

Jahresbericht 2003, 10. Dezember 2003

Projekt

Erarbeitung von Grundlagen für innovative Brennverfahren und motorische Arbeitsprozesse

Autor und Koautoren	G. Barroso, A. Escher, K. Boulouchos
beauftragte Institution	Labor für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme IET / ETHZ
Adresse	Clausiusstr. 33, ETH Zentrum / CLT B 4, 8092 Zürich
Telefon, E-mail, Internetadresse	01 632 75 34, barroso@lav.mavt.ethz.ch , www.lav.ethz.ch
BFE Projekt-/Vertrag-Nummer	Projekt-Nr. 40070, Verfügung Nr. 79887
Dauer des Projekts (von – bis)	1. September 2000 – 31. August 2003

ZUSAMMENFASSUNG

Dieselfahrzeuge emittieren bei vergleichbaren Fahrleistungen bis zu 25 % weniger CO₂ als Benzinfahrzeuge. Der grosse Nachteil der Dieselmotoren sind die Stickoxid- und die Russemissionen. Dank dem 3-Weg-Katalysator sind die Emissionen bei betriebswarmen Ottomotoren praktisch an der Nachweisbarkeitsgrenze [8]. Wegen der überstöchiometrischen Verbrennung bei Dieselmotoren ist dessen Abgasnachbehandlung komplexer und kostenintensiver. Aus Rücksicht auf die Luftbelastung mit dem ozonfördernden Stickoxid und den lungengängigen Partikelemissionen kann zur Zeit das Potential des Dieselmotors zur Einhaltung des Kyotoabkommens noch nicht ausgeschöpft werden.

Werden jedoch magere, homogene Luftkraftstoffgemische (ob Benzin, Diesel oder Gase) in kompressionsgezündete Verbrennungskraftmaschinen umgesetzt, so führt dies zu tiefen Stickoxid- und Russemissionen. Der Wirkungsgrad dieses Brennverfahrens ist mit dem eines herkömmlichen Dieselmotors vergleichbar [9].

Die Arbeiten in diesem Jahr umfassten weiterführende Analysen der Gemischaufbereitung mit Dieseleinspritzsystemen [1, 2, 3]. Diese Arbeit baut auf der bereits im zweiten Forschungsjahr begonnenen Validierung der Simulation. Die Gemischaufbereitung ist für die homogene kompressionsgezündete Verbrennung wichtig, da das Gemisch vor der Entzündung aufbereitet sein muss. Im weiteren darf der Kraftstoff die Brennraumwand nicht benetzen.

Ein zweiter Schwerpunkt lag bei der Berechnung der Entzündung mit detaillierter Verbrennungschemie. Die Ergebnisse flossen in das internationale Forschungsprojekt „homogene Dieselerverbrennung“ der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV, Deutschland). Die FVV finanziert zusätzlich zum BFE dieses Projekt. Dazu wurden Berechnungen mit n-Butan und n-Heptan als Kraftstoff durchgeführt. Zur Validierung wurden sowohl Daten aus der Literatur [10] wie auch experimentelle motorische Daten unserer Forschungspartner herangezogen [11]. Es zeigte sich, dass die Druckverläufe magerer homogener kompressionsgezündeter mit n-Butan betriebenen Motoren vernünftig wiedergegeben werden konnten. Das verwendete Modell für die motorischen Berechnungen basierte auf *CHEMKIN* [26] und erlaubte nur Berechnungen mit ideal homogenen Brennräumen. In realen Motoren sind jedoch Temperatur- wie auch Spezieskonzentrationsgradienten zu erwarten. Aus diesem Grunde werden im nächsten Jahr die Reaktionsmechanismen reduziert (um den Rechenaufwand in einem vernünftigen Rahmen zu halten) und dies mit dem CMC-Ansatz für turbulente Verbrennung gekoppelt. Es wird erwartet, dass dieser Modellierungsmehraufwand zu besseren Vorausberechnungen führen wird. Jedoch ist sowohl die Reduktion der Reaktionsmechanismen wie auch die Implementierung des Verbrennungsmodells anspruchsvoll. Aus diesem Grunde muss genügend Zeit für diese Arbeiten einkalkuliert werden.

Projektziele

Die Kompressionszündung homogener magerer Gemische (Homogeneous Charge Compression Ignition, HCCI) ermöglicht eine markante Reduktion der Stickstoff- wie auch Russemissionen [4]. Es ist jedoch eine grosse Herausforderung den gewünschten Homogenitätsgrad vor Zündbeginn herzustellen, ohne dabei zu hohe HC-Emissionen, zu hohe Druckanstiege und die damit verbundenen Lärmemissionen zu verursachen. Eine weitere Schwierigkeit ist den Brennbeginn mit genügender zyklischen Stabilität herbeizuführen. Die Modellierung der Gemischaufbereitung, Entzündung und Verbrennung erfordert ein vertieftes Verständnis dieser Prozesse und kann sogleich einen wesentlichen Beitrag zur Gesamtprozessverbesserung liefern. Das ehrgeizige Ziel dieses Projektes ist, die Gemischaufbereitung, die Entzündung, die Verbrennung sowie die NO_x -Emissionen von homogen betriebenen kompressionsgezündeten Motoren vorrauszuberechnen und somit einen wesentlichen Beitrag zur Entwicklung eines HCCI Motors zu leisten.

Durchgeführte Arbeiten und erreichte Ergebnisse

Aufbauend auf den Ergebnissen und Erfahrungen vom Jahr 2002 wurde in diesem Jahr die Untersuchungen der Modellierung der Gemischaufbereitung vertieft. Die Rechnungen wurden mit Messungen an der laboreigenen Hochdruck-Temperaturzelle validiert [12]. Im 2003 wurde unter anderem der Einfluss der Initialisierung der Turbulenzgrössen (turbulentes Längenmass respkt. Zeitmass) auf das Verhalten des Sprays untersucht. In den Abbildungen 1 bis 4 ist ersichtlich, dass eine unterschiedliche Initialisierung der Turbulenzgrössen zu unterschiedlichem Sprayverhalten führt. Die turbulente Viskosität ist proportional zu κ^2/ϵ . Je höher diese ist, je geringer ist die Penetration der Sprayspitze. Problematisch ist dies bei Berechnungen in einer Konstantvolumenzelle. Die Turbulenzkenngrössen werden meistens mit null initialisiert, was physikalisch durchaus vertretbar ist. Jedoch kann diese Initialisierung zu numerischen Singularitäten führen. Eine direkte Folge davon ist die unerwartete Zeitschrittabhängigkeit der Ergebnisse wählt man für die Initialisierung von κ und ϵ null.

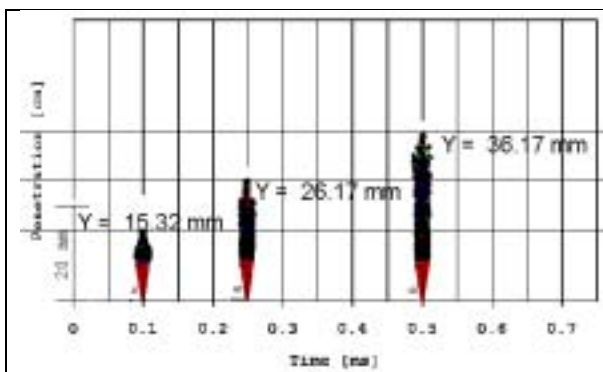


Abb. 1: Einfluss der Turbulenzgrössen auf das Verhalten des Sprays ($\kappa_{\text{ini}} = 0 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\epsilon_{\text{ini}} = 0 \text{ m}^2/\text{s}^3$, $\mu_t = 9.6 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$)

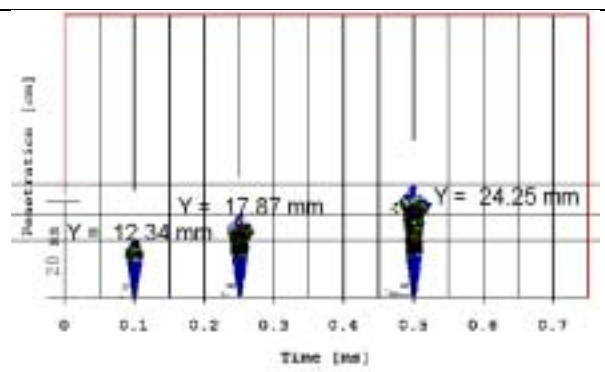


Abb. 2: Einfluss der Turbulenzgrössen auf das Verhalten des Sprays ($\kappa_{\text{ini}} = 0.1 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\epsilon_{\text{ini}} = 0.05 \text{ m}^2/\text{s}^3$, $\mu_t = 6.5 \cdot 10^{-1} \text{ m}^2/\text{s}$)

Im weiteren zeigte sich, dass das Ergebnis auch von der Orientierung des Sprays gegenüber der numerischen Zelle abhängig ist. So ist bei einer Einspritzung parallel zur numerischen Zelle die numerische Viskosität geringer und der Spray penetriert weiter als bei einer Einspritzung diagonal zur Ausrichtung der Zelle (Abb. 5). Aus diesem Grunde muss die Validierung und die Berechnung mit dem gleichen numerischen Netz gemacht werden. Berücksichtigt man diese Sensitivitäten so

sind durchaus gute Simulationen von Sprays zu machen. In Abbildung 6 ist der Vergleich eines gerechneten mit dem simulierten Spray ersichtlich. Es handelt sich um einen verdampfenden Fall mit hohem Einspritzdruck ($p_{inj} = 1300 \text{ bar}$).

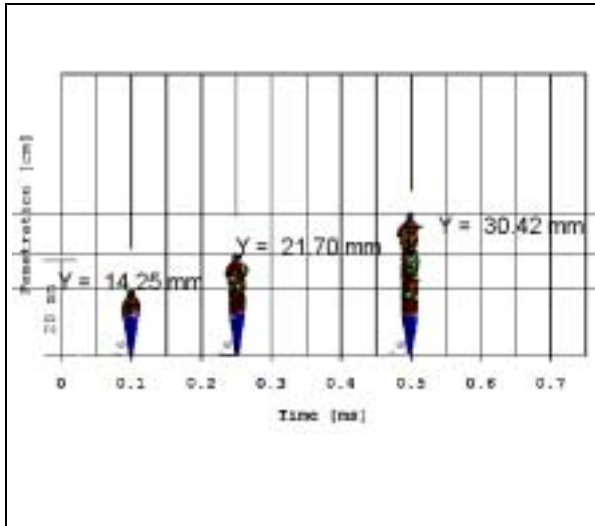


Abb. 3: Einfluss der Turbulenzgrößen auf das Verhalten des Sprays ($\kappa_{ini} = 10 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\epsilon_{ini} = 4000 \text{ m}^2/\text{s}^3$, $\mu_t = 7.2 \cdot 10^{-3} \text{ m}^2/\text{s}$)

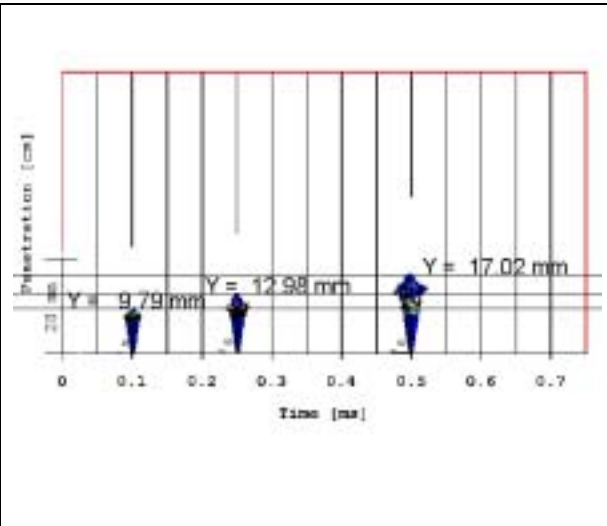


Abb. 4: Einfluss der Turbulenzgrößen auf das Verhalten des Sprays ($\kappa_{ini} = 10 \text{ m}^2/\text{s}^2$, $\epsilon_{ini} = 50 \text{ m}^2/\text{s}^3$, $\mu_t = 1.4 \cdot 10^{-1} \text{ m}^2/\text{s}$)

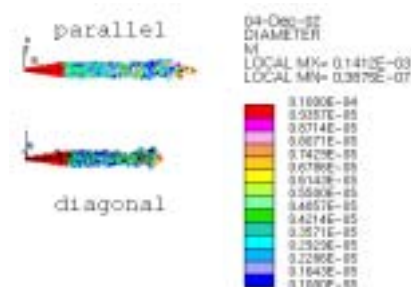


Abb. 5: Einfluss der Sprayorientierung auf das Sprayverhalten

Ein weiterer sehr wichtiger Punkt der hilft das Verständnis zu erweitern, ist der Austausch an wissenschaftlichen Konferenzen [1, 2, 3].

Für motorische Applikationen ist eine Sensitivitätsanalyse in motorischen Umgebungen aussagekräftiger. Aus diesem Grunde wurden auch Sensitivitätsanalysen der Sprayparametern auf den Brennverlauf gemacht [6]. Es wurde gezeigt, dass die Sprayparameter (v.a. Spraywinkel) einen sehr grossen Einfluss auf die Wärmefreisetzung und den Druckverlauf haben. So konnte mit einer Erhöhung des halben Spraywinkels auf 20° eine wesentlich bessere Übereinstimmung der Rechnung mit dem Experiment erreicht werden (Abb. 7). Dies zeigt, wie sensitiv die Verbrennung auf den Spray reagiert.

Die herkömmliche Vorgehensweise benutzte für die Entzündung das Shell-Ignition Modell. Die Verbrennung wurde danach mit einem „Charakterischen Zeiten Modell“ berechnet. Diese Modelle zeigten bereits bei herkömmlichen Dieselfahren schwächen. Um eine gute Übereinstimmung mit gemessenen Daten, in diesem Fall waren es Daten aus dem laboreigenen Einzylinderdieselmotor [13], mussten Modellparameter „getunt“ werden. Es wurde der Einfluss der Last auf die optimalen Verbrennungsparameter untersucht [5]. Der grosse Nachteil dieser herkömmlichen Modelle, ist dass die Entzündung und die Verbrennung entkoppelt betrachtet werden. Das Shell-Zündmodell berechnet den zeitlichen Verlauf der Konzentrationen von generischen Radikalen [14]. Die chemischen Reaktionen während der Zündung führen zu einer Wärmefreisetzung. Das Verbrennungsmodell wird eingeschaltet, wenn entweder in einer Rechenzelle ein Temperaturgradient oder eine absolute Temperatur überschritten wird [15]. Eine berechnete zu frühe Zündung im Vergleich zum Experiment kann entweder eine Schwäche des Zündmodells oder aber eine Folge des zu starken Multiplikators (Parameter A) im Verbrennungsmodell sein. Im weiteren, ist dieses

Zündmodell nur für Dieseldraftstoff optimiert. Wechselt man den Kraftstoff oder ändert man die Cetanzahl (Kennzahl für die Zündwilligkeit von Dieseldraftstoff) so müssten theoretisch die Zündmodellkonstanten neu kalibriert werden. Diese Möglichkeit bietet *StarCD* jedoch nicht. Die einzigen Einstellparametern sind die Temperatur respektive der Temperaturgradient bei dem vom Zünd- auf das Verbrennungsmodell umgeschaltet wird und die Oktanzahl. Betrachtet man Zündvorgänge, so steigt die Temperatur nach der Entzündung sehr stark an. Aus diesem Grunde ist die Steuerbarkeit mit der Temperatur oder dem Temperaturgradienten beschränkt. Die Oktanzahl ändert den kompletten Datensatz der Modellparameter. Zur Wahl stehen jedoch nur drei Oktanzahlen. Wobei eine die Parameterwahl für Diesel ist, die anderen zwei eher für die Simulation von „Klopfen“ bei Ottomotoren geeignet sind.

Der genaueste und allgemeinste Lösungsansatz für die Berechnung der Verbrennung in Verbrennungsmotoren wäre die Lösung der kompletten Chemie in jeder Zelle. Mit herkömmlichen RANS 3D-CRFD Modellen werden die Massenerhaltungsgleichung, die Impulsgleichung, die Energieerhaltungsgleichung, die Erhaltungsgleichung für die turbulente kinetische Energie, die Erhaltungsgleichung für die Dissipationsrate und jeweils eine Erhaltungsgleichung für jede Spezies gerechnet.

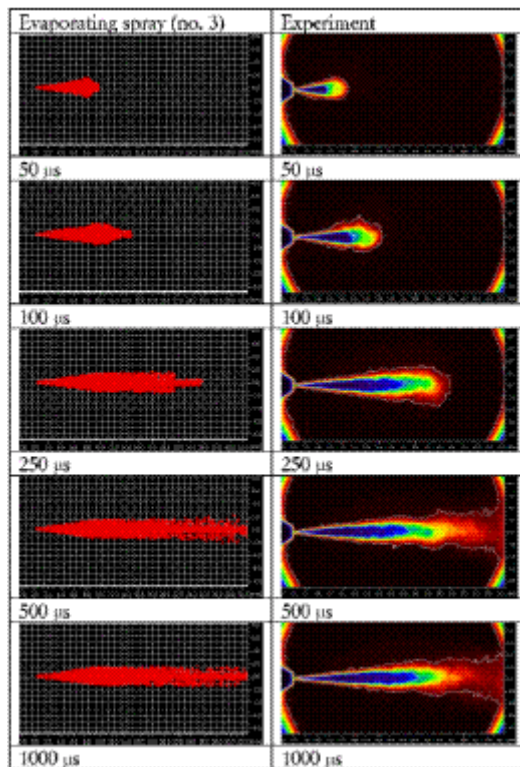


Abb. 6: Sprayvisualisierung des gerechneten (links) und des gemessenen Falles (rechts)

Für jede weitere Spezies (im Falle von reduzierten Reaktionsmechanismen für höhere Kohlenwasserstoffe können diese mehr als 50 sein [18]) muss eine separate Erhaltungsgleichung gelöst werden. Folglich steigt der Rechenaufwand „nur“ wegen den Transportgleichungen für jede Spezies bereits linear mit dessen Anzahl. Dazu würde die weitaus rechenintensivere Lösung der Reaktionskinetik in jeder Zelle kommen. Zum Schluss bräuchte es weiterhin einen Ansatz, mit dem der Einfluss der Turbulenz auf die Brennrate modelliert würde, da mit den verwendeten Fluidgleichungen nur die zeitlich gemittelten Gasgeschwindigkeiten berechnet werden. Die für die Verbrennung wichtige Fluktuation dieser jedoch nicht. Geht man davon aus, dass für die Berechnung von 30° KW während der Verbrennung mit konventioneller Modellierung (9 Spezies: N₂, O₂, C₁₂H₂₆, CO₂, H₂O, NO, Radikal 1, Radikal 2, Radikal 3, 45000 Zellen im OTP) auf einem P4 (1.8 GHz) ungefähr 18 Stunden gebraucht werden, so ist leicht abzuschätzen, dass der Rechenaufwand mit detaillierter Chemie nicht

vertretbar ist. Aus diesem Grunde wurde in diesem Jahr erste „Gehversuche“ mit dem CMC-Verbrennungsmodell (Conditional Moment Closure) gemacht [7]. Dieses Modell ermöglicht die

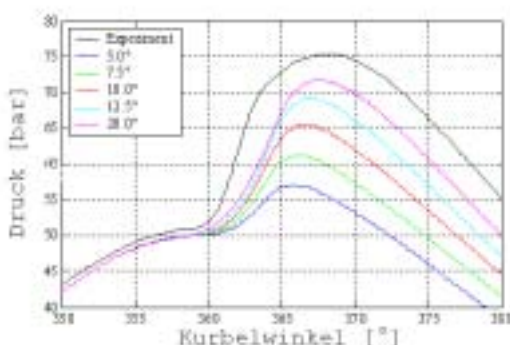


Abb. 7: Einfluss des Strahlwinkels auf den Druckverlauf (Liebherr Motor, 25% Last, $p_{inj} = 700$ bar, SOI = 8 BTDC)

Berechnung der Verbrennung mit reduzierter Chemie [16], braucht jedoch für den Transport nur den Mischungsbruch und dessen Varianz. (Im Flowsolver wird der Transport der zusätzlichen chemischen Spezies nicht gerechnet). Anstatt die Reaktionskinetik in jeder einzelnen Zelle zu lösen, wird diese in einer exemplarischen Zelle gelöst, genannt Mixture-Fraction Space. Die Ergebnisse für die anderen Zellen werden aus dem Mischungsbruch, dessen Varianz und einer PDF ermittelt. Ein weiterer Vorteil dieses Modells ist, dass nur noch ein Modell für

die Entzündung und die Verbrennung existiert. Die Reaktionskinetik könnte auch mit einer Russ-Kinetik erweitert werden. Wechselt man den Kraftstoff, so braucht es theoretisch „nur“ einen entsprechenden Reaktionsmechanismus und die Berechnung benötigt keine Zeitintensive Einstellung der Modellparameter.

Dieses weit komplexere Verbrennungsmodell hat jedoch den Nachteil, dass die Berechnung trotz geringerer räumlicher Auflösung (in diesem Fall wurde ein Netz mit 8000 Zellen im OTP gewählt) und reduzierter Chemie bis zu acht Tage dauern kann [7]. Erste vorläufige Ergebnisse zeigten (dank einem Temperaturkorrekturterm) vernünftige Ergebnisse für die Tieflastpunkte (Abb. 8). Der Betriebspunkt mit 75 % Last konnte leider noch nicht zufriedenstellend gerechnet werden (Abb. 9). Im nächsten Jahr wird vertieft an der Weiterentwicklung dieses Modells gearbeitet werden.

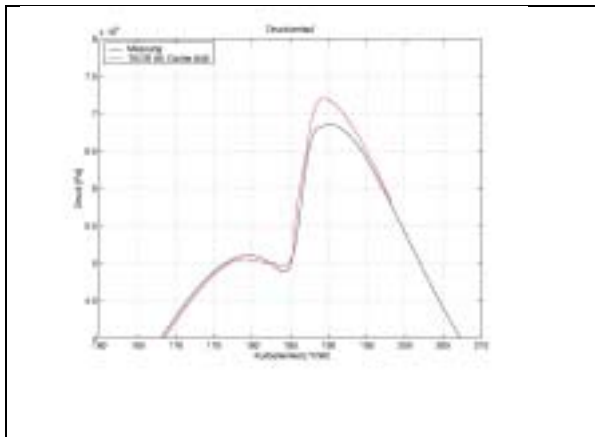


Abb. 8: Berechnung des Druckverlaufes bei 25% Last mit dem CMC-Ansatz (Liebherr Motor, $p_{inj} = 900$ bar, SOI = 3 BTDC, 1180 U/min)

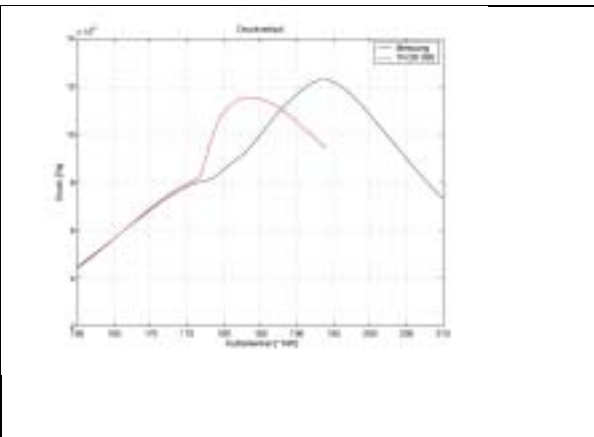


Abb. 9: Berechnung des Druckverlaufes bei 75% Last mit dem CMC-Ansatz (Liebherr Motor, $p_{inj} = 700$ bar, SOI = 7 BTDC, 1180 U/min)

Der dritte Schwerpunkt dieses Projektes in diesem Jahr betraf, die Validierung von Reaktionsmechanismen alternativer Kraftstoffe. Die Selbstzündwilligkeit des idealen HCCI-Kraftstoffes liegt zwischen dem von Benzin und Diesel. Aus diesem Grunde wurden sowohl n-Heptan wie auch n-Butan als Modellkraftstoffe verwendet. Unterschiedliche Reaktionsmechanismen wurden verglichen. Für n-Butan standen auch experimentelle Ergebnisse der Universität Stuttgart für einen kleinen PKW-Common-Rail-DI-Dieselmotor zur Verfügung [11].

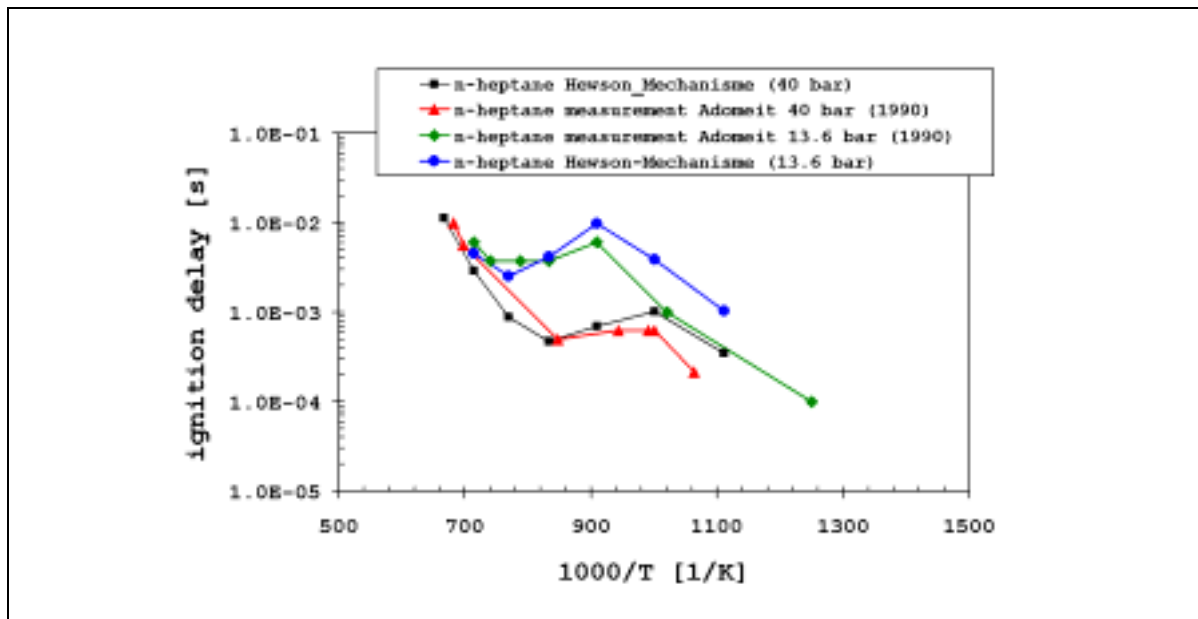


Abb. 10: Validierung des Zündverzuges stöchiometrischer n-Heptan-Luft-Gemische mit Experimenten von Adomeit [10]

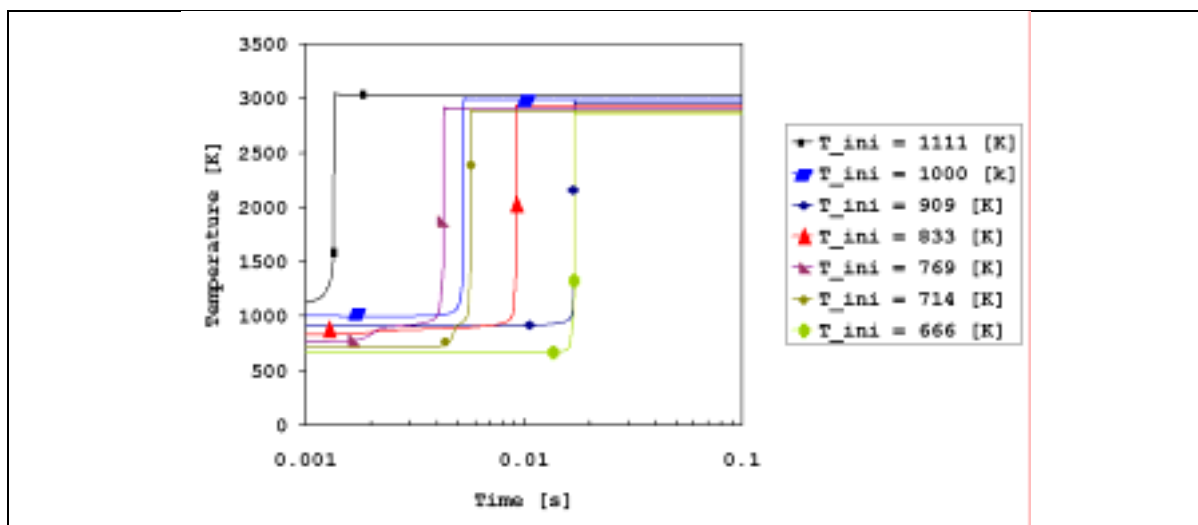


Abb. 11: Temperaturverlauf von stöchiometrischen n-Heptan-Luft-Gemischen mit unterschiedlichen Anfangstemperaturen in einer konstantvolumen Umgebung

Der berechnete Zündverzug stöchiometrischer n-Heptan-Luft-Gemische zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment (Abb. 10). Im weiteren wird der negative Temperaturverlauf sehr gut wiedergegeben. In Abbildung 11 ist die zweistufige Zündung von n-Heptan im NTR ersichtlich.

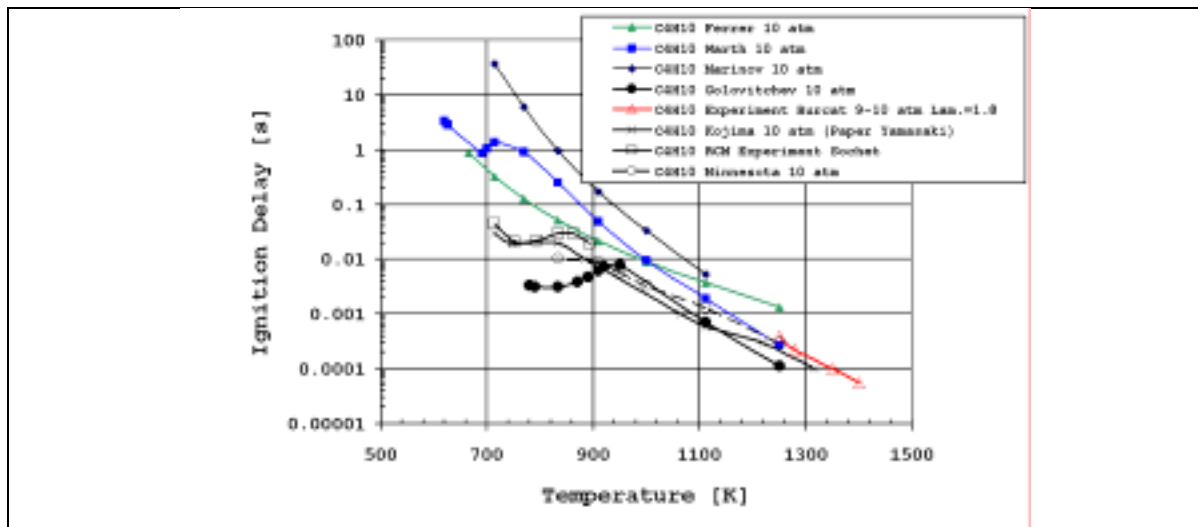


Abb. 12: Berechnung des Zündverzuges stöchiometrischer n-Butan-Luft-Gemische in einem Konstantvolumen bei 10 atm mit unterschiedlichen Reaktionsmechanismen bei

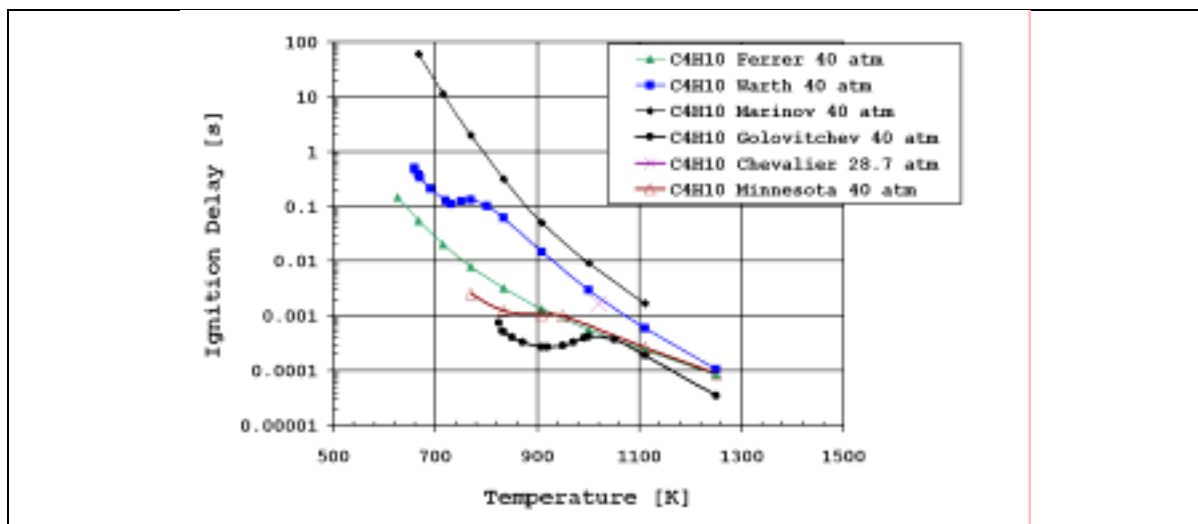


Abb. 13: Berechnung des Zündverzuges stöchiometrischer n-Butan-Luft-Gemische in einem Konstantvolumen bei 40 atm mit unterschiedlichen Reaktionsmechanismen

Der Zündverzug von n-Butan, der durch die unterschiedlichen Butan-Reaktionsmechanismen wiedergegeben wird, variiert sehr stark (Abb. 12 und 13). Das erwartete negative Temperaturverhalten zeigten die Mechanismen von Warth et al. [19,23] (167 Spezies, 797 Reaktionen), welches durch die Software EXGAS generiert wurde, derjenige von Kojima [19,24,25] (161 Spezies und 797 Reaktionen), derjenige von Golovitchev [21] (67 Spezies, 360 Reaktionen) und derjenige von Minnesota [22] (385 Spezies, 1895 Reaktionen). Der Warth Mechanismus zeigte in motorischen Simulationen keine Zündung (Abb. 14).

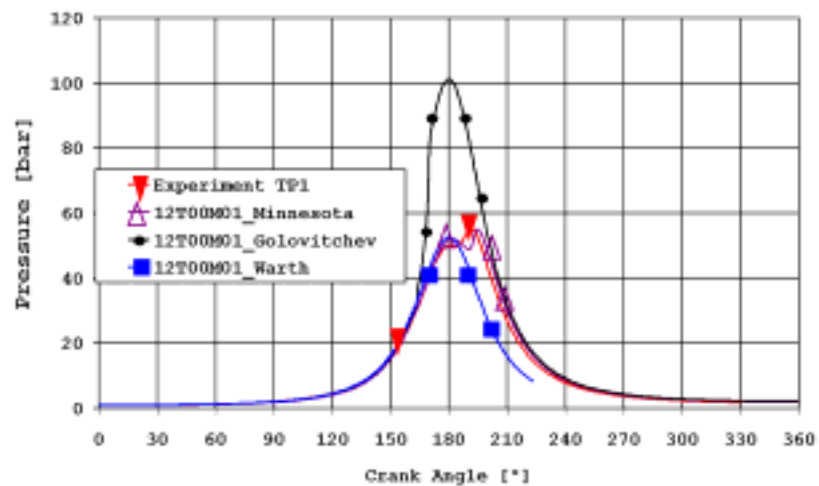


Abb. 14: Vergleich der gerechneten Druckverläufe mit dem Experiment bei homogenem überstöchiometrischem n-Butan Betrieb für unterschiedliche Reaktionsmechanismen (Betriebspunkt: 12t00m01, $m_L = 640$ mg/ASP, $m_B = 10.8$ mg $\pm$ 1.5 mg, 1200 U/min, $T_{\text{Ansaugluft}} = 25$ °C; $\lambda \approx 3.8$)

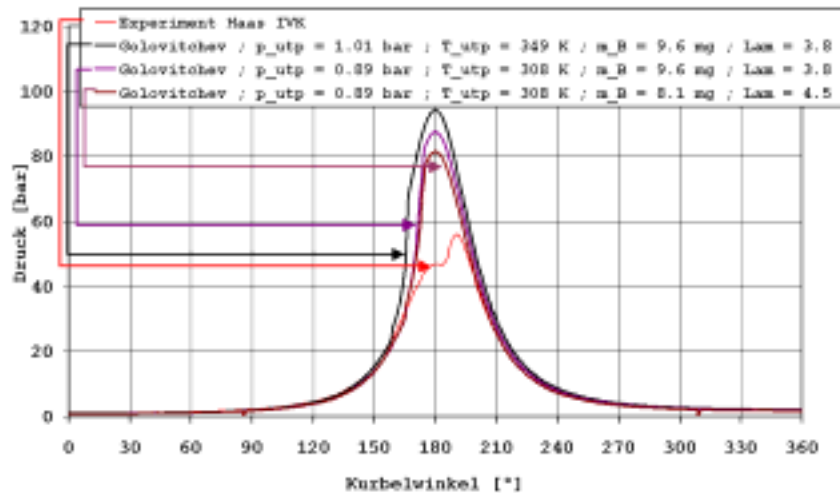


Abb. 15: Gerechnete vs. gemessene Druckverläufe; Golovitchev Reaktionsmechanismus; Sensitivitätsuntersuchung (Betriebspunkt: 12t00m09, $m_L = 568$ mg/ASP, $m_B = 9.6$ mg $\pm$ 1.5 mg, 1200 U/min, $T_{\text{Ansaugluft}} = 75$ °C; $\lambda \approx 3.8$)

Der Golovitchev-Mechanismus zündete zu früh. Die verwendete Messtechnik unseres Projektpartners (Universität Stuttgart) hatte laut ihren Angaben eine Messungenauigkeit der Kraftstoffmassemessung von bis zu ungefähr 15%. Eine weitere Schwierigkeit, ist dass ohne genaue Masseangaben und ohne genaues Wissen der Wandwärmeverluste, des Blowby des Gemisches welches gegen Ende der Kompression in den Feuersteg verdrängt wird, der berechnete Zustand bei Kompressionsbeginn fehlerbehaftet sein kann. Aus diesem Grunde wurde eine Sensitivitätsanalyse bezüglich den Anfangsbedingungen gemacht. So wurde das Lambda, der Kompressionsbeginndruck und die Kompressionsbeginntemperatur im gegebenen potentiellen Fehlerbereich variiert. Der Golovitchev Mechanismus zündete jedoch weiterhin zu früh.

Der Minnesota-Mechanismus zeigte in beiden Betriebspunkten eine sehr gute Übereinstimmung (Abb. 16 und 17). Es fiel jedoch auf, dass die Kraftstoffmasse am oberen Limit des angegebenen Fehlerbereiches gewählt werden musste, um eine gute Übereinstimmung zu erzielen.

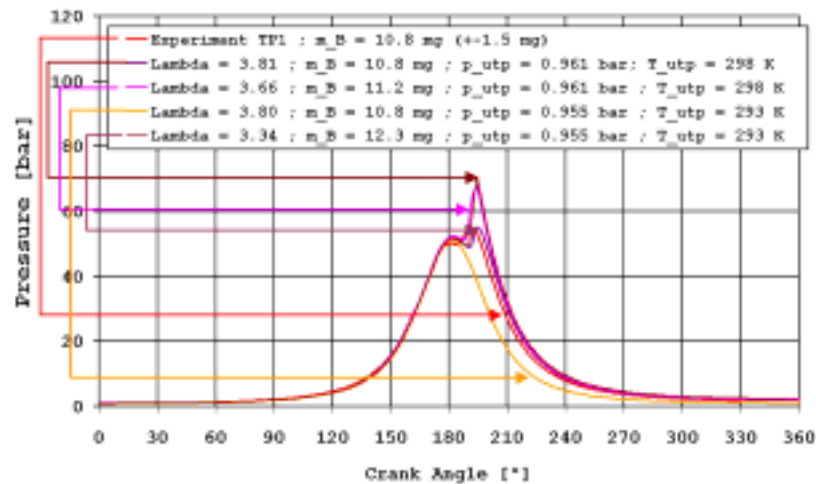


Abb. 16: Gerechnete vs. gemessene Druckverläufe; Minnesota Reaktionsmechanismus; Sensitivitätsuntersuchung (Betriebspunkt: 12t00m01, $m_L = 640 \text{ mg/ASP}$, $m_B = 10.8 \text{ mg} \pm 1.5 \text{ mg}$, 1200 U/min, $T_{\text{Ansaugluft}} = 25 \text{ °C}$; $\lambda \approx 3.8$)

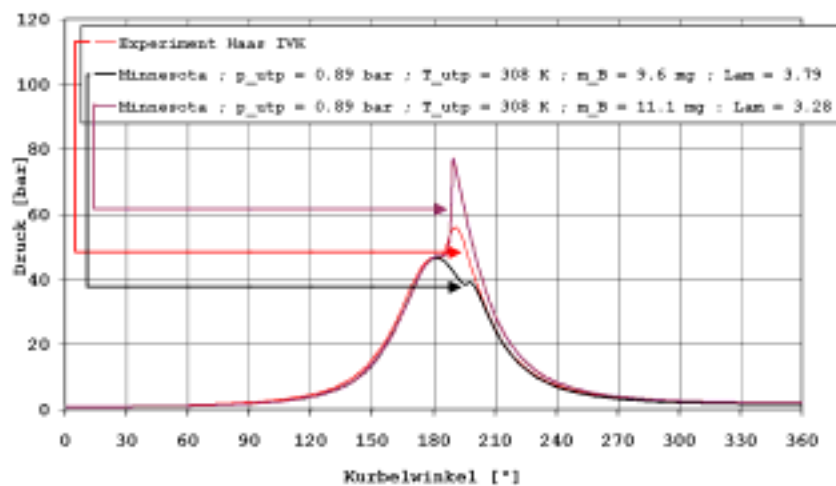


Abb. 17: Gerechnete vs. gemessene Druckverläufe; Minnesota Reaktionsmechanismus; Sensitivitätsuntersuchung (Betriebspunkt: 12t00m09, $m_L = 568 \text{ mg/ASP}$, $m_B = 9.6 \text{ mg} \pm 1.5 \text{ mg}$, 1200 U/min, $T_{\text{Ansaugluft}} = 75 \text{ °C}$; $\lambda \approx 3.8$)

Internationale Zusammenarbeit

Das Laboratorium für Aerothermochemie der ETH Zürich bearbeitet ein Teilprojekt des Forschungsvorhaben „homogene Dieselverbrennung“ der deutschen Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV). Dieses Projekt startete im März 2003. Nebst dem LAV/ETH beteiligen sich am Projekt die Universität Stuttgart (Deutschland), die Technische Universität Braunschweig (Deutschland) und die Hochschule für Wirtschaft und Technik Dresden (Deutsch-

land). Der Beitrag des LAV betrifft, ein genaueres Verständnis der Selbstzündung von Kraftstoffen zu erarbeiten. Zu diesem Zweck wird die Simulation als Auslegungsinstrument verwendet. Es ist geplant mit der bestehenden HDTZ experimentelle Informationen für die Gemischbildung zu gewinnen. Im weiteren soll eine Schnellverdichtungsapparatur miteinbezogen werden, um die genauen Selbstzündmechanismen zu verstehen.

Bewertung 2003 und Ausblick 2004

Im Berichtsjahr wurde die ausführliche Validierung der Zweiphasenströmung weitergeführt. Die Ergebnisse wurden publiziert und konnten an Fachkonferenzen präsentiert und diskutiert werden [1, 2, 3]. Es zeigte sich, dass für eine quantitativ richtige Berechnung der Zweiphasenströmung viel Erfahrung nötig ist. Die Spraypenetration ist enorm stark von der Netzauflösung abhängig. Ein feineres Netz führt zu höheren Gasgeschwindigkeiten und dadurch zu einer weiteren Spraypenetration. Im weiteren sind die Berechnungen extrem sensitiv auf die Turbulenzkenngrößen (integrales Längenmass l_i und turbulente Viskosität μ_t [1]). Dies ist vor allem bei einer konstant Volumen-geometrie die mit „ruhemdem“ Zustand initialisiert wird ($\kappa = 0 \text{ m}^2/\text{s}^2$; $\varepsilon = 0 \text{ m}^2/\text{s}^3$) problematisch, da diese Initialisierung zu undefiniertem l_i und μ_t führt. Berechnungen mit motorischen Turbulenzgrößen haben bei Einspritzbeginn physikalisch sinnvolle Werte für l_i und μ_t und führen somit zu vertrauensvolleren Ergebnissen.

Eine vielversprechende Alternative zu herkömmlichen Zweiphasenmodellen scheint die Euler-Euler Beschreibung zu sein [17].

In motorischen Berechnungen zeigte sich ebenfalls eine Abhängigkeit der Netzauflösung. Die Brennrate ist von der turbulenten kinetischen Energie abhängig und diese ist bei Zweiphasenströmungen abhängig von der Netzauflösung.

Im weiteren wurden erste „Gehversuche“ mit dem CMC-Verbrennungsmodell gemacht. Dabei kamen einige „Kinderkrankheiten“ zum Vorschein. Diese betrafen vor allem die Stabilität und die Verdampfungsenthalpie. Der Code ist noch nicht generisch für andere Kraftstoffe einsetzbar. Dies wird der Schwerpunkt für das nächste Forschungsjahr sein. Zur Validierung der Ergebnisse werden Experimente des Projektpartners (Universität Stuttgart) gewählt werden.

Die Berechnungen homogener Reaktoren dienen vorerst zur Validierung von Reaktionsmechanismen. Der n-Heptan Mechanismus von Hewson zeigte im untersuchten Bereich eine sehr gute Übereinstimmung mit Experimenten. Die Unterschiede zwischen den n-Butan Mechanismen waren beträchtlich. Der Minnesota-Mechanismus schien die beste Übereinstimmung mit motorischen Daten zu haben. Dieser Mechanismus ist jedoch zu rechenaufwändig (385 Spezies, 1895 Reaktionen) und muss im nächsten Jahr reduziert oder allenfalls durch einen einfacheren Ansatz ersetzt werden. Eine Reduktion ist jedoch vorzuziehen, weil bei einem generischen Ansatz, wie zum Beispiel das Shellmodell, die Massenerhaltung und die Wahl der Reaktionsenthalpien jeder einzelnen Zwischenreaktion schwierig ist. Die freiwerdende Energie bei jeder Reaktion trägt zur Erwärmung des Systems bei, was einen grossen Einfluss auf den Zündverzug haben kann.

Wir gehen davon aus, dass Mitte 2004 es möglich sein wird, die homogene magere kompressionsgezündete Verbrennung mit einem reduzierten n-Butan- bzw. n-Heptan-Mechanismus als Kraftstoff in einem 3D-Netz zu berechnen. Das Netz sollte möglichst ähnlich zum verwendeten Einzylindermotor in der Universität Stuttgart sein, um dessen Ergebnisse für die Validierung benutzen zu können. Die noch bestehenden Probleme des CMC-Verbrennungs-codes (mit n-Heptan als Kraftstoff) bezüglich der Verdampfungsenthalpie und der Stabilität sollten bis Mitte nächsten Jahres ebenfalls gelöst sein. An der Verdampfungsenthalpie wird zur Zeit in einem parallelen Projekt gearbeitet.

Referenzen

- [1] G. Barroso, B. Schneider, K. Boulouchos, **"An Extensive Parametric Study on Diesel Spray Simulation and Verification with Experimental Data"**, Society of Automotive Engineering, SAE 2003-01-3230, 2003.
- [2] G. Barroso, B. Schneider, K. Boulouchos, **"Analyzing Simulation of Diesel Sprays and Verification with Experimental Data"**, Proceedings, 4th Symposium Towards Clean Diesel Engines Mierlo, The Netherlands, June 5th and 6th, 2003.
- [3] G. Barroso, B. Schneider, K. Boulouchos, **"Experimental and Numerical Analysis of Diesel-Sprays in a High Temperature and High Pressure Cell"**, Proceedings, Swiss ERCOFTAC Pilot Centre, Joint Annual Meeting Paul Scherrer Institute, Switzerland, 26th May 2003
- [4] G. Barroso, K. Boulouchos, **Literaturrecherche zur homogenen Kompressionszündung dieselmotorischer Kraftstoffe**, Bericht ETH/IET/LVV Nr. 01/03, 2001
- [5] A. Lehner, **"Simulation des Brennverlaufs bei dieselmotorischer Verbrennung"**, Semesterarbeit, Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 2003
- [6] M. Tschopp, **"Sensitivitätsanalyse der Gemischbildung bei Dieselmotoren"**, Semesterarbeit, Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 2003
- [7] S. Henggeler, **"Simulation der Entzündung und Verbrennung von Dieselmotoren"**, Semesterarbeit, Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, 2003
- [8] C. Lämmle: **Clean-Engine-Vehicle**, Wissenschaftliches Seminar ETH Zürich, 2003 (weitere Informationen zu beziehen bei laemmle@lav.mavt.ethz.ch)
- [9] S. Kimura, O. Aoki, Y. Kitahara, E. Aiyoshizawa, **"Ultra-Clean Combustion Technology Combining a Low-Temperature and Premixed Combustion Concept for Meeting Future Emission Standards"**, Society of Automotive Engineering, SAE 2001-01-0200, 2001.
- [10] G. Adomeit, H. Ciezki, Kolloquium des SFB 224, 24. - 25. Sept. 1990
- [11] S. Haas, M. Bargende, FVV-Vorhaben Homogene Dieselerbrennung, Teilprojekt PKW, 2. Arbeitskreissitzung, 5. / 6. November, 2003
- [12] B. Schneider, **"Experimentelle Untersuchungen zur Spraystruktur in transienten, verdampfenden und nicht verdampfenden Brennstoffstrahlen unter Hochdruck"**, Ph. D. Dissertation, Technische Wissenschaften, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Nr. 15004, 2003
- [13] R. Schubiger, **"Untersuchungen zur Russbildung und -oxidation in der dieselmotorischen Verbrennung: Thermodynamische Kenngrößen, Verbrennungsanalyse und Mehrfarbenendoskopie"**, Ph. D. Dissertation, Technische Wissenschaften, Eidgenössische Technische Hochschule Zürich, Nr. 14445, 2002
- [14] StarCD Version 3.10A, **Methodology**, 1999
- [15] StarCD Special Training Course, **Diesel Engine Spray and Combustion Simulations with StarCD**, 2001
- [16] E. Mastorakos, Y. Wright, **"Simulations of Turbulent Spray Autoignition with Elliptic Conditional Moment Closure"**, European Combustion Meeting Proceedings, Orleans, France, October 2003.

- [17] Ch. Krueger, **“Validierung eines 1D-Spraymodells zur Simulation der Gemischbildung in direkteinspritzenden Dieselmotoren”**, Ph. D. Dissertation, Fakultät für Maschinenwesen, Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, Deutschland, 2001
- [18] J.C. Hewson, **“Pollutant Emissions from Nonpremixed Hydrocarbon Flames”**, Ph. D. Dissertation, Engineering Sciences (Mechanical Engineering), University of California, San Diego, USA, 1997
- [19] V. Warth, N. Stef. P.A. Glaude, F. Battin-Leclerc, G. Scacchi, G.M. Côme, **“Computer-Aided Derivation of Gas-Phase Oxidation Mechanisms: Application to the Modelling of the Oxidation of n-Butane”**, Combustion and Flame 114:81-102, 1998
- [20] Sh. Kojima, private communication, Toyota Central R&D Labs., Inc. Nagakute, Aichi, Japan
- [21] Valeri Golovitchev, private communication, Associate Professor, Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology, Gothenburg, Sweden,
<http://www.tfd.chalmers.se/~valeri>
- [22] Christian Weiskirch, private communication, Institut für Verbrennungskraftmaschinen, TU Braunschweig, Braunschweig, <http://www.ivb.tu-braunschweig.de>
- [23] F. Battin-Leclerc. P.A. Glaude, V. Warth, R. Fourmet, G. Scacchi, G.M. Côme, **“Computer tools for modelling the chemical phenomena related to combustion”**, Chemical Engineering Science 55 (2000) 2883 – 2893 , 2000
- [24] Y. Yamasaki, N. Iida **“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 and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA 2001), Nagoya, 2001
- [25] Sh. Kojima, **“Detailed Modeling of n-Butane Autoignition Chemistry”**, Combustion and Flame 99:87-136(1994)
- [26] R.J. Kee, F.M. Rupley, E. Meeks, J.A. Miller, **“CHEMKIN III: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gasphase Chemical and Plasma Kinetics”**, Sandia National Laboratories, Livermore, CA 94551-0969