoren gerechnet. Danach wird der Zylinderdruck unter Berücksichtigung der Energieerhaltung (Gl. 9) mittels der idealen Gasgleichung berechnet.

$$\bar{c}_v \cdot m_{Zyl} \cdot \bar{T}_{Zyl} = \sum_{j=1}^{N_z} c_{v,j} \cdot m_j \cdot T_j \quad (9)$$

Das Zylindervolumen ist die Summe aller Zonenvolumina. Die Drücke aller Zonen werden nach jedem Zeitschritt mit dem Zylinderdruck gleichgesetzt. Um die Zonenmassen zu erhalten wird Volumenarbeit zwischen den Zonen verrichtet. Die Zonentemperatur bei Einlassschliesst wird stochastisch ermittelt. Es handelt sich dabei um eine Gaussverteilung mit vorgegebenen Standardabweichung und Mittelwert (Gl. 10, Gl. 11).

$$\sigma_T = \sum_{i=1}^{N_z} \sqrt{\frac{m_i \cdot (T_i - \bar{T})^2}{m_{tot}}} \quad (10)$$

$$\bar{T} = \sum_{i=1}^{N_z} \frac{m_i \cdot T_i}{m_{tot}} \quad (11)$$

## MOTORISCHE SIMULATIONEN MIT REAKTORENNETZWERKEN

Für die Validierung der n-Butan Rechnungen stehen motorische Experimente der Universität Stuttgart (TP1) zur Verfügung. In Tabelle 3 sind die technischen Daten des Einzylinder-Versuchsmotors aufgelistet.

Bohrung [mm]	88.0
Hub [mm]	88.4
Hubvolumen [cm <sup>3</sup> ]	537.7
Thermodynamisches Verdichtungsverhältnis [-]	16.6
Verhältnis Kurbelradius zu Pleuel [-]	0.3
Kraftstoff (Saugrohreinblasung)	n-Butan

Tabelle 3: Technische Daten des Einzylinder Versuchsmotors, TP1



In Tabelle 4 sind die Randbedingungen der Experimente aufgelistet, die zur Validierung der Simulation dienen. Die Butanmasse hat eine Messungenauigkeit von  $\pm 5\%$ , diejenige des Druckes bei Einlassschliesst beträgt  $\pm 0.02$  bar und diejenige der Luftmasse  $\pm 2\%$ . Da die Entflammung und Verbrennung beim HCCI-Brennverfahren abhängig von der lokalen Gemischzusammensetzung und dem Temperaturverlauf ist, können diese Abweichungen zu einer schlechteren Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment führen.

Betriebspunkt	1	2	3	4
$\lambda$ [-]	3.8	4.2	5.4	3.1
Drehzahl [U/min]	1200	1200	1200	1200
Druck bei ES [bar]	1.36	1.75	2.25	1.24
Brennstoffmasse [mg]	9.6	11.6	11.7	11.6
Luftmasse [mg]	568	756	974	544
Temperatur bei ES [K]	352	352	352	348
Restgasanteil [%]	8.84	6.04	6.19	5.70

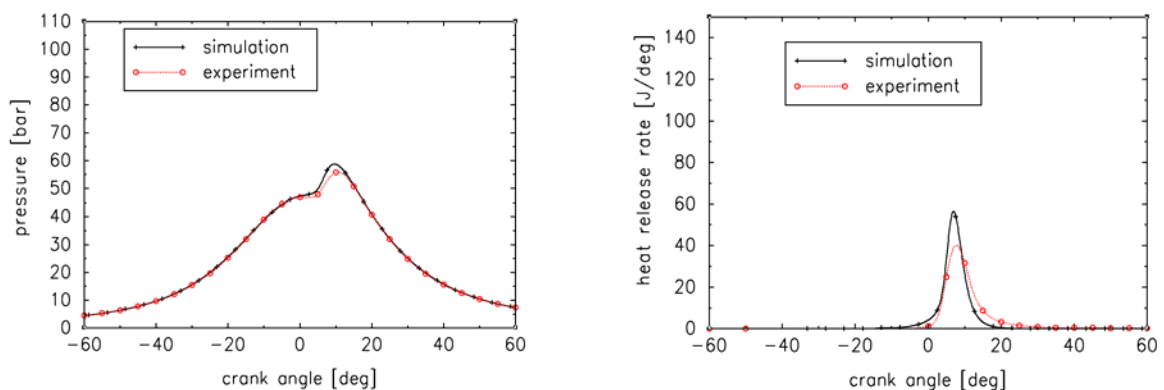
Tabelle 4: Parameter der betrachteten Betriebspunkte

## SENSITIVITÄTSUNTERSUCHUNGEN

Wie bereits erwähnt handelt es sich beim hier vorgestellten Modell um ein stochastisches Modell, welches diverse Parameter besitzt, um das Modell optimal an das Experiment zu adaptieren. Mit Hilfe von Sensitivitätsuntersuchungen wurde der Einfluss des jeweiligen Parameters auf das Ergebnis identifiziert. Alle Sensitivitätsuntersuchungen sind in [5] publiziert worden. Mit der „besten“ Wahl der Parameter wurden die motorischen Experimente der Universität Stuttgart simuliert. Dieses Modell wurde auch für Simulationen am EHT der ETH Zürich verwendet.

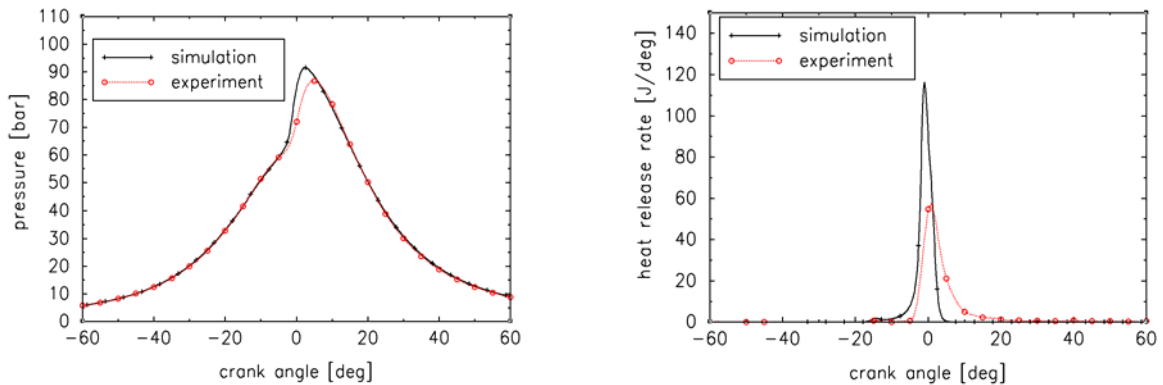
## VALIDIERUNG DER N-BUTAN RECHNUNGEN MIT DEM EXPERIMENT VON TP1

Die aus den Sensitivitätsuntersuchungen gewonnenen Erkenntnisse werden verwendet, um diverse Betriebspunkte des Experimentes nachzurechnen. Es hat sich gezeigt, dass tiefe Standardabweichungen sowohl in der Temperaturverteilung wie auch in der Lambdaverteilung für diese Experimente bessere Übereinstimmung ergaben. Der Skalierungsfaktor für die Wandwärmeverluste wird auf 0.5 gesetzt, da ansonsten zuviel Wärme abgeführt wird und in einzelnen Betriebspunkten keine Verbrennung eingeleitet wird.  $\alpha_{\text{scaling}} = 0.5$  erwies sich als guter Wert für unterschiedliche Betriebspunkte.



Figur 7: Vergleich des berechneten Druckverlaufs (links) bzw. der Wärmefreisetzung (rechts) mit den Messungen für Betriebspunkt 1 ( $n = 1200$  U/min, 20 Temperaturzonen, 10 Lambdazonen,  $\lambda = 3.8$ ,  $\sigma_T = 2.5$  K,  $\sigma_\lambda = 0.05$ , n-Butan, reduz. Mechanismus,  $\alpha_{\text{scaling}} = 0.5$ )

Figur 7 zeigt den Verlauf des Drucks (links) und der Wärmefreisetzung (rechts) für Betriebspunkt 1. Die Wärmefreisetzung beginnt bei der Simulation etwas früher, jedoch mit sehr geringer Intensität. Aus diesem Grunde ist der Druck im OTP leicht höher. Der Maximalwert der Wärmefreisetzung ist in der Simulation leicht höher, was zu einem etwas höheren Druckverlauf führt. Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation ist in diesem Betriebspunkt durchaus vernünftig. Figur 8 zeigt den Verlauf des Drucks (links) und der Wärmefreisetzung (rechts) für Betriebspunkt 2. Die Cool-Flames sind in der Simulation ausgeprägter als im Experiment und der Maximalwert der Wärmefreisetzung ist stärker und dessen Lage 2 °KW früher. Dies führt zu einer früheren Lage des Spitzendrucks und leicht höheren simulierten Druckanstiegen. Die Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation ist auch in diesem Betriebspunkt vernünftig.



Figur 8: Vergleich des berechneten Druckverlaufs (links) bzw. der Wärmefreisetzung (rechts) mit dem Experiment für Betriebspunkt 2 ( $n = 1200$  U/min, 20 Temperaturzonen, 10 Lambdazonen,  $\lambda = 4.2$ ,  $\sigma_T = 2.5$  K,  $\sigma_\lambda = 0.05$ , *n*-Butan, reduz. Mechanismus,  $\alpha_{scaling} = 0.5$ )

## ZUSAMMENFASSUNG MEHRZONENSIMULATION MIT REAKTORNETZWERKEN

Das vorgestellte Modell hat gezeigt, dass es eine vernünftige Übereinstimmung mit dem Experiment im Rahmen der Messungenauigkeit der Anfangs- und Randbedingungen aufweist und folglich für die Analyse von HCCI-Motoren mit äußerer Gemischbildung geeignet ist. Das Modell kann einfach mit Reaktionskinetik anderer Kraftstoffe erweitert werden und ermöglicht somit sinnvolle Parameterstudien.

## 5. 3D-CFD Simulation des homogenen Brennverfahrens

### METHODE DES 3D-CFD MODELLES

Das CMC-Modell und dessen Kopplung mit dem kommerziellen Code StarCD wurde bereits in Arbeiten von Wright [6] und Barroso [5] vorgestellt. An dieser Stelle wird eine kurze Zusammenfassung der wesentlichsten Gleichungen gegeben. Wird detaillierte Chemie mit 3D-CFD verwendet, so müsste eine Erhaltungsgleichung für jede Spezies gelöst werden.

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla Y_i - \nabla \cdot (\rho D_i \nabla Y_i) = \dot{w}_i \quad (12)$$

Der erste Term ist die zeitliche Änderung von Spezies  $Y_i$ , der zweite Term die Konvektion und der dritte Term die Diffusion. Der rechte Term ist die Speziesproduktion infolge chemischer Reaktion. Weil die Turbulenz üblicherweise modelliert und nicht aufgelöst wird, sind die Geschwindigkeit ( $u$ ) und ihre Fluktuation ( $u'$ ) Ensemble gerechnete Werte. Bedingte Momente sind Mittelwert, Varianz etc., die für nur jene Mitglieder des vollständigen Ensembles gelten, die einen spezifizierten Zustand erfüllen. Jetzt betrachten wir den bedingten Mittelwert (einen Mittelwert, weil unsere Berechnung (RANS) nur eine

Ensemble gemittelte Lösung berechnet). Die Varianz der Species  $Y_i$  ist nicht nur von der Position ( $x$ ) und von der Zeit ( $t$ ) abhängig, sondern auch vom Mischungsbruch  $\xi$ . Obwohl eine neue unabhängige Variable eingeführt wurde, kann die Dimensionalität des Problems häufig reduziert werden unter der Annahme, dass nicht der Ort sondern der Mischungsbruch an diesem Ort entscheidend ist. Der bedingte Erwartungswert oder Mittelwert der Konzentration der Spezies  $Y_i$  und der Erwartungswert der Temperatur  $T$  können gemäss Gleichung 13 und 14 definiert werden.

$$Q_i(\eta, x, t) \equiv \langle Y_i(x, t) | \xi(x, t) = \eta \rangle \equiv \langle Y_i | \eta \rangle \quad (13)$$

$$Q_T(\eta, x, t) \equiv \langle Q_T(x, t) | \xi(x, t) = \eta \rangle \equiv \langle Q_T | \eta \rangle \quad (14)$$

Wobei  $\eta$  die Laufvariable für den konservierten Scalar (in diesem Fall der Mischungsbruch) und

$\langle Y_i(x, t) | \xi(x, t) = \eta \rangle$  bedeutet, dass die Erwartung oder der Mittelwert der Konzentration von  $Y_i$  an der Stelle  $x$  zur Zeit  $t$ , dessen Mischungsbruch  $\xi$  im physikalischen Raum entspricht, dem Erwartungswert von  $\eta$  im Mischungsbruchraum entspricht. Das heisst,  $\xi(x, t)$  muss die Bedingung  $\xi(x, t) = \eta$  erfüllen. Folglich ist der Erwartungswert des Massenbruches von  $Q_i$  an der Stelle  $x$ , zur Zeit  $t$  nur vom Mischungsbruch abhängig. Der Wert des Massenbruches  $Y_i$  an der Stelle  $x$  zur Zeit  $t$  entspricht folglich

$$Y_i(\eta, x, t) = Q_i(\xi(x, t), x, t) + y_i(x, t) \quad (15)$$

Wobei  $Q(\xi(x, t), x, t)$  ist der Mittelwert und  $y(x, t)$  ist die Fluktuation die Gemäss Gleichung den Erwartungswert 0 hat.

$$\langle y_i(x, t) | \xi(x, t) = \eta \rangle = 0 \quad (16)$$

Bilger setzte in Gleichung (12) anstelle von  $Y_i$  und dessen Ableitung Gleichung 13 und dessen Ableitung ein. Die Erhaltungsgleichung für die bedingte Spezies Konzentration (CMC Gleichung) kann folgendermassen geschrieben werden:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial Q_i}{\partial t} + \rho \langle u | \eta \rangle \nabla Q_i + \frac{1}{\tilde{P}(\eta)} \nabla \cdot [\langle u' y | \eta \rangle \rho \tilde{P}(\eta)] \\ = \langle w_i | \eta \rangle + \rho D_i \langle \nabla \xi \cdot \nabla \xi | \eta \rangle \frac{\partial Q_i}{\partial \eta^2} \end{aligned} \quad (17)$$

Wobei  $\tilde{P}(\eta)$  die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist. Um Gleichung 17 schliessen zu können, muss die bedingte mittlere Reaktionsrate  $\langle \omega | \eta \rangle$ , Geschwindigkeit  $\langle u | \eta \rangle$  und die skalare Dissipationsrate  $\langle \chi | \eta \rangle = c_\chi \cdot D \langle \nabla \xi \cdot \nabla \xi | \eta \rangle$  modelliert werden. In dieser Arbeit wird die skalare Dissipationsrate folgendermassen modelliert:

$$\tilde{\chi} = c_\chi \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \tilde{\xi}^2 \quad (18)$$

Wobei  $c_\chi$  auf 2 gesetzt wird.  $\tilde{\varepsilon}$  ist die Dissipationsrate der turbulenten Energie,  $\tilde{k}$  ist die turbulente Energie und  $\tilde{\xi}^2$  die Varianz des Mischungsbruches. Der chemische Quellterm wird folgendermassen geschlossen:

$$\langle w_i | \eta \rangle = \dot{\omega}_i(Q_i, Q_T, p) \quad (19)$$

Das bedeutet, dass der bedingte chemische Quellterm für ein gegebenes  $\eta$  nur eine Funktion der bedingten Spezieskonzentration  $Q_i(\eta)$ , der bedingten Temperatur  $Q_T(\eta)$  und des Drucks  $p$  (Gleichung 19) ist.

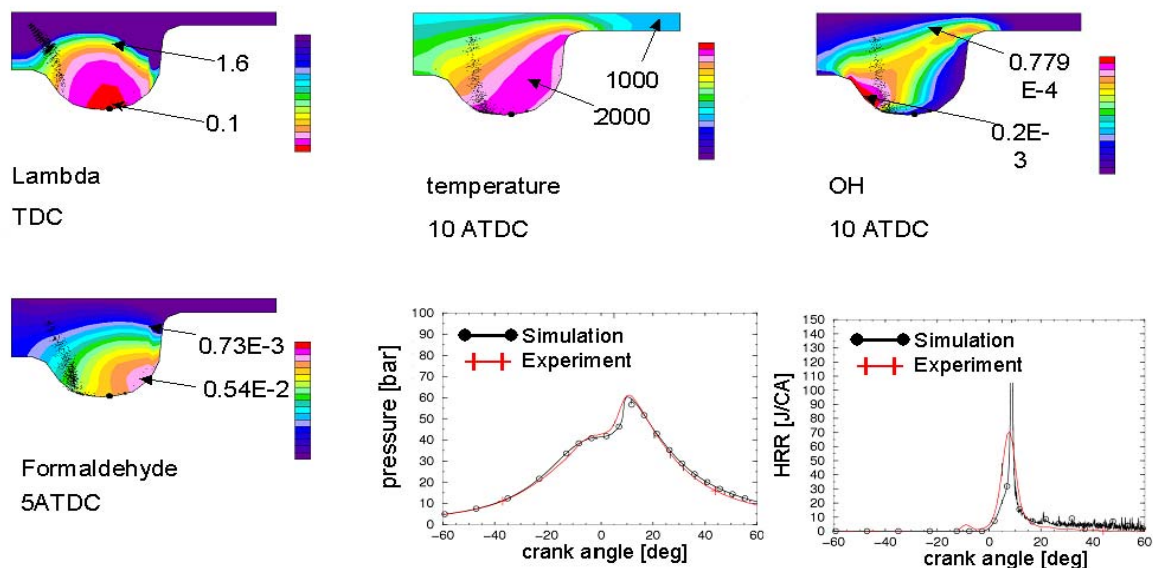
## SIMULATIONEN MIT DEM 3D-CFD / CMC VERBRENNUNGSMODELL FÜR DIREKTEINGESPRITZTES HOMOGENES BRENNVERFAHREN MIT SCHMALEM SPRITZKEGELWINKEL (MULDE 80) DER UNIVERSITÄT STUTTGART (TP1)

In diesem Abschnitt werden Betriebspunkte mit Direkteinspritzung simuliert. Für die Simulation wird der oben vorgestellte skelettartige n-Heptan Mechanismus benutzt. Der Modellkraftstoff n-Heptan wird verwendet, weil er ähnliche Zündeigenschaften wie der verwendete Diesel aufweist. Die Cetanzahl liegt beim n-Heptan bei ca. 55. Der verwendete Diesel hat eine Cetanzahl von 52.5. Die zwei Betriebspunkte unterscheiden sich im ESB. In Betriebspunkt 1, wird der Kraftstoff 20° vOT eingespritzt. In Betriebspunkt 2 wird der Kraftstoff 35° vOT eingespritzt.

	rpm [1/min]	mF [mg]	Pinj [bar]	SOI [BTDC]	EGR [%]	RG [%]	nozzle spread angle [°]	hole number	NOx [ppm]	CO [ppm]	UHC [ppm]	FSN
BP1	2000	15.5	1200	20	53	3.5	80	8	13	10000	470	2.87
BP2	2000	15.5	1200	35	60	4.0	80	8	7	20600	1240	0.06

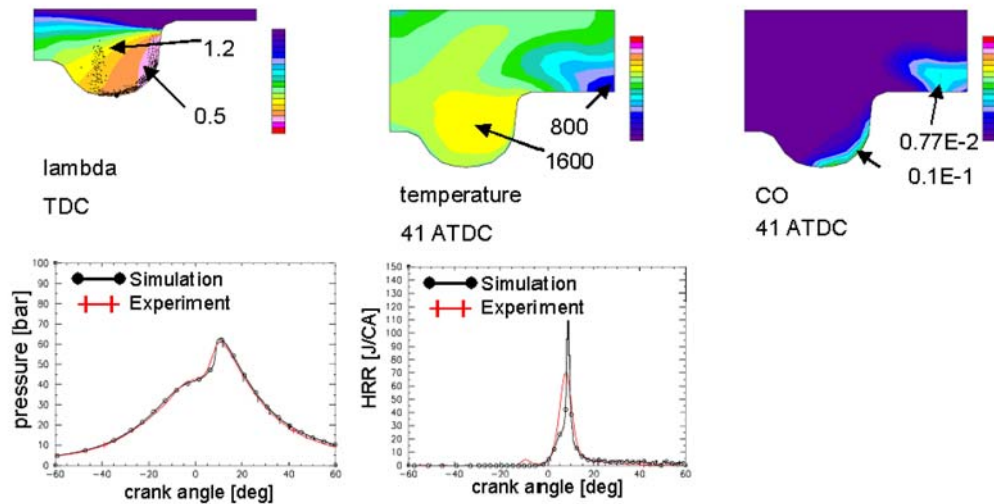
Tabelle 5: Betrachtete Betriebspunkte der Universität Stuttgart (TP1) mit Direkteinspritzung

Figur 9 zeigt mehrere Schnitte durch den Brennraum bei unterschiedlichen Kurbelwinkeln für Betriebspunkt 1. Zusätzlich ist der Vergleich zwischen dem Druckverlauf aus der 3D-Simulation mit CMC und der experimentellen Druckkurve respektive der Vergleich der Wärmefreisetzung dargestellt.



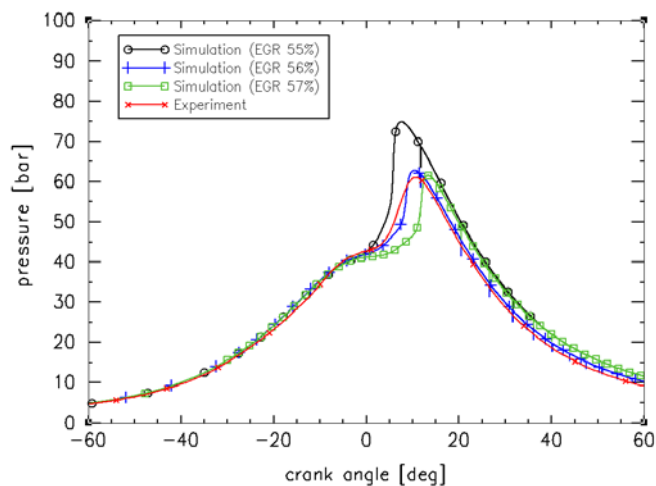
Figur 9: Betriebspunkt 1, charakteristische Größen während der Verbrennung

Figur 10 zeigt mehrere Schnitte durch den Brennraum bei unterschiedlichen Kurbelwinkeln für Betriebspunkt 2. Zusätzlich ist der Vergleich zwischen dem Druckverlauf aus der 3D-Simulation mit CMC und der experimentellen Druckkurve respektive der Vergleich der Wärmefreisetzung dargestellt. In beiden Betriebspunkten wird infolge der hohen AGR-Rate die kritische NOx-Bildungstemperatur von 2000 K nicht erreicht.



Figur 10: Betriebspunkt 2, charakteristische Größen während der Verbrennung

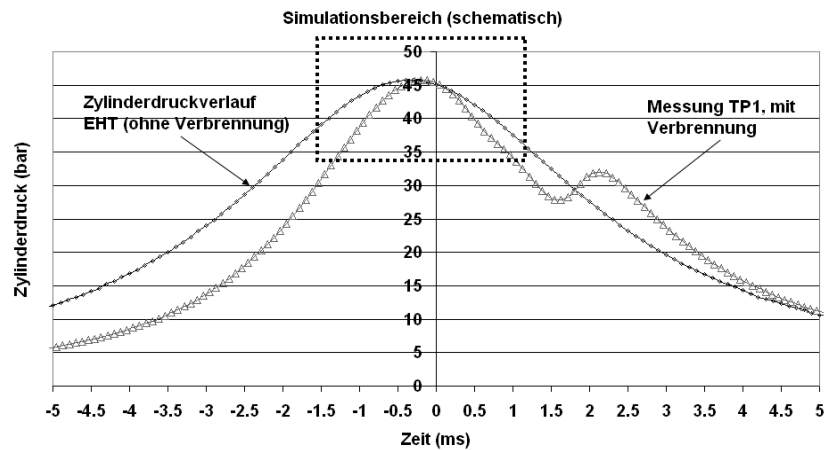
Die CFD Simulationen zeigen deutlich, dass das Gemisch in Betriebspunkt 2 homogener ist. Diese bessere Homogenität führt zu tieferen Russemissionen, jedoch zu höheren CO und UHC Werten. Generell zeigt die Simulation eine vernünftige Übereinstimmung mit dem Experiment. Der Wert des Spitzendrucks und seine Position werden in beiden Fällen gut wiedergegeben. Figur 11 zeigt die grosse Sensitivität der Brennlag e auf die AGR-Rate. Eine Änderung um nur 1% führt bereits zu sichtlicher Verschiebung der Verbrennungslage. Es ist bemerkenswert, dass das verwendete Modell, diese hohe Sensitivität, die auch im Experiment festgestellt wurde, richtig wiedergibt.



Figur 11: Vergleich zwischen der 3D-Simulation mit dem CMC-Modell und der experimentellen Druckkurve für Betriebspunkt 1 (2000 U/min,  $\lambda \approx 1.1$ ,  $p_{inj} = 1200$  bar, ESB 25° vOT, AGR = 62 %, Experiment mit Diesel, Simulation mit n-Heptan. Einfluss der AGR-Rate bei der Simulation

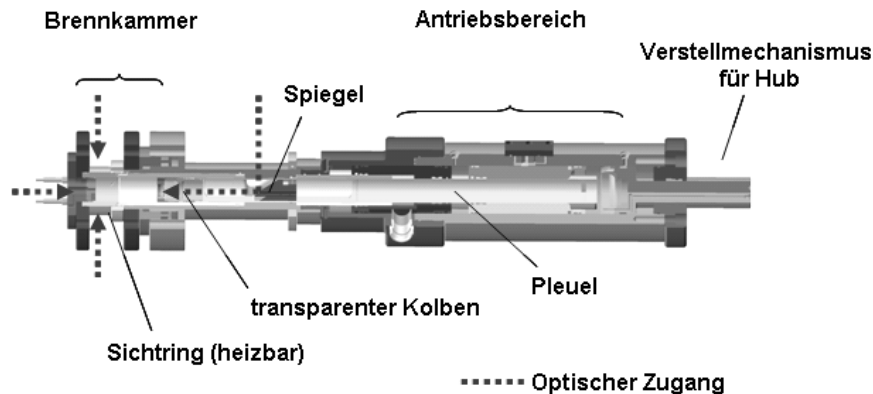
## 6. Versuchsaufbau – Einhubtriebwerk (EHT)

Der experimentelle Teil des TP4 wurde am Einhubtriebwerk des LAV, ETH Zürich durchgeführt. Das System erlaubt die Simulation von thermodynamisch motornahen Bedingungen ( $p/T$ ) rund um den oberen Totpunkt eines realen Kurbeltriebs.



Figur 12: Zylinderdruckverlauf des EHT vs. Realmotor aus TP1

Durch das Antriebskonzept mit zwei gegenläufigen, koaxial angeordneten Kolben können Betriebszustände (im Einzelschuss) in einem grossen Spektrum vibrationsfrei simuliert werden. Den grössten Einfluss auf die simulierte Drehzahl  $n_{sim}$  und  $\epsilon$  haben der Antriebs- und der Ladedruck.



Figur 13: Schematische Darstellung des EHT-Aufbaus

Der Brennraum wird vorkonditioniert und der Schuss ausgelöst. Das effektiv erreichte Verdichtungsverhältnis ergibt sich nach der Schussauslösung aus einer Reihe von Einflussgrössen wie Antriebsdruck, Ladedruck im Zylinder, Einspritzbeginn,  $\lambda$  und maximaler Hub.

simulierte Drehzahl $n_{sim}$	1000 U / min – 3000 U / min, Simulation von $c_m$
Hub H	stufenlos einstellbar zwischen 120 mm – 250 mm
Bohrung B	84 mm
Triggerpunkte	beliebig entlang Hub (in 1/100 mm)

Datenaufnahme	100 kHz sampling von Kolbenposition, Zylinderdruck
Verdichtungsverhältnis $\epsilon$	5 – 25
$p_{\text{Zyl max}}$	200 bar
Heizung	Kolben und Sichtring sind bis 120° C heizbar
Schusskadenz	ca. 2 - 3 min pro Experiment

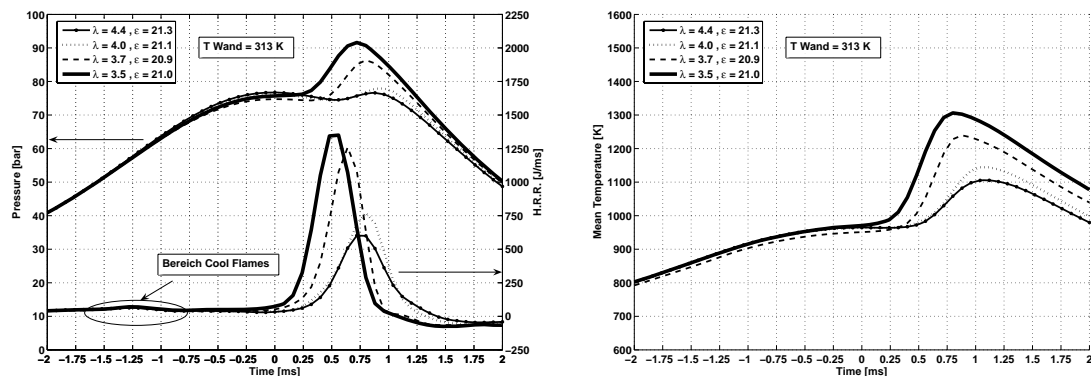
Tabelle 6: Betriebsbereich des Einhubtriebwerks

Der Brennraum ist optisch durch Sichtfenster im oberen Bereich des Zylinders, durch den Zylinderdeckel sowie durch den transparenten Kolben ( $\varnothing$  56 mm) zugänglich.

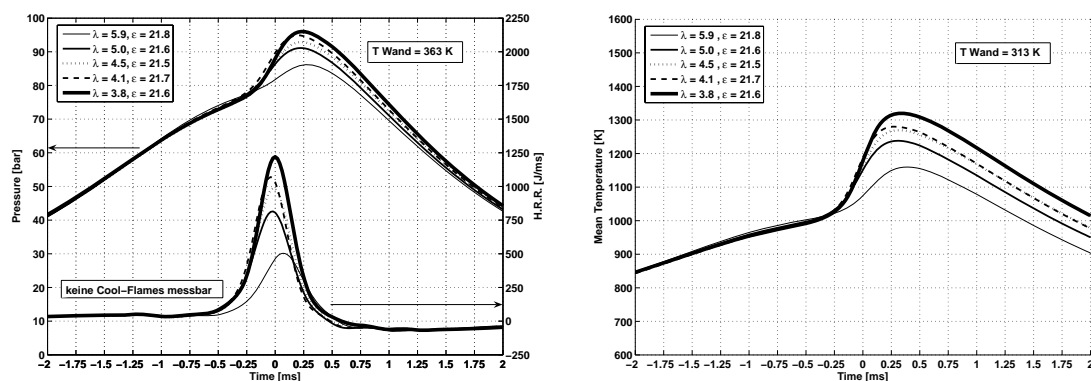
## 7. Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen

### ERGEBNISSE IM VOLLHOMOGENEN BETRIEB

Durch den tiefen Dampfdruck von 2.06 bar bei 293 K ist eine perfekte Homogenisierung möglich. N-Butan ist die kürzeste Kohlenwasserstoffverbindung welche ein 2-stufiges Zündverhalten mit einer Tieftemperatur- (LTR) und Hochtemperatur Reaktion (HTR) aufweist. Die tiefere Cetanzahl als Diesel muss durch Aufwärmung der Ladeluft oder durch Erhöhung der Kompressionsverhältnisses kompensiert werden. Eine Absenkung der Drehzahl sowie des Verbrennungsluftverhältnisses begünstigen eine stabile Zündung zusätzlich [7, 8]. Durch die Einspritzung von flüssigem n-Butan im UTP wurde das Verbrennungsluftverhältnis variiert wobei der Ladedruck von 1.1 bar im UTP konstant gehalten wurde. Eine zusätzliche Variation beinhaltete die Wandtemperatur und somit der Gastemperatur der Ladeluft vor der Kompression.



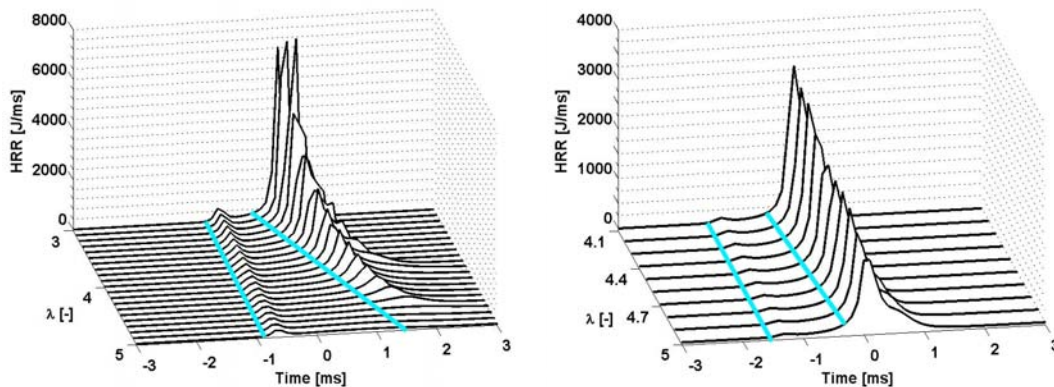
Figur 14: Druck- und Brennverlauf (links) sowie mittlere Gastemperatur (rechts) bei Variation von  $\lambda$ ,  $H = 225$  mm,  $\epsilon = 21.1$ ,  $T_{\text{Wand}} = 313$  K, n-Butan



Figur 15: Druck- und Brennverlauf (links) sowie mittlere Gastemperatur (rechts) bei Variation von  $\lambda$ ,  $\epsilon = 21.6$ ,  $H = 225$  mm,  $T_{\text{Wand}} = 363$  K, n-Butan



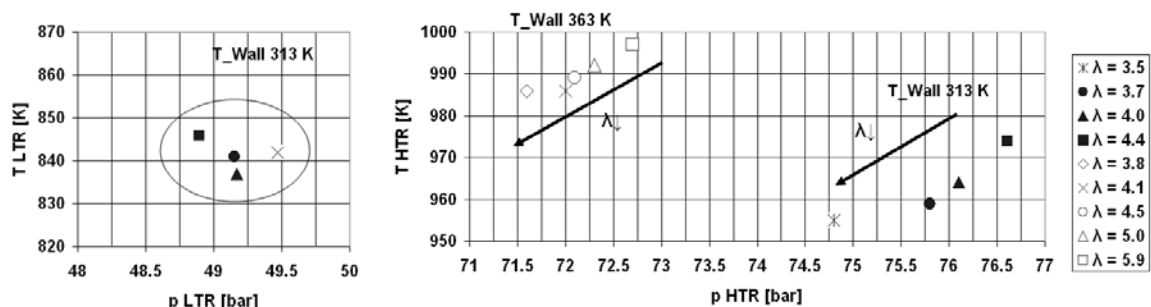
Aus Figur 14 und 15 geht hervor, dass eine Absenkung von  $\lambda$  zu einer früheren und schnelleren Umsetzung führt. Eine Erhöhung des Temperaturniveaus durch höhere Wandtemperatur verlagert den Umsatzbeginn der Hauptverbrennung zu einem früheren Zeitpunkt. In Übereinstimmung mit [8] wurde gefunden, dass das Auftreten der Cool-Flames, bei welchen hauptsächlich  $\text{CH}_2\text{O}$  gebildet wird, eine Funktion von  $\lambda$  und der Ladelufttemperatur ist. Bei tieferen Wandtemperaturen (und damit Gastemperaturen vor der Schussauslösung) sind die Cool-Flames nur schwach, bei hoher Wandtemperatur nicht feststellbar. Die Simulation mit Chemkin von einem homogenen Reaktor und dem in TP4 entwickelten n-Butan Mechanismus mit 140 Spezies und 453 Reaktionen zeigte dieses Verhalten ebenfalls wie die folgende Figur zeigt:



Figur 16: Brennverlauf, homogener Reaktor, Variation  $\lambda = 3 - 5$ ,  $H = 225 \text{ mm}$ ,  $\varepsilon = 21$ ,  $T_{\text{Wand}} = 313 \text{ K}$  (links),  $\lambda = 4 - 5$ ,  $T_{\text{Wand}} = 363 \text{ K}$ , Reaktionsmechanismus für n-Butan aus TP4, mit 140 Spezies und 453 Reaktionen

Aus dem Experiment und der Simulation ist ersichtlich, dass die Wärmefreisetzung der Cool-Flames eine stehende Welle darstellt und von  $\lambda$  unabhängig ist. Der Bereich der Cool-Flames bei hoher Wandtemperatur ist auch in der Simulation nur schwach erkennbar. Bei tiefer Wandtemperatur und abnehmendem  $\lambda$  sinkt die sog. induction time zwischen der Tieftemperatur- und der Hochtemperaturreaktion.

Es wird vermutet, dass der Aufbau des Radikalpools während der Cool-Flame Phase zu einer zeitlich vorgezogenen Einleitung der Hauptverbrennung führt. Ein Indiz dafür ist die rund 30 K tiefere Temperatur beim Beginn der Hauptverbrennung bei tieferer Starttemperatur.

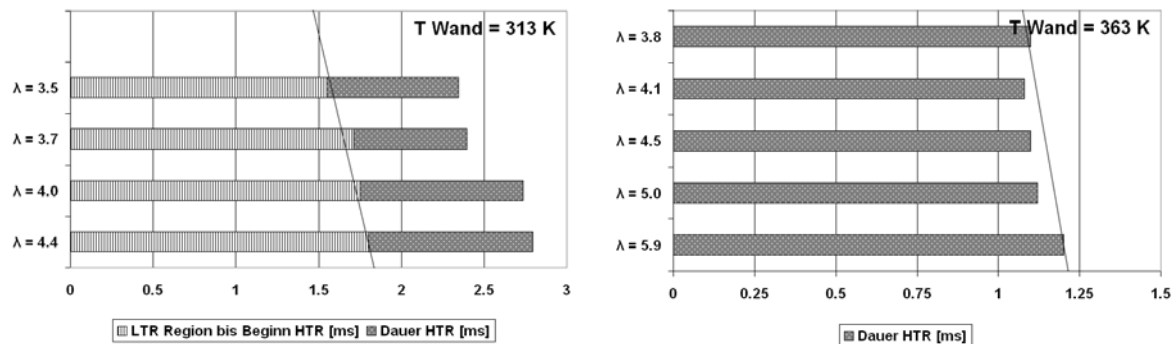


Figur 17: experimentell ermittelte ( $p / T$ ) für den Beginn der Low Temperature Reaction (LTR) und High Temperature Reaction (HTR), n-Butan,  $\varepsilon = 21$ ,  $H = 225 \text{ mm}$ , Variation von  $\lambda$

In Figur 18 ist die induction time, die Zeit zwischen der LTR und der HTR, sowie die Dauer der Hochtemperaturreaktion dargestellt. Es ist eine Tendenz erkennbar, dass mit steigendem  $\lambda$  die Zeit zwi-

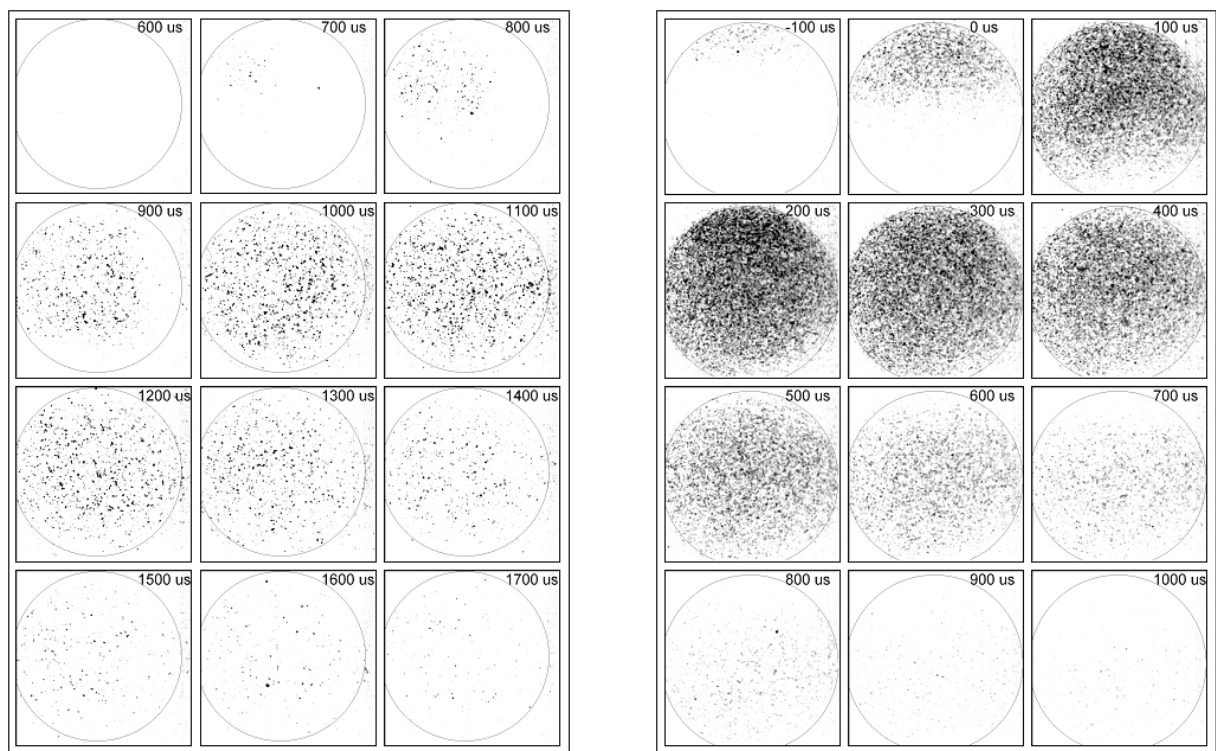


schen der LTR und der HTR sowie die Hochtemperaturreaktion an sich zunehmen. Die Brenndauer wurde mittels der in [9] beschriebenen Tangentenmethode an der Wärmefreisetzungsrate bestimmt.



Figur 18: Dauer der Brennphasen der vollhomogenen n-Butan Verbrennung bei  $T_{Wand} = 313\text{ K}$  (links) und  $T_{Wand} = 363\text{ K}$  (rechts). Keine Cool-Flames messbar bei  $T_{Wand} = 363\text{ K}$

Mittels einem schnellen (kHz Bereich), intensivierten Kamerasystem wurden passive OH Aufnahmen durch den Winkelspiegel und den transparenten Kolben  $\varnothing 56\text{ mm}$  realisiert. Die Bildsequenzen zeigen eine homogene n-Butan Verbrennung mit einer zeitlichen Auflösung von 10 kHz bei unterschiedlichen Starttemperaturen vor der Kompression. Es zeigt sich, dass der Ort des Zündbeginns der Verbrennung sehr temperatursensitiv ist. Bei geringer Heizleistung stellt sich ein vertikales, homogenes Temperaturprofil des Gases vor der Schussauslösung ein, was zu einer nahezu homogenen Verbrennung führt.



Homogene, vertikale Temp. Verteilung

Inhomogene, vertikale Temp. Verteilung

$T_{Wand} = 313\text{ K}$ , n-Butan,  $\lambda = 4.5$

$T_{Wand} = 363\text{ K}$ , n-Butan,  $\lambda = 4.5$

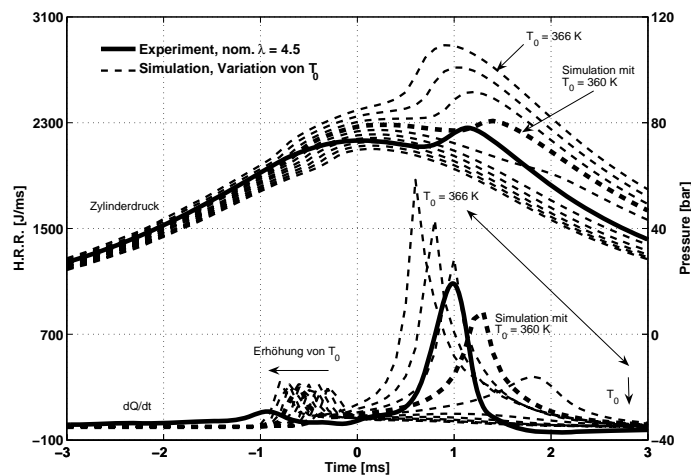
Figur 19: OH Chemilumineszenz,  $\lambda = 4.5$ ,  $\epsilon = 21$ , Einfluss der Wandtemperatur  $T_{Wand}$  und der Temperaturhomogenität (in vertikaler Richtung, senkrecht zur Zylinderachse) im Brennraum

Bei Erhöhung der Wandtemperatur auf 363 K ist eine vertikale Temperaturschichtung im Brennraum von 11 K messbar, was zu einem reproduzierbaren Ort des Zündbeginns auf der vertikal oberen Seite des Brennraums führt.

Die Sensitivität der Temperatur vor der Kompression wurde mit Chemkin am perfectly stirred reactor untersucht. Als Startwert für die Simulation wurde der (p/T) - Zustand aus dem Experiment beim Zeitpunkt -15 ms vOT gewählt ( $T_0 = 360$  K).

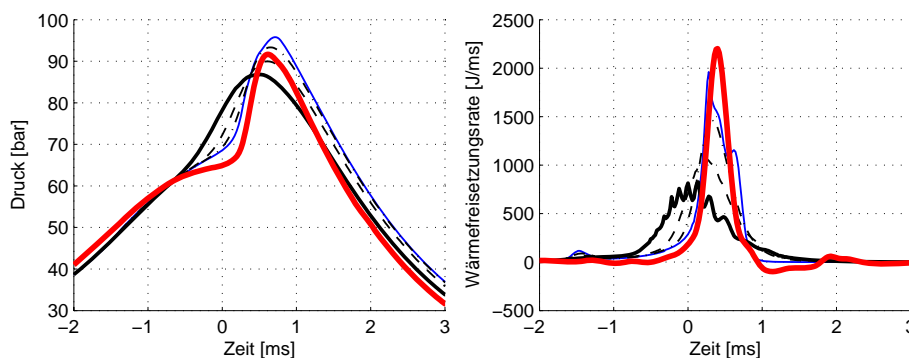
Eine Variation in 2 K Schritten zwischen 350 K und 366 K für die Starttemperatur der Berechnung um den nominellen Wert von 360 K zeigt eine deutliche zeitliche Verschiebung des Beginns der LTR und der HTR sowie auf die Brenndauer der Hochtemperaturreaktion.

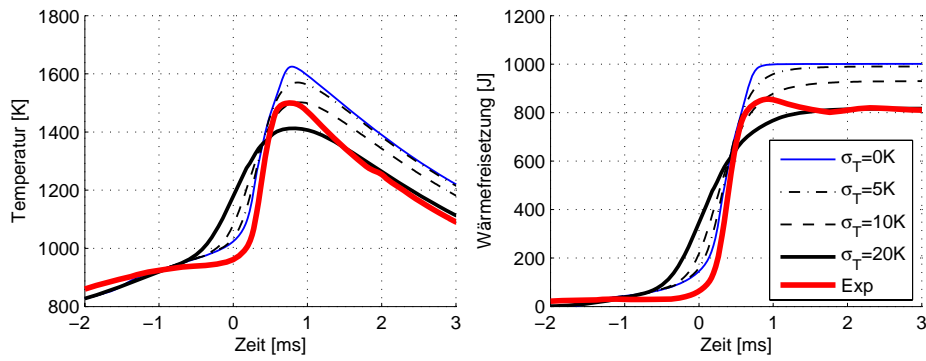
Aus diesem Grund wird angenommen, dass die Inhomogenitäten in der OH Chemilumineszenz auf eine inhomogene Temperaturverteilung hindeuten, resp. die Vermutung, dass die HCCI Verbrennung sehr temperatursensitiv ist, untermauert.



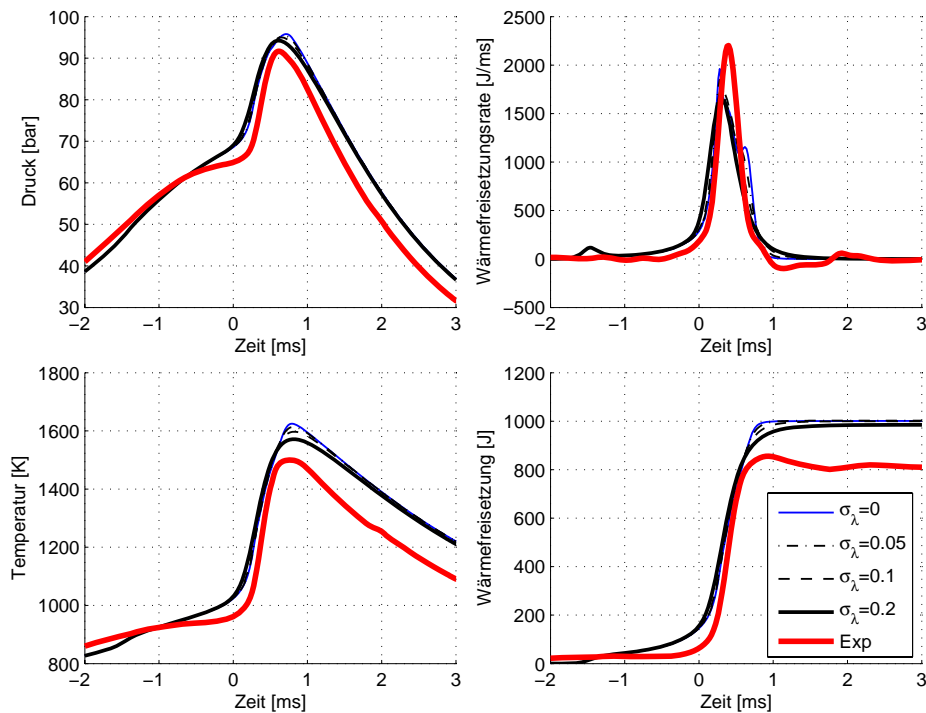
Figur 20: Einfluss der Starttemperatur der Simulation, Analyse am homogenen Reaktor,  $\lambda = 3.8$ ,  $H = 225$  mm,  $\varepsilon = 21$ , n-Butan, Variation der Starttemperatur von 350 K – 366 K in 2 K Schritten. Experiment:  $T_{Gas} = 360$  K

Figur 21 zeigt eine Analyse mittels den in TP4 entwickelten Mehrzonenmodellen. Die Standardabweichung der Zonentemperatur wurde von 0 K – 20 K variiert. Allgemein kann festgehalten werden, dass eine Erhöhung von  $\sigma T$  eine weichere und früher einsetzende Wärmerfreisetzung hervorruft. Ausserdem wird die Dauer der HTR länger. Durch den Vergleich mit dem Experiment hat sich eine Temperaturstandardabweichung von  $\sigma T = 5$  K als sinnvoll erwiesen (Kriterium: Beginn der Umsetzung,  $dQ/dt$ , T).





Figur 21: Multizonenmodell, Einfluss der Temperaturstandardabweichung,  $T_{Wand} = 363 \text{ K}$ , Anzahl Temperaturzonen  $N_T = 5$ ,  $\sigma_\lambda = 0$ ,  $\lambda = 3.8$ ,  $\varepsilon = 21$ ,  $H = 225 \text{ mm}$ , *n*-Butan



Figur 22: Multizonenmodell, Einfluss der Lambdastandardabweichung,  $T_{Wand} = 363 \text{ K}$ , Anzahl Lambdazonen  $N_\lambda = 20$ ,  $\sigma_T = 0 \text{ K}$ ,  $\lambda = 3.8$ ,  $\varepsilon = 21$ ,  $H = 225 \text{ mm}$ , *n*-Butan

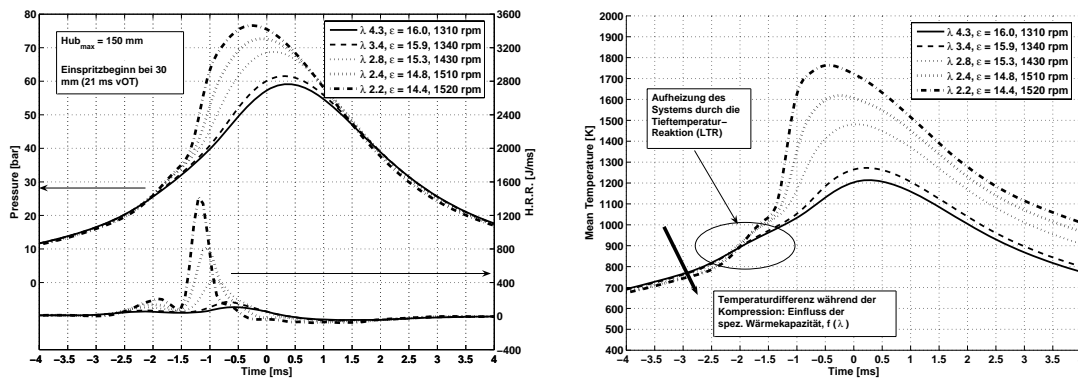
Die Einspritzung von *n*-Butan geschieht vor dem Einbringen der Ladeluft ( $p_{Zyl} = 1.1 \text{ bar}$ ) vor der Schussauslösung, qualitativ kann von einer guten Homogenisierung ausgegangen werden. Figur 22 zeigt eine Variation von  $\sigma_\lambda$  bei  $\sigma_T = 0$ . Der Einfluss der Kraftstoffinhomogenität ist gering.

## ERGEBNISSE IM TEILHOMOGENEN BETRIEB MIT N-HEPTAN

Das primary reference fuel *n*-Heptan, mit einer Cetanzahl nahe am Dieselmotorkraftstoff wurde als zweiter Kraftstoff untersucht. Ziel der experimentellen Untersuchungen war es, eine Datenbasis für numerische Arbeiten mit charakteristischen Temperaturen und Drücken für den Beginn und die Dauer der LTR und HTR bei verschiedenen  $\lambda$  und Sauerstoffgehalt zu schaffen (Simulation von AGR) zu schaffen. Die Reaktion kann grundsätzlich in 3 Schritte unterteilt werden: Im Bereich von  $600 \text{ K} - 800 \text{ K}$  wird durch die LTR die Temperatur des Systems um bis zu mehrere hundert Grad angehoben. Ebenso entsteht ein Radikalpool der die Kettenverzweigung unterstützt und die Auslösung der Reaktion bei höheren Temperaturen beschleunigt. Im mittleren Temperaturbereich sinkt die Reaktivität des Gesamtsystems, da die Fortpflanzung der Kettenreaktion die Kettenverzweigung ablöst. Dies führt zum negativen Temperaturgradienten (NTC). Im Hochtemperaturbereich findet ab  $1000 \text{ K}$  die Zersetzung

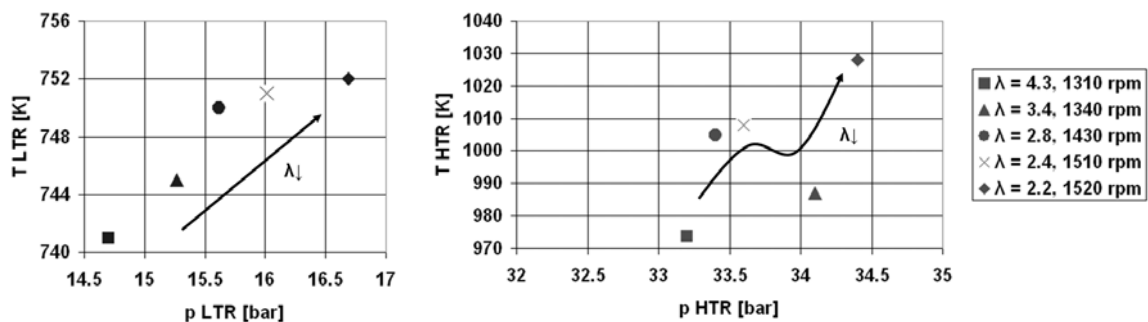
von Wasserstoffperoxid zu Hydroxylradikalen statt, sowie ab 1250 K die Produktion von Radikalen gemäss  $H' + O_2 \rightarrow O' + OH'$ .

Die Homogenisierung von flüssigen Kraftstoffen ist problematisch. Aus diesem Grund wurde der obere Teil des Zylinders auf 400 K vorgeheizt und vor Beginn der Kompression n-Heptan mit 1000 bar aufgespritzt (8-Loch Düse, 120° Spritzkegelwinkel,  $\varnothing$  0.112 mm,  $q_{hydr} = 315 \text{ cm}^3 / 30 \text{ s}$  bei 100 bar). Der Ladedruck vor der Schussauslösung wurde bei 1.1 bar konstant gehalten,  $\lambda$  wurde mittels der Einspritzdauer variiert.



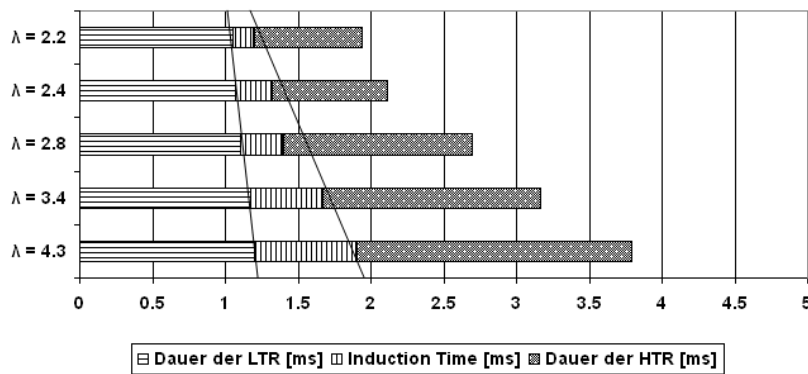
Figur 23: Variation von  $\lambda$ , frühe Einspritzung von n-Heptan bei 21 ms vOT auf heisse Zylinderwand  $T_{Wand} = 400 \text{ K}$ ,  $H = 150 \text{ mm}$ ,  $\epsilon = 14.4 - 16.0$

Bei der Absenkung von  $\lambda$  von 4.3 auf 2.2 nimmt die spezifische Wärmekapazität zu. Aus diesem Grund muss das reichere Gemisch weiter, bis zu einem höheren Druck komprimiert werden um die Temperatur zu erreichen, welche für die Auslösung der LTR notwendig ist. Der Umsatz während der LTR ist höher als mit n-Butan und liegt im Bereich von 10% des Summenintegrals. Der Beginn der LTR wurde in einem sehr engen Temperaturband gefunden bei rund 750 K und 14.7 bar – 16.8 bar.



Figur 24: experimentell ermittelte  $(p/T)$  für den Beginn der Low Temperature Reaction (LTR) und High Temperature Reaction (HTR), n-Heptan, Variation von  $\lambda$

Interessant ist die Erkenntnis, dass  $p/T$  bei tieferem  $\lambda$  höher liegen als bei abgemagertem Gemisch (im Vergleich zwischen  $\lambda$  2.2 und 4.3 wurde ein  $\Delta T$  von rund 55 K gemessen). Dies kann dadurch erklärt werden, dass es sich bei der Kolbenkinematik um ein freifliegendes System handelt welches nur durch den Gegendruck (Verbrennungsdruck) gebremst wird. Ein tieferes  $\lambda$  führt zu einem höheren Verbrennungsdruck und somit zu einem tieferen, effektiven  $\epsilon$ . Die simulierte Drehzahl steigt um 200 rpm an. Der Effekt dieses Drehzahlanstiegs überwiegt die Anreicherung des Gemisches (der Zeitpunkt für die Einleitung der Reaktion wird nach spät verschoben). Da die Zündung bei der frühen Einspritzung immer vor OTP liegt, kann dieser Effekt nur bedingt durch den Antriebsdruck kompensiert werden.

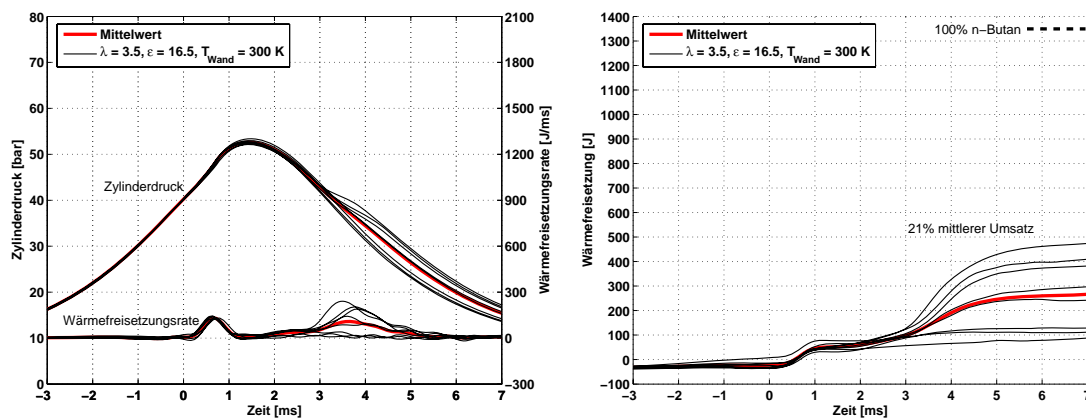


Figur 25: Dauer der Brennphasen der teilhomogenen *n*-Heptan Verbrennung in Abhängigkeit vom Luftverhältnis, Einspritzung 21 ms vOT,  $p_E = 1000$  bar,  $T_{Wand} = 400$  K

Die Dauer der LTR alleine ist schwächer von  $\lambda$  abhängig als die Zeit zwischen den beiden Reaktionen und der HTR selbst. Diese verläuft umso schneller, je reicher das Gemisch ist, was zu grösseren Druckgradienten führt.

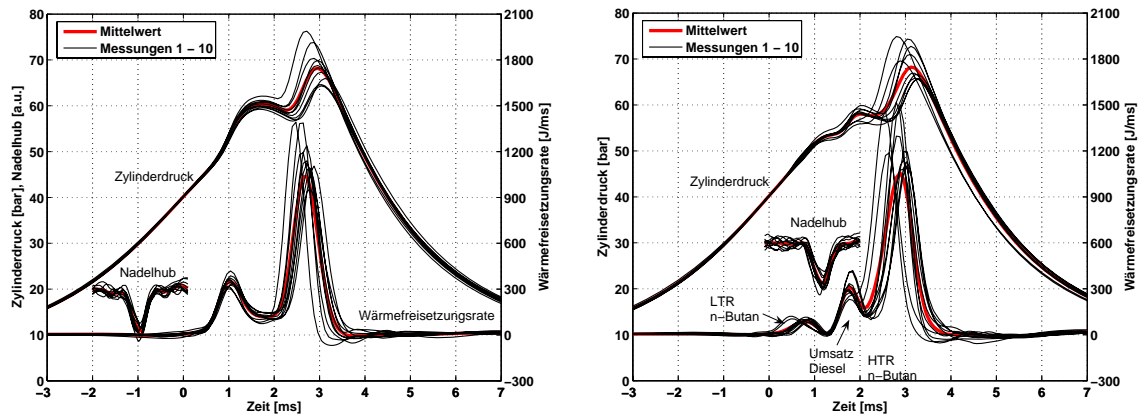
## ERGEBNISSE IM DUAL-FUEL MODE, KOMBINIerte EINSPRITZUNG VON N-BUTAN UND DIESEL

Mittels einer kombinierten Einspritzung von Diesel wurde das Zündverhalten vom an sich schlecht entzündbaren *n*-Butan untersucht. Ziel war es, durch eine sekundäre Einspritzung von Dieselmotorkraftstoff im Bereich des OTP das *n*-Butan Gemisch zu entzünden und die Umsetzung zu stabilisieren. Ausgangslage war ein homogenes *n*-Butan Gemisch im UTP. Das Verdichtungsverhältnis wurde so tief gewählt, dass nur die LTR ausgelöst wurde.

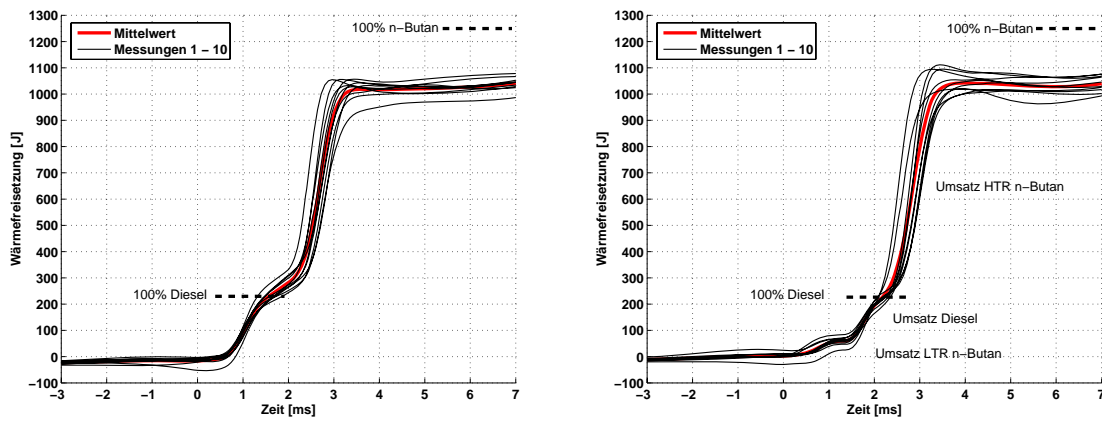


Figur 26: Zylinderdruck und Brennrate sowie Wärmefreisetzungsrate einer vollhomogenen *n*-Butan Verbrennung  $\lambda = 3.5$  und  $\epsilon = 16.5$ ,  $T_{Wand} = 300$  K, stabile Lage der LTR

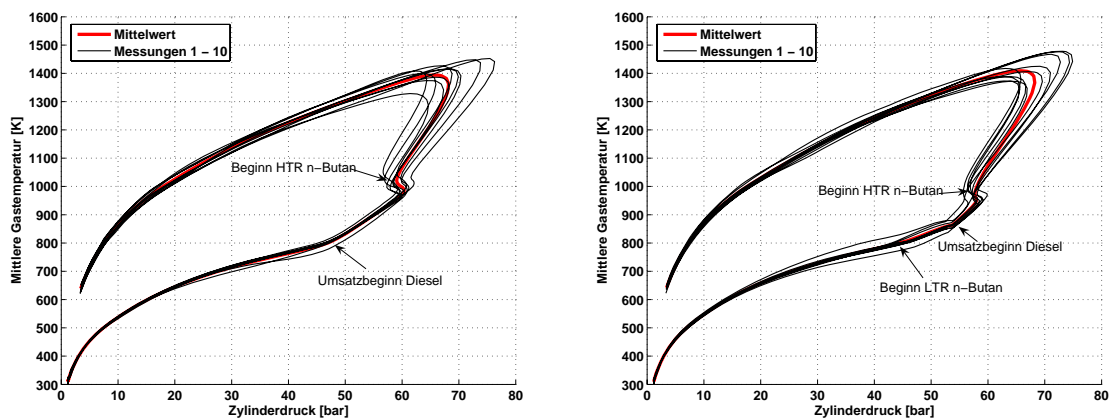
Durch das niedrige Kompressionsverhältnis und die tiefe Wandtemperatur beträgt der mittlere Umsatz nur 21% und die Reproduzierbarkeit, bezogen auf die Wärmefreisetzungsrate ist schlecht. Die LTR tritt allerdings stabil auf. Es wurden 2 Variationen untersucht mit einer Dieseleinspritzung vor sowie während der LTR Phase von *n*-Butan. Die Einspritzdauer beträgt 0.65 ms, was zu einer rein vorgemischten Verbrennung im ersten Fall und zu einer Verbrennung mit Diffusionsanteil im zweiten Fall führt.



Figur 27: Zylinderdruck und Brennrate bei einer kombinierten Einspritzung von  $n$ -Butan und Dieselmkraftstoff.  $\lambda_{Butan} = 4.0$ , 5 mg Diesel, Einspritzung vor LTR  $n$ -Butan (links) und Einspritzung während LTR  $n$ -Butan (rechts), Einspritzdruck 500 bar,  $\varepsilon = 16.5$ ,  $T_{Wand} = 300$  K



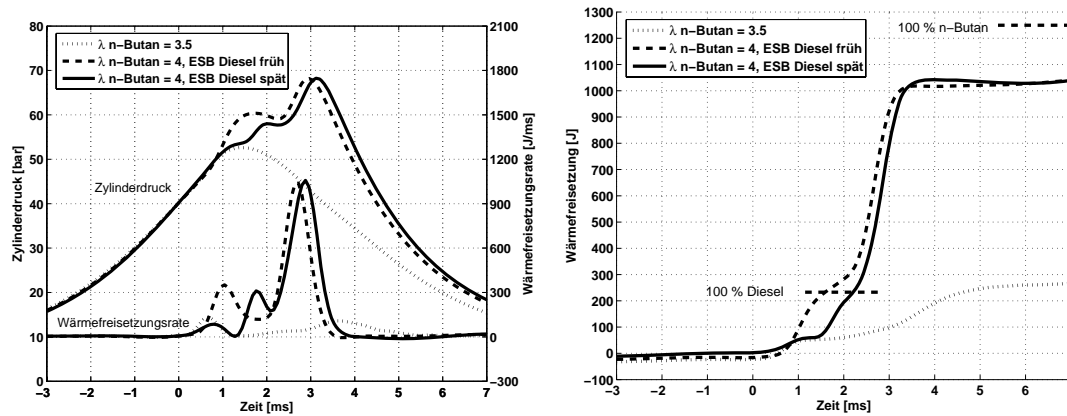
Figur 28: Wärmefreisetzungsrate der kombinierten  $n$ -Butan und Dieselmkraftstoffverbrennung.  $\lambda_{Butan} = 4.0$ , 5 mg Diesel,  $\lambda_{Butan} = 4.0$ , 5 mg Diesel, Einspritzung vor LTR  $n$ -Butan (links) und Einspritzung während LTR  $n$ -Butan (rechts), Einspritzdruck 500 bar,  $\varepsilon = 16.5$ ,  $T_{Wand} = 300$  K



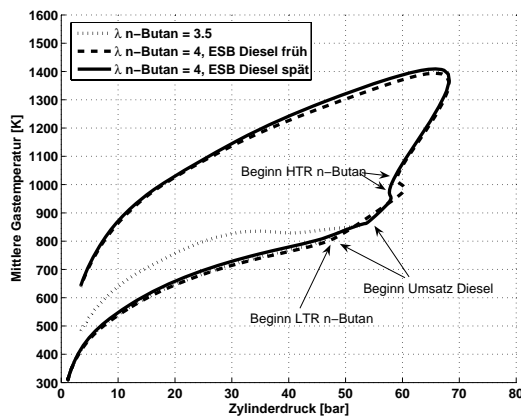
Figur 29:  $p$ - $T$ -Plot von  $\lambda_{Butan} = 4.0$ , 5 mg Diesel,  $\lambda_{Butan} = 4.0$ , 5 mg Diesel, Einspritzung vor LTR  $n$ -Butan (links) und Einspritzung während LTR  $n$ -Butan (rechts), Einspritzdruck 500 bar,  $\varepsilon = 16.5$ ,  $T_{Wand} = 300$  K

Beide Varianten, die Einleitung des Diesel-Umsatzbeginns im ersten Fall vor und im zweiten Fall nach der LTR von n-Butan ermöglichen eine stabile Hochtemperaturreaktion von n-Butan. Der Umsetzungsgrad konnte in beiden Fällen auf rund 82% gesteigert werden. Eine weitere Erhöhung des Kompressionsverhältnisses oder der Wandtemperatur würde die Umsetzung noch weiter begünstigen.

In Figur 30 sind die gemittelten Messwerte zusammengefasst. Die Lage (p/T) bei Cool Flames ist in vergleichbar bei reinem n-Butan und im Fall bei später Dieseleinspritzung. Durch die frühe Einspritzung überlagert sich die Umsetzung von Dieseldieselkraftstoff mit der LTR von n-Butan, was zu einem höheren Umsatz während dieser Phase führt.



Figur 30: gemittelte Werte, Zylinderdruck und Brennrate sowie Wärmefreisetzung bei einer reinen n-Butan Verbrennung mit  $\lambda = 3.5$ , sowie kombinierter Einspritzung von n-Butan und Dieseldieselkraftstoff,  $\lambda_{\text{Butan}} = 4.0$ , 5 mg Diesel, Einspritzung vor LTR n-Butan und Einspritzung während LTR n-Butan Einspritzdruck 500 bar,  $\varepsilon = 16.5$ ,  $T_{\text{Wand}} = 300 \text{ K}$

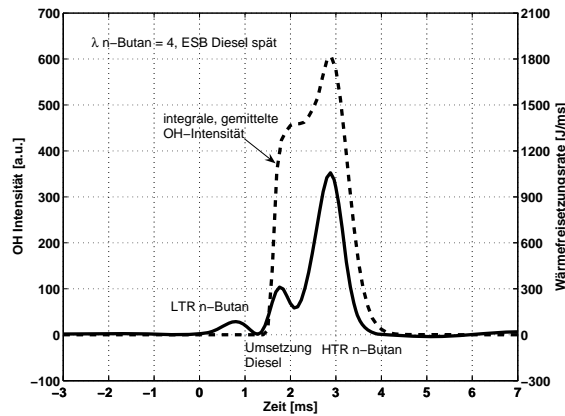


Figur 31: p-T-Plot von  $\lambda_{\text{Butan}} = 3.5$ , 5 mg Diesel,  $\lambda_{\text{Butan}} = 4.0$ , 5 mg Diesel bei Einspritzung vor LTR n-Butan und Einspritzung während LTR n-Butan, Einspritzdruck 500 bar,  $\varepsilon = 16.5$ ,  $T_{\text{Wand}} = 300 \text{ K}$

Mittels der schnellen intensivierten CMOS Kamera (kHz Bereich) wurde die OH-Chemilumineszenz untersucht. Diese wurde in 10 kHz Zeitintervallen aufgezeichnet und über den gesamten, durch den transparenten Kolben einblickbaren Bereich gemittelt. Figur 32 zeigt die integrale, gemittelte OH-Chemilumineszenz gegenüber der Wärmefreisetzungsrate.

Während der Cool Flame Phase bis zum Umsatzbeginn des Dieseldieselkraftstoffes wurde wegen der geringen Intensität keine OH-Chemilumineszenz gemessen. Zeitlich mit der Dieselumsetzung steigt die OH-Chemilumineszenz an und erreicht beim Umsatzmaximum von n-Butan die maximale Intensität.

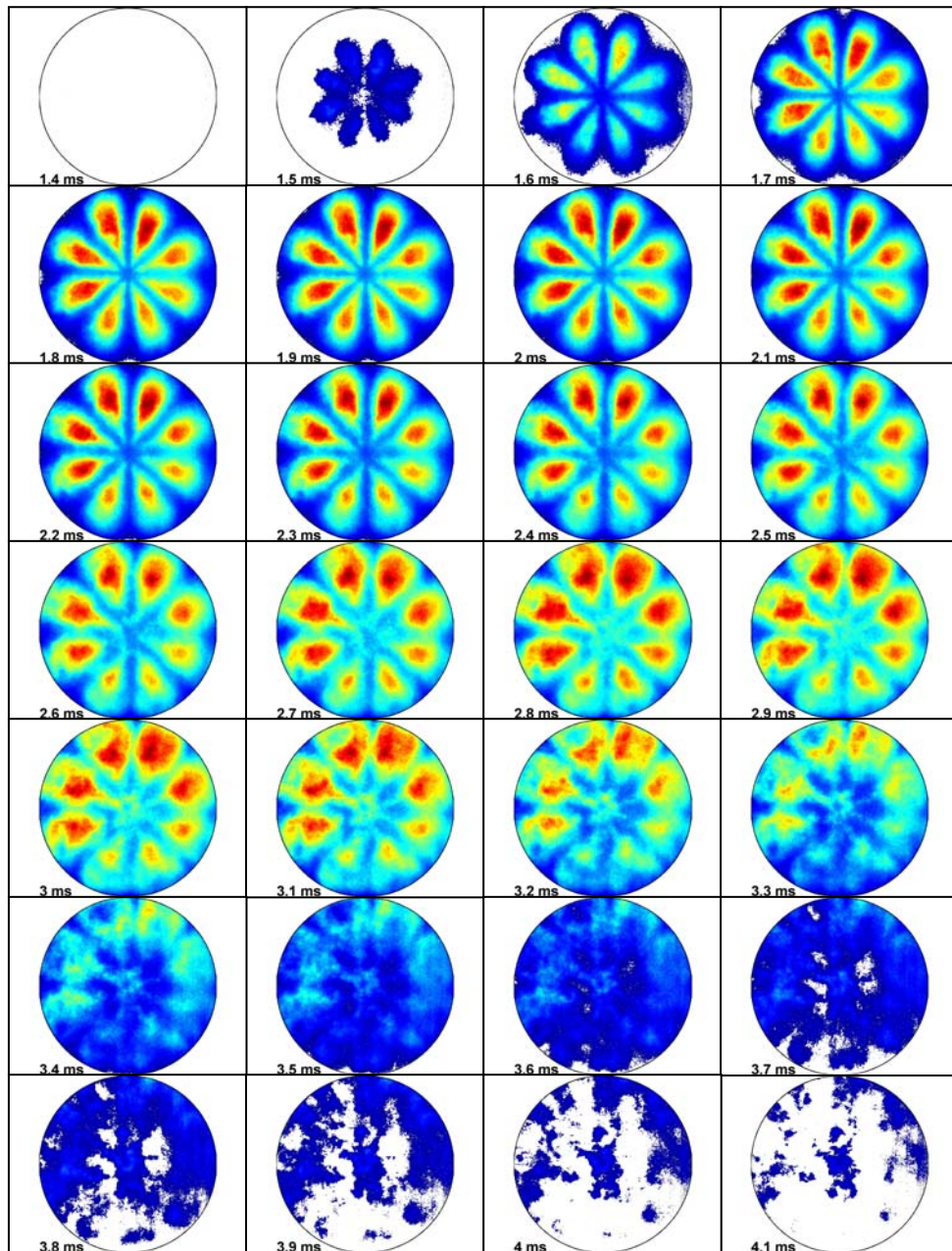




Figur 32: gemittelte OH-Chemilumineszenz sowie Wärmefreisetzung der kombinierten Einspritzung von *n*-Butan und Dieselkraftstoff,  $\lambda_{\text{Butan}} = 4.0$ , 5 mg Diesel, Einspritzung während LTR *n*-Butan, Einspritzdruck 500 bar,  $\varepsilon = 16.5$ ,  $T_{\text{Wand}} = 300 \text{ K}$

Beim Zeitpunkt 1.5 ms wird das erste OH Signal gemessen, die Intensität steigt laufend an bis zum Abschluss der Dieselumsetzung. Ab 2 ms überwiegt die Wärmefreisetzung der HTR der *n*-Butan Verbrennung die Abnahme der Dieselumsetzung und erreicht bei 2.9 ms das OH-Intensitätsmaximum. Der Beginn der Umsetzung von Diesel sowie die Lage des Umsetzungsmaximum stimmen zeitlich mit dem OH-Signal überein. Während der LTR Phase von *n*-Butan wurde keine OH Intensität gemessen.





Figur 33: gemittelte, integrale OH-Chemilumineszenz, Aufnahme durch den transparenten Kolbenboden der kombinierten Einspritzung von *n*-Butan und Dieselmotorkraftstoff,  $\lambda_{\text{Butan}} = 4.0$ , 5 mg Diesel, Einspritzung während LTR *n*-Butan, Einspritzdruck 500 bar,  $\varepsilon = 16.5$ ,  $T_{\text{Wand}} = 300 \text{ K}$

## 8. Diskussion

Es wurden Modelle für das HCCI-Brennverfahren und deren Validierung mittels Experiment für zwei unterschiedliche Kraftstoffe vorgestellt. Die skelettartige Chemie wurde mit einem Mehrzonen Modell (Reaktorennetzwerk) und in 3D-CFD mit dem CMC-Ansatz gekoppelt. Selbstzündung und Wärmefreisetzung wurden erfolgreich für das HCCI-Brennverfahren, mit Saugrohreinspritzung und Direkteinspritzung, vorausgesagt. Die Validierung mit experimentellen Daten eines PKW-Motors der Universität Stuttgart (TP1), zeigten eine gute bis sehr gute Übereinstimmung. Dennoch sind Betriebspunkte mit Saugrohreinspritzung und bei  $\lambda < 3.5$  schwieriger mit dem Mehrzonenmodell vorauszusagen. Die 3D-CFD Simulationen mit dem Conditional-Moment-Closure Ansatz weisen eine gute Übereinstimmung mit den Messwerten aus den Experimenten der Universität Stuttgart (TP1) wie auch denjenigen der HTW Dresden (TP3) auf. Das Modell ist in der Lage, die hohe Sensitivität der AGR-Rate auf die Verbrennung abzubilden. Vor allem braucht es dazu keine getrennten Zünd- und Verbrennungsmodelle, sondern eine einzige Reaktionskinetik. Das Modell kann weitgehend frei wählbare Reaktionsmechanismen verwenden, und eignet sich folglich auch für Untersuchungen von Kraftstoffen mit unterschiedlichen Zündeigenschaften.

Im experimentellen Teil wurden die Zustände im Brennraum bei Beginn der LTR (Low-Temperature-Reaction) und der HTR (High-Temperature-Reaction) bei vollhomogener n-Butan und teilhomogener n-Heptan Verbrennung untersucht. Es zeigte sich, dass im vollhomogenen Betrieb mit n-Butan die Tieftemperaturreaktion nur in einem begrenzten Bereich auftritt, insbesondere bei hohen  $\lambda$  und tiefen Temperaturen vor Kompressionsbeginn. Der Temperaturbereich bei Beginn der LTR (850 K) und HTR (ca. 1000 K) ist nur eine schwache Funktion von  $\lambda$ . Aus dem OH Signal, aufgenommen mit einer sehr hohen Aufnahme Frequenz im kHz Bereich zeigte sich, dass die homogene n-Butan Verbrennung sehr temperatursensitiv ist. Die Sensitivität der Anfangstemperatur wurde durch Rechnungen im perfekten homogenen Reaktor und mittels Multizonenmodellen bestätigt. Bei der teilhomogener Verbrennung mit n-Heptan wurde mittels der thermodynamischen Analyse der Einfluss von  $\lambda$  auf die Lage der LTR und HTR aufgezeigt. Die LTR liegt bei rund 750 K rund 100 K tiefer als bei vollhomogenem Betrieb mit n-Butan, ebenfalls in einem sehr engen Temperaturbereich, unabhängig von  $\lambda$ . Die kombinierten experimentellen und numerischen Untersuchungen im Projektteil der ETH Zürich haben nicht nur dazu beigetragen, die Grundlagen der HCCI Verbrennung für unterschiedliche Modellkraftstoffe zu verstehen, sondern in Verbindung mit den Teilprojekten der Universität Stuttgart (TP1) und der Fachhochschule Dresden (TP3) wertvolle Hinweise auf Potentiale, Grenzen und deren Ursachen für die Optimierung der motorischen Brennverfahren geliefert.

## 9. Schlussfolgerungen, Ausblick 2007

Der nahtlose Übergang vom FVV Projekt Nr. 811, „Theoretische und experimentelle Untersuchung der homogenen Dieselerbrennung“ welches freundlicherweise ebenfalls vom BFE finanziell unterstützt wurde, bietet optimale Voraussetzungen für die von der FVV hauptsächlich getragenen Projekte „Brennstoffe für homogene, selbstgezündete Verbrennungsprozesse“ und „Future Fuels for Diesel Engines, Ignition and Combustion Fundamentals“. Diese werden im Jahr 2007 starten.

## Referenzen

- [1] J.C. Hewson, "Pollutant Emissions from Nonpremixed Hydrocarbon Flames", Ph. D. Dissertation, Engineering Sciences (Mechanical Engineering), University of California, 1997
- [2] H. J. Curran, P. Gaffuri, W.J. Pitz, C.K. Westbrook, "A Comprehensive Modeling Study of iso-Octane Oxidation", *Combustion and Flame* 129:253-280 (2002)
- [3] C.E. Frouzakis, K. Boulouchos, "Analysis and Reduction of the CH<sub>4</sub>-Air Mechanism at Lean Conditions", *Combust. Sci. and Tech.*, Vol. 159, Seiten 281-303 (2000)
- [4] H.J. Curran, W.J. Pitz, C.K. Westbrook, C.V. Callahan, F.L. Dryer, "Oxidation of Automotive Primary Reference Fuels at Elevated Pressures", Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion/The Combustion Institute, 1998/pp. 379–387
- [5] G. Barroso, "Chemical Kinetic Mechanism Reduction, Multizone and 3D-CRFD Modelling of Homogeneous Charge Compression Ignition Engines", Diss. ETH No. 16437, Zürich, 2006
- [6] Y. M. Wright, "Numerical investigation of turbulent spray combustion with Conditional Moment Closure", Dissertation No. 16386, ETH Zürich, 2005
- [7] Iida N., Igarashi T., "Auto-ignition and combustion of n-Butane and DME / Air Mixtures in a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine", Society of Automotive Engineering, SAE 2000-01-1832, 2000
- [8] Igarashi T., "Study on Auto-ignition and combustion completion of n-Butane in a two-stroke Homogeneous Charge Compression Ignition", Keio University Graduated School, department of science and technology, 2002
- [9] Y. Yamasaki, "Numerical Analysis of Auto Ignition and Combustion of n-Butane and Air Mixture in The Homogeneous Charge Compression Ignition Engine by Using Elementary Reactions", The Fifth International Symposium on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA 2001), July 1–4, 2001, Nagoya
- [10] G. Barroso, A. Escher, K. Boulouchos, "Experimental and Numerical Investigations on HCCI-Combustion", SAE Naples Section, ICE 2005, 7th International Conference on Engines for Automobile, Capri (Italy), September 2005, Paper 87
- [11] F. Mauss, M. Kraft, P. Maigaard, M. Christensen, B. Johansson, "Investigation of Combustion Emissions in a Homogeneous Charge Compression Ignition Engine: Measurements and a New Computational Model", *Proc. Comb. Inst.*, 28, 1195, 2000