

Jahresbericht 2004, 10. Dezember 2004

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, 8092 Zürich
Telefon, E-mail, Internetadresse	01 632 75 34, barroso@lav.mavt.ethz.ch, www.lav.ethz.ch 01 632 26 50 escher@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

Das Jahr 2004 kann rückblickend als erfolgreiches Jahr für die Simulation gewertet werden. Die erfolgsversprechenden Ansätze respektive Methoden haben sich im Verlaufe des Jahres herauskristallisiert. Mit den nun gewählten Ansatz Reaktionspfadanalyse, Wärmefreisetzungsanalyse und Optimierung mit bio-inspirierten Algorithmen scheint ein Durchbruch bei der Mechanismenreduktion gelungen zu sein. Zu bemerken ist jedoch, dass der Gültigkeitsbereich des skelettartigen Mechanismus auf ähnliche Randbedingungen, wie diejenigen die bei der Reduktion vorherrschten, beschränkt ist. Die Kopplung detaillierter und reduzierter Chemie mit instationärer Turbulenzwechselwirkung für Zündung und Flammausbreitung besteht ebenfalls. Gezielte 3-D Simulationen von Betriebspunkten unserer Projektpartner stehen bevor. Die Ergebnisse mit dem Vielzonenmodell sind vielversprechend. Diese werden nächstens bei ausgewählten Betriebspunkten unserer Projektpartner zur Anwendung gelangen.

Parallel zu den numerischen Arbeiten wurden experimentelle Untersuchungen an der Hochdruck-Hochtemperatur Zelle (HDTZ) der ETH Zürich durchgeführt. Ziel dieser Vorversuche war es, Kenntnisse über die Möglichkeiten und Grenzen der Messtechniken im möglichst homogenen Fall zu gewinnen. Das angewandte Schlierenverfahren erwies sich als eine sehr sensitive Messtechnik, welche in Kombination mit der Schattenbildtechnik eine qualitative Unterscheidung zwischen der Flüssigphase und der Dampfphase ermöglicht. Gleichzeitig mit den Schlierenaufnahmen erlaubte die Aufnahme der passiven OH-Chemilumineszenz eine örtliche Zuordnung des Entflammungsortes. Durch den Einsatz von Photomultipliern und durch Druckindizierung wurde der Zündverzug für diverse Kraftstoffe bei unterschiedlichen Brennraumtemperaturen und -drücken untersucht.

Da mit der HDTZ voll-homogene Gemische nicht untersucht werden können, wurde im Herbst 2004 ein Einhubtriebwerk (EHT, Rapid Compression Machine) in Betrieb genommen. Damit soll es möglich sein, unter definierten Bedingungen (p , T , λ) und nach Möglichkeit Homogenisierungsgrad, Zündverzögerung und Zündorte zu bestimmen. Erste Messungen mit einer verhältnismässig frühen Einspritzung zur partiellen Homogenisierung wurden erfolgreich durchgeführt und ausgewertet.

Projektziele

Durch eine homogene Kompressionszündung (Homogeneous Charge Compression Ignition, HCCI) können die Russ- sowie die Stickstoffemissionen markant reduziert werden.

Der Grundgedanke ist die vollständige Gemischaufbereitung vor der Verbrennungseinleitung. Je magerer und homogener ein Gemisch bei gegebenem Luftmassenanteil im Zylinder, desto kleiner ist die Energiedichte was in einer tieferen Verbrennungstemperatur und geringeren Stickstoffemissionen resultiert. Gleichzeitig wird durch die Homogenisierung die Bildung von Russ minimiert. Bei diesem neuen Brennverfahren sind allerdings gewisse Nachteile und Herausforderungen zu nennen, die Basis für intensive Forschungstätigkeiten sind. Problematisch sind die hohen UHC Emissionen welche durch die kalte Verbrennung sowie eine unvollständige Verdampfung des Brennstoffes vor der Verbrennung hervorgerufen werden. Eine weitere Herausforderung ist die Steuerung des Verbrennungsbeginns.

Der experimentelle Teil dieser Arbeit soll einen Beitrag dazu leisten, um unter definierten Zuständen die Zündverzögerungen sowie die Zündorte (Mittelwerte und Standardabweichungen) für einen konventionellen Dieselmotor sowie für geeignete Kraftstoffmischungen zu bestimmen. Dies soll möglichst in Abhängigkeit von Betriebsparametern wie Druck und Temperatur im Brennraum, Abgasrückführung, Sauerstoffgehalt, Homogenisierungsgrad (bei später Gemischaufbereitung), Kraftstoffart sowie – nach Möglichkeit – gezielter Beeinflussung lokaler thermischer Randbedingungen erfolgen.

Damit sollen bessere Aussagen zur Selbstzündung von homogenen Gemischen in motorischen Anwendungen in Abhängigkeit von verschiedenen Betriebsparametern möglich sein, insbesondere im Hinblick auf die Validierung von Simulationsalgorithmen.

Die Simulation wird immer stärker zur Entwicklung von Verbrennungsmotoren eingesetzt. Die beschränkten Rechenkapazitäten und die verkürzten Entwicklungszeiten erfordern die Modellierung der komplexen chemischen und physikalischen Prozesse. Das vorliegende Projekt liefert einen Beitrag zum Verständnis der 3D-Spraysimulation, indem dank detaillierten Messergebnisse mit unterschiedlichen Randbedingungen diese validiert werden konnten. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Analyse von detaillierten Reaktionsmechanismen für Alkane und deren Reduktion auf die wesentlichsten Reaktionen um diese in einem weiteren Schritt mit Mehrzonenmodellen und kompletter 3D-Strömungssimulation koppeln zu können. Das Endziel des Simulationsbeitrages ist es, Modelle zu erstellen, welche die Gemischaufbereitung, die Entzündung, die Verbrennung sowie die Schadstoffbildung von homogen betriebenen kompressionsgezündeten Motoren vorrausberechnen und somit einen wesentlichen Beitrag zur Entwicklung eines HCCI Motors leisten.

Durchgeführte Arbeiten und erreichte Ergebnisse

Experiment

Am Institut ist eine grosse Datenbank von Sprays unter verdampfenden und nicht verdampfenden Bedingungen vorhanden. Durch die Messung von Zündverzögerungen sowie Zündorten soll diese Datenbasis erweitert werden und als Validierungsgrundlage für parallel laufende Simulationen dienen. Die Experimente wurden an zwei Prüfständen durchgeführt und die Resultate werden in der Folge dargestellt.

Auf die detaillierte Beschreibung der Hochdruck-Hochtemperatur Zelle (HDTZ) wird an dieser Stelle nicht weiter eingegangen und auf frühere Veröffentlichungen und insbesondere auf [1] verwiesen. Das Konstantvolumen erlaubt eine Vorkonditionierung der Brennkammer auf maximal 800 K und 80 bar. Der maximale Einspritzdruck war bei 1500 bar limitiert.

Da durch die prinzipielle Funktionsweise der HDTZ keine Versuche unter voll-homogenen Bedingungen durchgeführt werden konnten, wurde versucht, durch eine möglichst kurze Einspritzung eine teil-homogene Gemischbildung zu realisieren. Um eine Zündung an der Wand zu verhindern wurde ein Einspritzdruck von 500 bar experimentell als optimal bestimmt. Damit wurde erreicht, dass sich die Dieseldampfswolke im optisch zugänglichen Bereich entzündet.

Die folgende Abbildung 1 zeigt den verwendeten Aufbau für die synchrone Aufnahme von OH-Chemilumineszenz und Schlierenaufnahme.

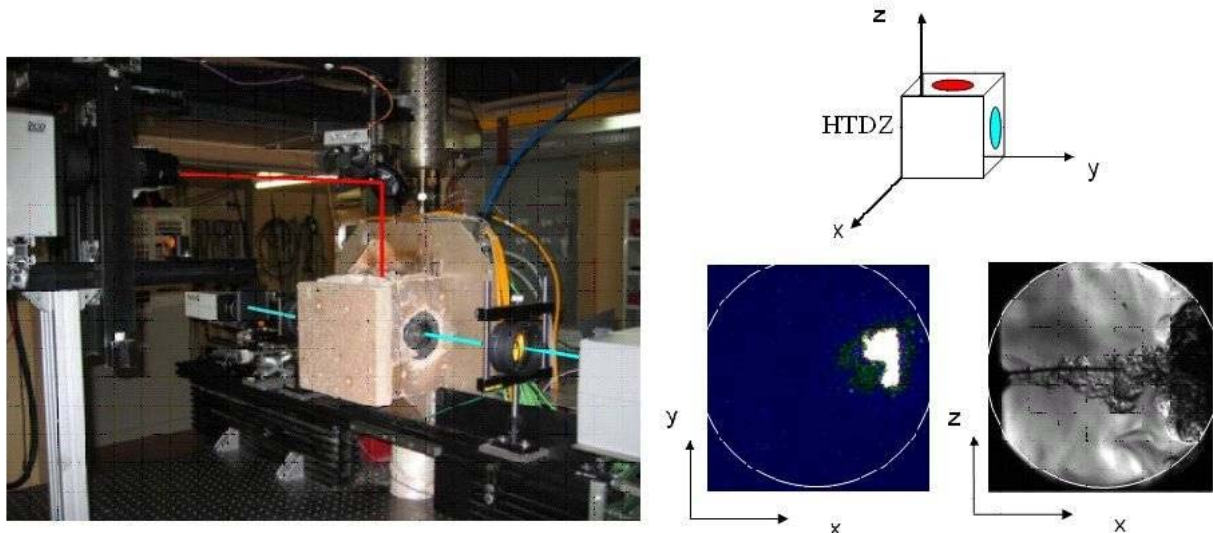


Abb. 1: Aufbau für die synchrone Aufnahme der OH-Chemilumineszenz und Schlieren

T_{Zelle} 800 K, p_{Zelle} 40 bar, $t_{\text{Einspritzung}}$ 0.8 ms, $p_{\text{Einspritzung}}$ 500 bar

t_{Aufnahme} 2 ms nach effektivem Einspritzbeginn

Die Aufnahmen von passiver OH-Chemilumineszenz (x-y) sowie Schlierenaufnahmen (x-z) wurden unter einem Winkel von 90° durchgeführt, wie in der Abbildung dargestellt ist. Im Schlierenbild ist die dampfförmige Phase deutlich erkennbar sowie der Flammfortschritt von rechts. Durch die Superposition der Aufnahmen ist der Entflammungsort detektierbar.

Mit diesem Messaufbau wurden unter definierten Betriebszuständen (T,p) kurze Einspritzvorgänge von 0.8 ms untersucht und ausgewertet [2]. Zusammenfassend zeigten sich bei den Messungen an der HDTZ, dass das Schlierenmessverfahren eine sehr hohe Sensitivität aufweist [3, 4] und in Kombination mit Chemilumineszenzaufnahmen und Photomultiplier sowie Druckindizierung eine Möglichkeit darstellt, den Entflammungsort und Zündzeitpunkt festzustellen.

Im Hinblick auf das Ziel, die Zündverzögerungen im homogenen Betrieb von verschiedenen Kraftstoffen zu untersuchen, wurde der Prüfstand um einen Medientrenner erweitert. Diese Lösung erlaubte die Nutzung der Dieseldruckpumpe um einen zu untersuchenden, zweiten flüssigen Kraftstoff, getrennt vom Dieseldruckstoff, in den Brennraum einzubringen. Von besonderem Interesse war n-Heptan C_7H_{16} , da dieser Kraftstoff bessere Verdampfungseigenschaften als Diesel aufweist bei praktisch identischer Cetanzahl [5, 6].

Durch eine Piloteinspritzung von 20 ms wurde das Temperatur- und Druckniveau im Brennraum angehoben und durch die Variation der Beruhigungszeit vor der zweiten Einspritzung war es möglich, einen Temperaturbereich von 700 K – 950 K abzudecken. Ziel war es, in diesem Temperaturbereich bei konstantem Druck die Zündzeitpunkte für verschiedene Kraftstoffe zu

bestimmen. Aus diesem Grunde wurde der reine Druckeinfluss auf den Zündverzug für sämtliche Kraftstoffe bestimmt. Der Zellkörper wurde auf 800 K vorkonditioniert und der Zündverzug in einem Intervall von 20 bis 60 bar bestimmt. Mit den so gefundenen Korrekturfaktoren konnte der reine Temperatureinfluss für verschiedene Kraftstoffe extrahiert werden und ist in der folgenden Abbildung aufgeführt.

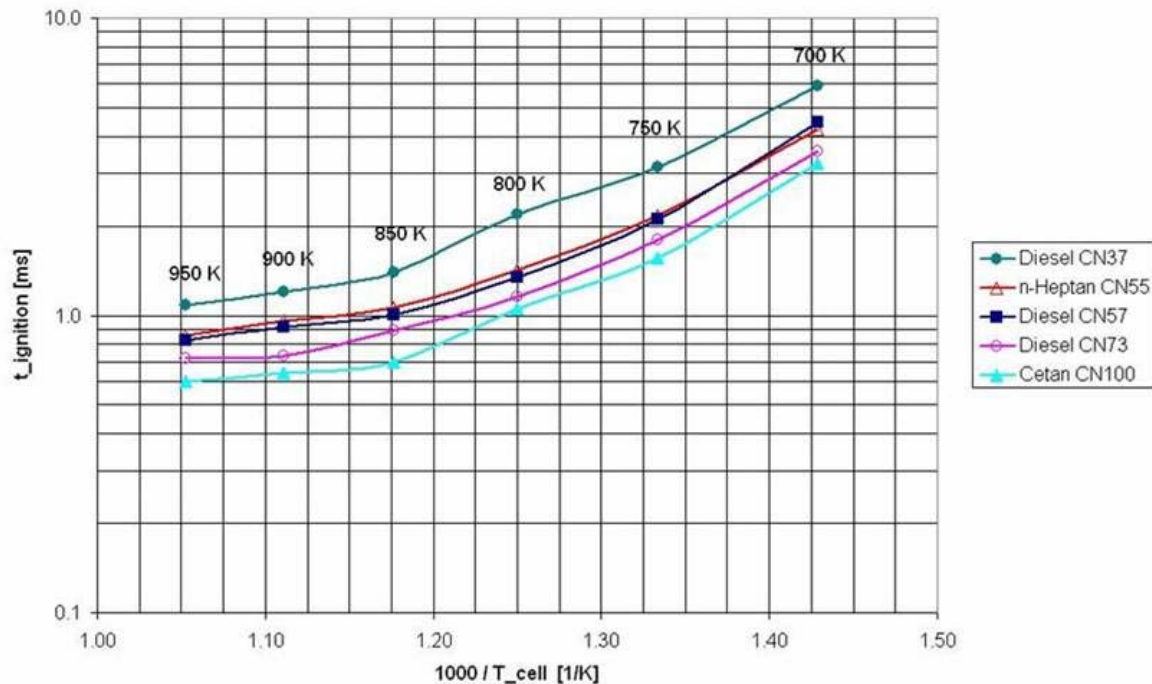


Abb. 2: gemessene Zündverzögerungen für verschiedene Kraftstoffe, korrigiert um Druckeinfluss

p_{Zelle} 40 bar, $p_{\text{Einspritzung}}$ 500 bar, $t_{\text{Einspritzung}}$ 0.8 ms, 20 Messungen

Untersucht wurden Kraftstoffe mit einer Cetanzahl von 37 (entspricht der Cetanzahl von n-Butan), n-Heptan und Diesel, welche eine ähnliche Cetanzahl von 55 aufweisen, Diesel mit einer Beigabe von Zündbeschleuniger sowie Cetan 100. Erwartungsgemäss ist die Abnahme des Zündverzuges mit steigender Cetanzahl. Es ist davon auszugehen, dass die Piloteinspritzung einen Einfluss auf die Verbrennung der zu untersuchenden Haupteinspritzung hat, konnte aber in diesen Messungen nicht näher bestimmt werden.

Der Bereich mit negativem Temperaturkoeffizienten konnte nicht nachgewiesen werden. Dies liegt daran, dass das Gemisch nicht homogen vorlag. Ebenso ist zu berücksichtigen, dass im vorliegenden Fall der physikalische und der chemische Zündverzug gemessen wurde.

Problematisch war der Bereich von 700 K – 800 K, da die Entflammung stochastisch verteilt an der heissen Wand erfolgte. Diese Beobachtung wurde gestützt durch den voreilenden Druckanstieg vor dem Photodetektorsignal was auf eine Zündung im optisch nicht einsehbaren Wandbereich hindeutet.

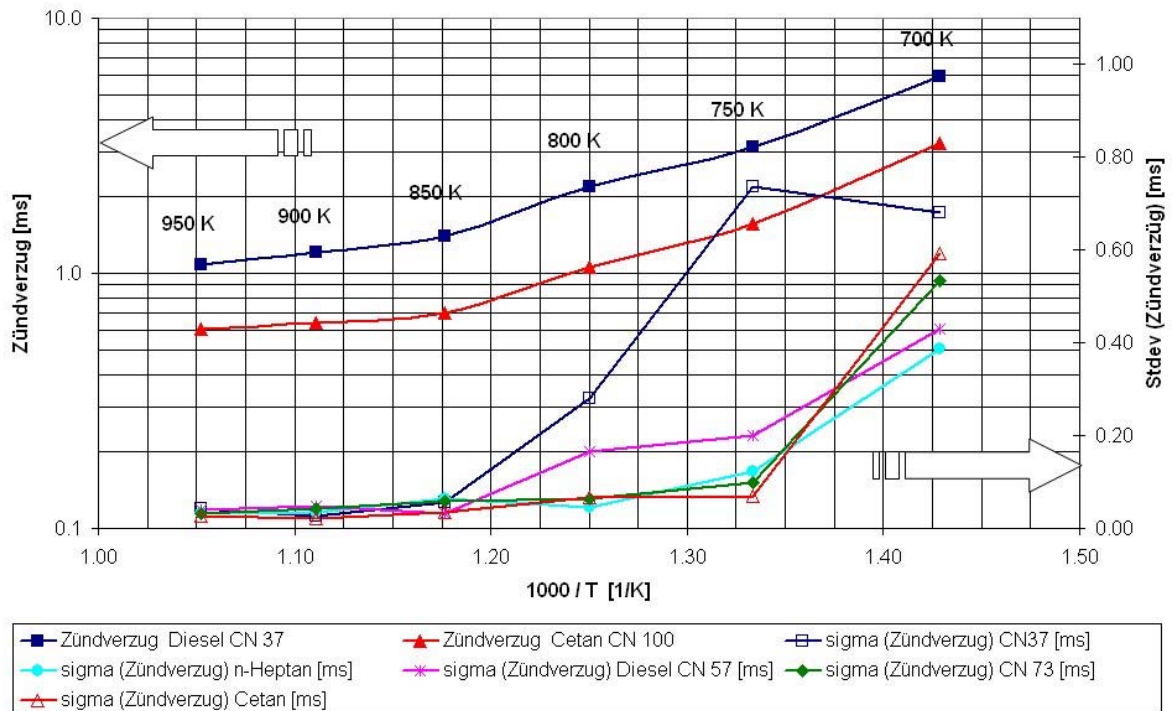


Abb. 3: Reproduzierbarkeit und Standardabweichung der Zündverzüge, 20 Messungen

p_{Zelle} 40 bar, $p_{\text{Einspritzung}}$ 500 bar, $t_{\text{Einspritzung}}$ 0.8 ms

Im Bereich von 700 K – 800 K ist die Standardabweichung der Zündverzüge relativ gross mit einem Wert von 0.5 ms. Mit steigender Temperatur nimmt die Reproduzierbarkeit zu. Auch ist eine Abnahmetendenz zu kleineren Standardabweichungen bei höheren Cetanzahlen beobachtbar.

Die weiteren experimentellen Arbeiten wurden am Einhubtriebwerk vorgenommen. Die Vorteile gegenüber der HDTZ oder einem Transparentmotor sind die Möglichkeit der Darstellung einer vollständigen oder teilweisen Homogenisierung bei variablen Wandtemperaturen, der vibrationsfreie Betrieb sowie die schnelle Reinigung der vielfältigen optischen Zugänge. Das Antriebskonzept basiert auf einer gegenläufigen Bewegung zweier coaxial angeordneter Kolben [7]. Durch das Verhältnis von Antriebsdruck und Ladedruck sowie des Kolbenhubs und Strömungsblenden kann ein grosser motorischer Betriebsbereich von $\pm 20^\circ$ KW um OT simuliert werden wie in der folgenden Tabelle dargestellt ist:

Drehzahl n	1000 U / min – 3000 U / min
Hub H / Bohrung B	stufenlos einstellbar zwischen 120 mm – 250 mm / 84 mm
Verdichtungsverhältnis ϵ	5 – 25
maximaler Zylinderdruck p_{max}	200 bar
Heizung	Arbeitskolben und Zylinderwände sind bis 150° C heizbar

Tabelle 1 : Betriebsbereich des Einhubtriebwerks

Die ersten experimentellen Untersuchungen betrafen die Reproduzierbarkeit. Bei identischen Ausgangsparametern wurde bei 10 aufeinanderfolgenden Kompressionsvorgängen der Kolbenweg sowie der Zylinderdruck aufgezeichnet. Als Antriebsdruck wurden 30 bar gewählt und 1.3 bar als Ladedruck was einer simulierten Drehzahl von 2000 U / min entspricht.

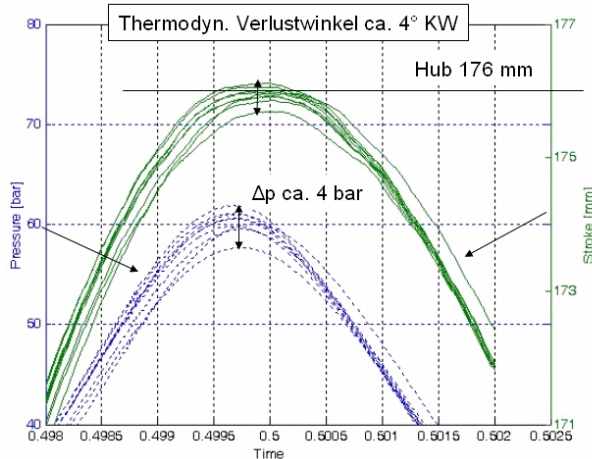


Abb. 4a: Reproduzierbarkeit nur Kompression, ϵ 15.5, Simulation 2000 U/min

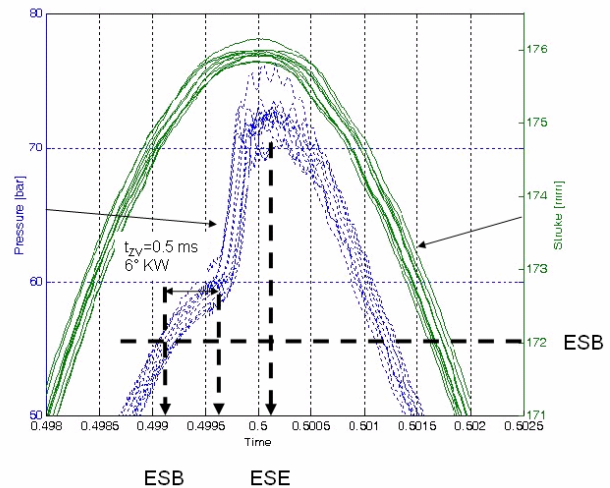


Abb. 4b: Reproduzierbarkeit mit Verbrennung, ϵ 15.5, Simulation 2000 U/min

Einspritzbeginn (ESB) 11° vOT, $t_{\text{Einspritzung}}$ 1 ms,
 $p_{\text{Einspritzung}}$ 500 bar, 8-loch Düse mit 120° SKW
 λ_{global} 5.0

Die Reproduzierbarkeit im Kolbenweg ist bei einem vorgegebenen Hub von 176 mm mit einer Standardabweichung 0.12 mm sehr gering, was zu einer Druckvariation von 4 bar Spitzendruck im OT führt. Aus der Abbildung 4a ist erkennbar, dass der thermodynamische Verlustwinkel rund 4° KW beträgt, was dem dreifachen Wert von einem realen Kolbenmotor entspricht. Als Ursache könnten die höheren Wandwärmeverluste verantwortlich sein.

In Abbildung 4b ist die Reproduzierbarkeit von 10 Zyklen mit Verbrennung dargestellt. Durch die gewählten Betriebsparameter wurde ein gemittelter Zündverzug von 0.5 ms erreicht. Auch im vorliegenden Fall ist die Reproduzierbarkeit in Bezug auf Kolbenweg, Zylinderdruck und Zündbeginn sehr gut.

Erste exemplarische Messungen „homogen“ wurden mit sehr früher Einspritzung (50° KW vOT) durchgeführt. Während 1.8 ms wurde mit 500 bar eingespritzt um ein globales Lambda von 3.7 zu erreichen. Der Zündverzug von 2.7 ms nach effektivem Einspritzbeginn ist deutlich aus dem Photomultipliersignal sowie in dp/dt erkennbar.

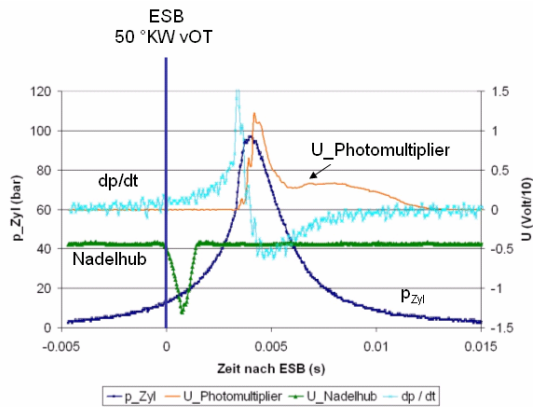


Abb. 5a: erste Messung mit Einspritzung „früh“,
simulierte Drehzahl 2000 U / min

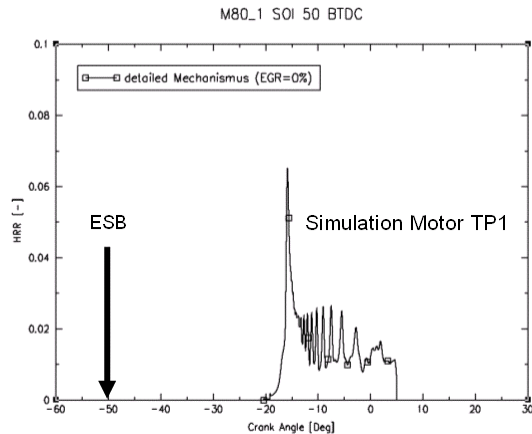


Abb. 5b: Simulation mit detailliertem Hewson
Mechanismus, 2000 U / min, ESB 50° KW
vor OT, $m_{\text{Einspritzung}} = 10 \text{ mg}$, $\lambda = 3$

Zündbeginn 3 ms nach ESB

Im gemessenen Betriebspunkt zeigte sich eine gute Übereinstimmung des Zündbeginns mit der simulierten Wärmefreisetzungsrate (Abbildung 5b). Zu erwähnen ist jedoch der unterschiedliche Homogenisierungsgrad. Bei der Simulation wurde von einer vollständigen Homogenisierung ausgegangen wobei sich im Experiment durch den grossen Spritzkegelwinkel von 120° und die Einspritzlänge von 1.8 ms Kraftstoff an der Wand anlagerte wie aus den folgenden Aufnahmen zu entnehmen ist. Die Sequenz zeigt die Entflammung unter den obengenannten Betriebsbedingungen, aufgenommen durch den transparenten Kolbenboden mit einem Durchmesser von 46 mm. Die 8-Loch Düse mit 120° SKW ist zentral angeordnet.

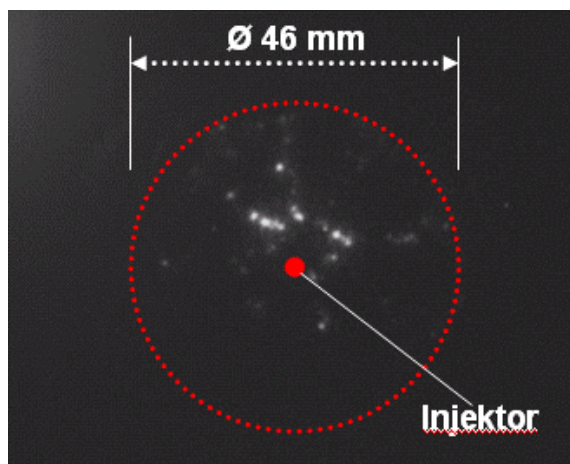


Abb. 6a: Aufnahme 12°KW vOT
(1 ms vOT)

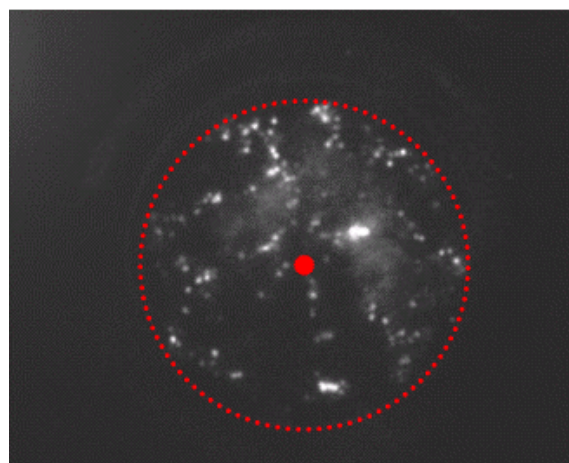


Abb. 6b: Aufnahme 7.2°KW vOT
(0.6 ms vOT)

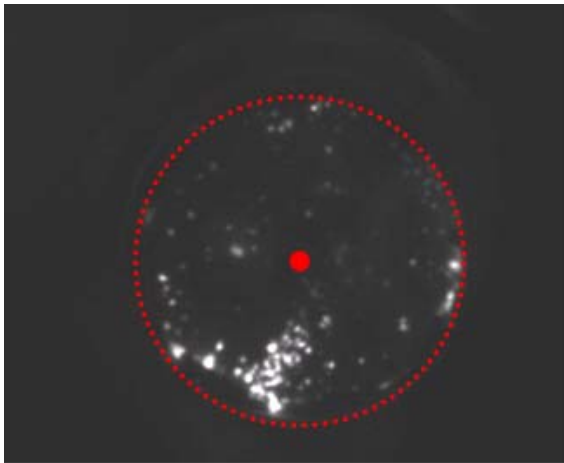


Abb. 6c: Aufnahme 5.4°KW vOT
(0.45 ms vOT)

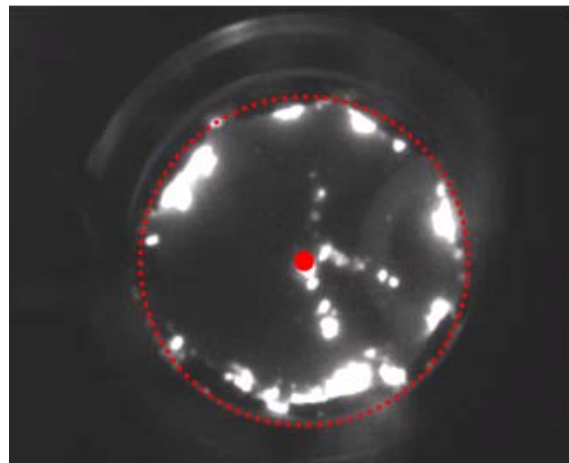


Abb. 6d: Aufnahme 0° vOT
(im OT)

Die Aufnahmen 6a-c zeigen die für eine homogene Verbrennung typischen gleichzeitigen Entflammungsorte was zu einer schlagartigen Verbrennung mit hohem Druckanstieg führt. Der Aufnahme im OT ist zu entnehmen, dass während der Einspritzung Kraftstoff auf die Wand aufgetragen und durch die Kolbenbewegung teilweise abgestreift wurde. Zu erkennen sind symmetrisch angeordnet 8 Flammherde.

Simulation

Im Jahre 2003 konnten die Sensitivitätsuntersuchungen und Validierung der Gemischaufbereitung weitgehend abgeschlossen werden [8, 9, 10, 11]. Verschiedenen Reaktionsmechanismen welche die Kinetik von zwei Alkanen (unverzweigte, gesättigte Kohlenwasserstoffe, in diesem Falle n-Butan und n-Heptan) darstellen, wurden mit vorhanden Experimenten validiert. Diese Validierung führte zur Auswahl von zwei komplexen Mechanismen. Der erste Mechanismus beschreibt die Reaktionskinetik für n-Butan. Er umfasst 385 Spezies die in 1895 Reaktionen miteinander interagieren [12]. Der zweite Mechanismus beschreibt die Reaktionskinetik von n-Heptan. Er umfasst 67 Spezies die in 265 Reaktionen mit einander interagieren [13]. Die Arbeitsblöcke in diesem Jahr können folgendermassen aufgeteilt werden:

- Berechnung diverser Betriebspunkte in homogenem Reaktor mit detaillierter Chemie und Vergleich mit Experimenten von Projektpartnern.
- Reduktion der detaillierten Mechanismen mittels Reaktionspfadanalyse, Wärmefreisetzungsanalyse der einzelnen Reaktionen und bio-inspirierten evolutionären Algorithmen
- Erstellung der 3D-Rechennetze unserer Projektpartner und Kopplung detaillierter und reduzierter Chemie mit instationärer Turbulenzwechselwirkung für Zündung und Flammausbreitung Erstellung von stochastischen Mehrzonenmodelle zur schnellen und exakten Simulation von HCCI-Motoren

Berechnung diverser Betriebspunkte mit homogenem Reaktor und detaillierter Chemie und Vergleich mit Experimenten von Projektpartnern.

Unsere Projekt Partner (Universität Stuttgart, Universität Braunschweig, Fachhochschule Dresden) betreiben motorische Prüfstände, wo das neuartige Brennverfahren HCCI untersucht wird. Die

ETH Zürich verwendet und entwickelt unterschiedliche Simulationstool um diese Motoren zu simulieren. Beim Experiment gab es in diesem Falle Unsicherheiten bei der Kraftstoffmassenmessung. Aus diesem Grunde wurde eine Sensitivitätsuntersuchung der Kraftstoffmasse durchgeführt. Die Messunsicherheit bei der Kraftstoffmasse lag im Experiment bei 10%. In Abbildung 7a und 7b ist die starke Sensitivität auf die gemessene Kraftstoffmasse zu sehen. Eine bessere Abschätzung der Kraftstoffmasse war im Experiment nicht möglich, so dass alle Ergebnisse mit dieser Unsicherheit betrachtet werden müssen. Obwohl die eingespritzte Kraftstoffmasse variiert wurde, erzielt man mit dem Einzonenmodell mit detaillierter Chemie noch nicht die erwünschte Übereinstimmung mit dem Experiment in unterschiedlichen Betriebspunkten.

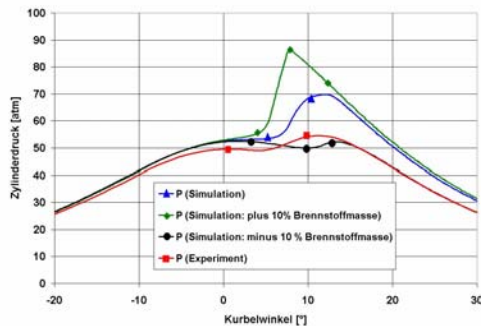


Abb. 7a: Sensitivität des Druckverlaufes bei homogenem n-Butan Betrieb auf die Messunsicherheit bei der Kraftstoffmasse

(Betriebspunkt: 12T00M01, $m_L = 640 \text{ mg/ASP} \pm 1\%$, $m_B = 10.8 \text{ mg} \pm 10\%$, 1200 U/min, $T_{SR} = 25^\circ \text{C}$, $\lambda = 3.8 \pm 1$)

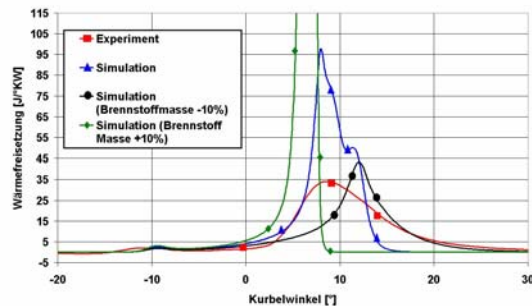


Abb. 7b: Sensitivität von $dQ/d\phi$ bei homogenem n-Butan Betrieb auf die Messunsicherheit bei der Kraftstoffmasse

(Betriebspunkt: 12T00M01, $m_L = 640 \text{ mg/ASP} \pm 1\%$, $m_B = 10.8 \text{ mg} \pm 10\%$, 1200 U/min, $T_{SR} = 25^\circ \text{C}$, $\lambda = 3.8 \pm 1$)

Im weiteren wird die Inhomogenität der Temperatur und des Gemisches mit nur einer Zone nicht abgebildet. Aus diesem Grunde wurde das Modell mit mehreren Zonen erweitert (siehe weiter unten).

Reduktion der detaillierten Mechanismen mittels Reaktionspfadanalyse, Wärmefreisetzungsanalyse der einzelnen Reaktionen und bio-inspirierten evolutionären Algorithmen

Die Reduktion detaillierter Chemie auf wenige Spezies die in einer geringen Anzahl von Reaktionen miteinander interagieren, ist eine anspruchsvolle Aufgabe. Zunächst wurden unterschiedliche Publikationen analysiert und deren Mechanismen gegeneinander getestet [12, 13, 14, 15, 16]. Die Arbeiten von Hewson [13] und Müller [16] beinhalten sowohl detaillierte wie auch reduzierte Mechanismen. Der Mechanismus von Tanaka [14] ist ein skelletartiger Mechanismus. Die Mechanismen von Westbrook et al. [12, 15] sind beides detaillierte Mechanismen. Keiner der reduzierten Mechanismen genügt den Anforderungen betreffend dem Verlauf der wichtigsten Spezies und der Wärmefreisetzung im Vergleich zu Experimenten. Die detaillierten Mechanismen von Hewson und Westbrook lieferten gute Ergebnisse, jedoch sind sie zu umfangreich um sie mit 3D-Strömungssimulation zu koppeln. Aus diesem Grunde wurde ein neuartiger Ansatz gewählt um die Mechanismen zu reduzieren.

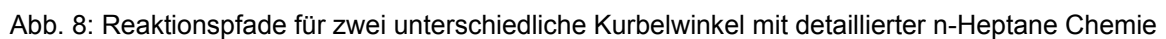
Für n-Heptan galt als Startmechanismus der „detaillierte“ Hewson-Mechanismus mit 67 Spezies die in 265 meist irreversiblen Reaktionen miteinander interagieren. Mit der Software Chemkin-II [17] wurde zuerst ein homogener Reaktor mit variablen Volumen simuliert. Mit der Software Cantera [18] können im Postprocessing die Reaktionspfade visualisiert werden. In Abbildung 8 sind die Reaktionspfade für zwei unterschiedliche Kurbelwinkel zu sehen. Die wichtigsten Reaktionspfade ändern sich während dem Verlauf der Verbrennung. Deshalb wurde die Analyse der Reaktionspfade von 24° v. OTP (einige Grade vor Brennbeginn) bis OTP alle 2 Grad Kurbelwinkel durchgeführt. Die Reaktionspfadanalyse ist ein iterativer Prozess [19]. Unwichtige

Spezies werden eliminiert und danach wird wieder der homogene Reaktor gerechnet und erneut eine Reaktionspfadanalyse durchgeführt. Nach einigen Iterationen wurde ein skelettartiger Mechanismus mit 24 Spezies und 66 Reaktionen identifiziert. Ein Weglassen einer dieser 24 Spezies führte zu unbrauchbaren Ergebnissen.

Dank der visuellen Analyse wurde erkannt, dass der Kraftstoff vor der sichtbaren Wärmefreisetzung in vier Alkyl-Isomere zerfällt. Diese konnten zu einem Isomer zusammengefasst werden. Im weiteren konnte z.Bsp. die Fortpflanzungslinie von $C_7H_{15}-3 \rightarrow C_7H_{15}O_2 \rightarrow HEOOH-2 \rightarrow OOC_7OOH \rightarrow HOOC_7OOH \rightarrow OC_7OOH$ da nie (im gesamten betrachteten Zeitraum) eine Abzweigung vorhanden war, zu einer Globalreaktion $C_7H_{15}-3 + 2O_2 \Rightarrow OC_7H_{13}O + 2OH$ zusammengefasst werden. Der erhaltene skelettartige Mechanismus zeigte eine gute Übereinstimmung mit dem detaillierten Mechanismus. Um die Übereinstimmung noch zu verbessern, folgte eine Optimierung der Reaktionsraten mit bio-inspirierten evolutionären Algorithmen [20]. Evolutionäre Algorithmen wurden u.a. von Elliot et al. [21, 22] und Hamosfakidis et al. [23] zur Optimierung von Reaktionsraten verwendet. Für stark nichtlineare, gekoppelte Probleme, wie dies bei der Reaktionskinetik zutrifft, haben genetische Algorithmen verglichen mit anderen Methoden starke Vorteile [21]. Nachteilig ist die Konvergenzrate und dass bei starker Nichtlinearität nicht das absolute Optimum gefunden wird [21]. Dies hat jedoch mehr mit dem zu lösenden Problem zu tun, wo zwei Optimas sehr nahe bei einander liegen können, als mit der Optimierungsmethode selber. Sehr viele unterschiedliche Betriebspunkte sind notwendig, um das absolute Optimum zu finden. Dies führt jedoch zu sehr langen Rechenzeiten.

Aus diesem Grunde ist es von Vorteil a priori die ungefähre Lage des Optimums zu kennen, und nur in einem engen Bereich dieses zu suchen. In diesem Fall wurden die pre-exponentiellen Faktoren der einzelnen Reaktionen in einem Gebiet $0.8 \div 1.2$ mal der ursprüngliche Wert gesucht. Das Optimum wurde innert wenigen Iterationen gefunden. In Abbildung 9 ist die Wärmefreisetzung und der Druckverlauf des skelettartigen Mechanismus (vor und nach der Optimierung) und des detaillierten Mechanismus dargestellt.

Für die Reduktion des weit umfangreicheren n-Butan Mechanismus mit 385 Spezies und 1895 Reaktionen konnte nicht mehr eine „visuelle“ Reaktionspfadanalyse verwendet werden. Mit Hilfe des Chemkin-II Packages wurden die Wärmefreisetzungen jeder einzelne Reaktion berechnet. Diese beinhaltet den Reaktionsfluss und die Reaktionsenthalpie der jeweiligen Reaktion. Überstieg diese einen vordefinierten Wert, so wurde die Reaktion als wichtig erachtet. Eine Postprocessing-Prozedur indentifizierte diese, und schrieb den Mechanismus neu ohne die „unwichtigen“ Reaktionen. Dieser Prozess ist auch iterativ und muss noch weiterverfolgt werden, um den Mechanismus weiter zu reduzieren.



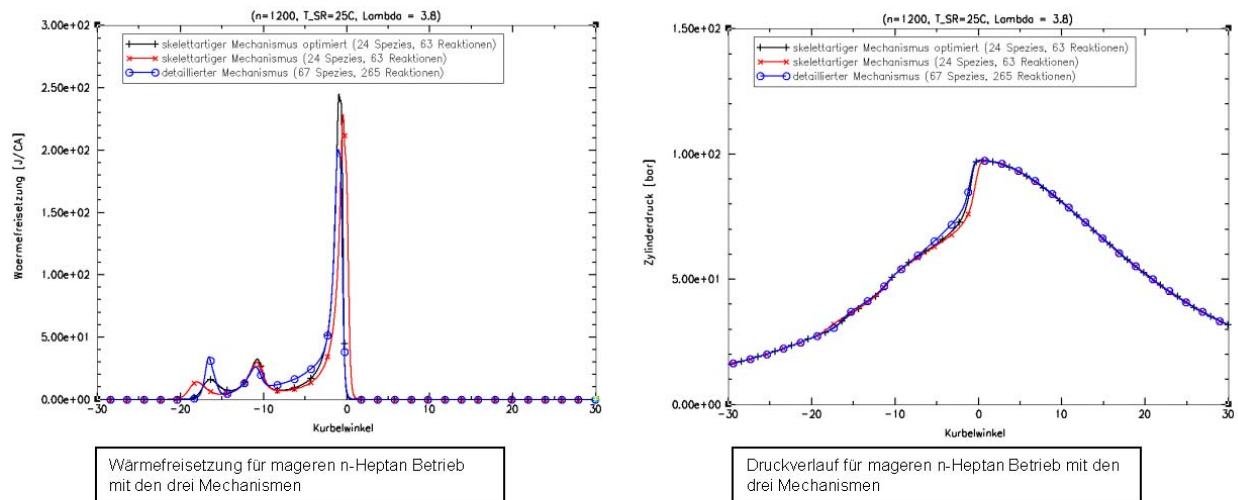


Abb. 9: Wärmefreisetzung und Druckverlauf des skelletartigen n-Heptan Mechanismus (vor und nach der Optimierung) im Vergleich zum detaillierten Mechanismus

In Abbildung 10 ist die Wärmefreisetzung des detaillierten (1895 Reaktionen) n-Butan Mechanismus und des „reduzierten“ Mechanismus (466 Reaktionen) zu sehen. Es ist ersichtlich, dass eine Reduktion mittels „Wärmefreisetzungsanalyse“ von 1895 Reaktionen auf 466 Reaktionen nur einen geringen Einfluss auf die gesamte Wärmefreisetzung zeigt.

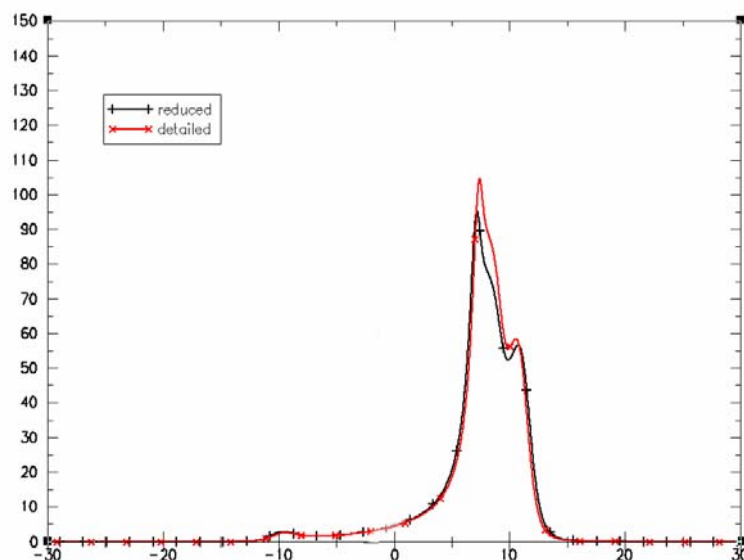


Abb. 10: Wärmefreisetzung des skelletartigen n-Butan Mechanismus (466 Reaktionen) im Vergleich zum detaillierten Mechanismus (1895 Reaktionen)

Erstellung der 3D-Rechennetze unserer Projektpartner und Kopplung detaillierter und reduzierter Chemie mit instationärer Turbulenzwechselwirkung für Zündung und Flammausbreitung

Die Kopplung von 3D-Strömungssimulation mit detaillierter Chemie hat einige Herausforderungen. Der Rechenaufwand (ohne Berücksichtigung der chemischen Reaktionen) steigt linear mit den zu transportierenden Grössen. Wird ein skelletartiger Mechanismus verwendet, so beinhaltet dieser dennoch um die 20 Spezies (gegenüber 5 Spezies bei Einschrittchemie). Ein weiterer Nachteil ist, dass die gewählte Netzauflösung nicht die Flammenstruktur auflöst und dass mit den gewählten zeitlich gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen nur die mittlere Gasgeschwindigkeit aufgelöst werden. Die gesamte Turbulenz wird modelliert. Verbrennungsmodelle wie RIF (Repräsentatives Interaktives Flamelet) [24] oder das hier verwendete Modell CMC (Conditional Moment Closure) [25] erfordern zusätzlich nur den Transport des Mischungsbruches und dessen Varianz. Das Subgrid, also die unaufgelöste Struktur, wird mittels einer Wahrscheinlichkeitsdichte-Funktion modelliert, die eine Funktion der Varianz und der Turbulenz ist. Für das repräsentative Flamelet wird die detaillierte Chemie gelöst. Dies ermöglicht auch Zündvorgänge und mittels der skalaren Dissipation auch Flammlöschvorgänge zu simulieren. Es ist jedoch ein Kompromiss (bedingt durch die Rechenzeit), dass nur eine repräsentative Temperatur und Turbulenz für die Berechnung des Flamelets verwendet wird.

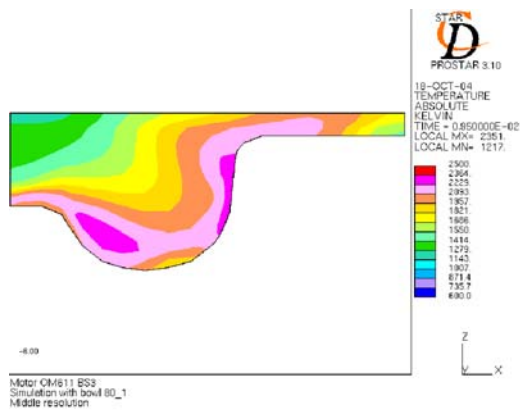


Abb. 11a: Temperaturverteilung 6° v. OTP bei Betrieb ohne AGR

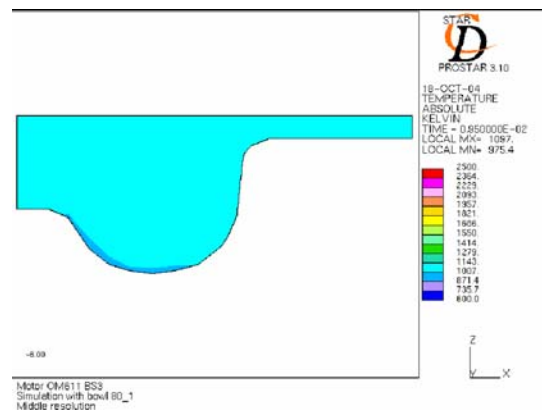


Abb. 11b: Temperaturverteilung 6° v. OTP bei Betrieb mit 40% AGR

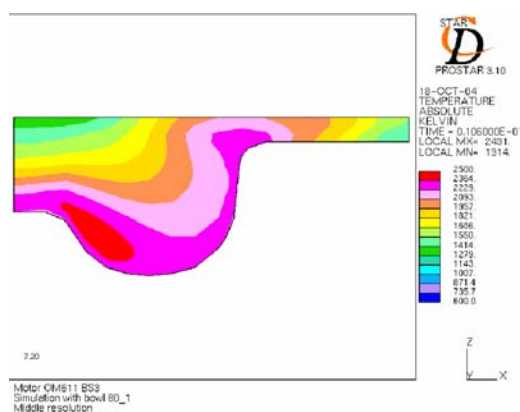


Abb. 11c: Temperaturverteilung 7° n. OTP bei Betrieb ohne AGR

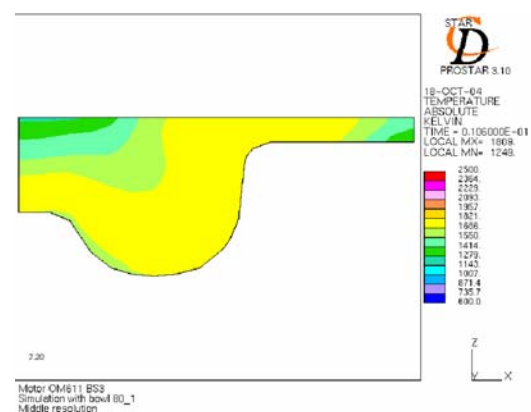


Abb. 11d: Temperaturverteilung 7° n. OTP bei Betrieb mit 40% AGR

In Abbildung 11a-d ist die Temperatur im Brennraum bei zwei unterschiedlichen Kurbelwinkeln ersichtlich. Bei HCCI Betrieb wird mit sehr hohen AGR-Raten gefahren. Aus den Abbildungen ist

zu sehen, dass die Verbrennungstemperatur unterhalb der kritischen NO_x-Bildungstemperatur von 2000K bleibt. Dies ist der Grund weshalb HCCI zu sehr tiefen NO_x-Emissionen führt.

Erstellung von stochastischen Mehrzonenmodellen zur schnellen und exakten Simulation von HCCI-Motoren

3D-Simulation mit detaillierter Chemie benötigt für die Berechnung von 40° KW nach Einspritzbeginn ca. 20 Tage. Die Kompression bis zu Einspritzbeginn dauert bei der gewählten räumliche Diskretisierung weniger als eine Stunde. Mit dem skelettartigen Mechanismus benötigt man für die gleiche Aufgabe ca. 7 Tage. Die Dauer ist immer noch zu lang um grosse Parameteruntersuchungen durchführen zu können. Aus diesem Grunde werden stochastische Vielzonenmodelle untersucht.

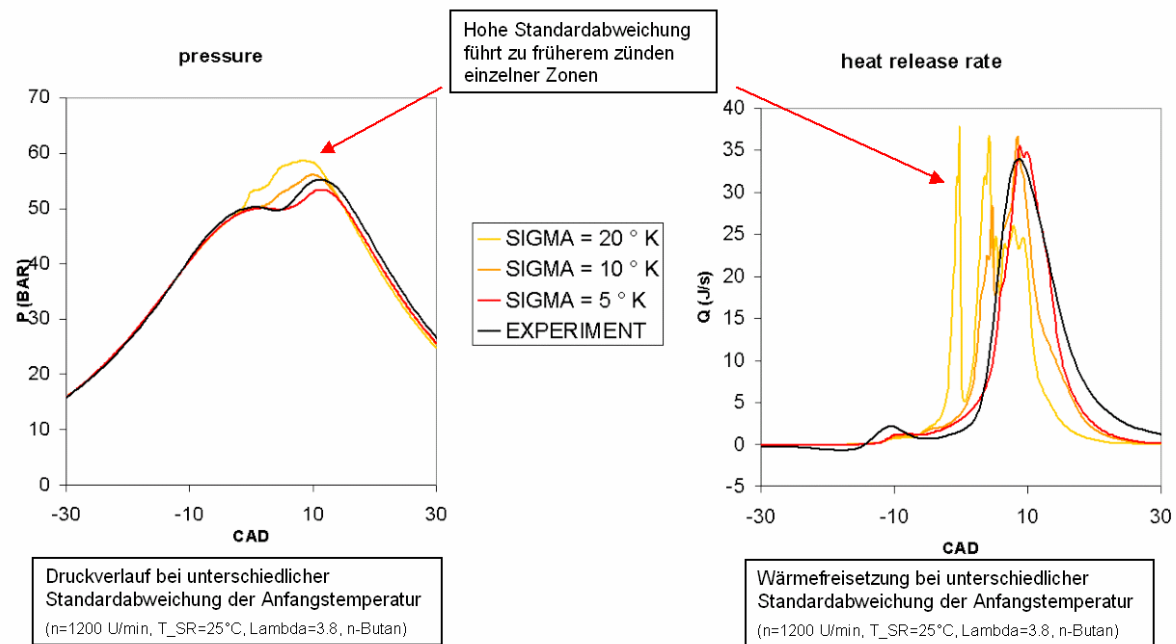


Abb. 12: Druckverlauf und Wärmefreisetzung bei unterschiedlicher Standardabweichung der Temperatur bei Einlassschliesst

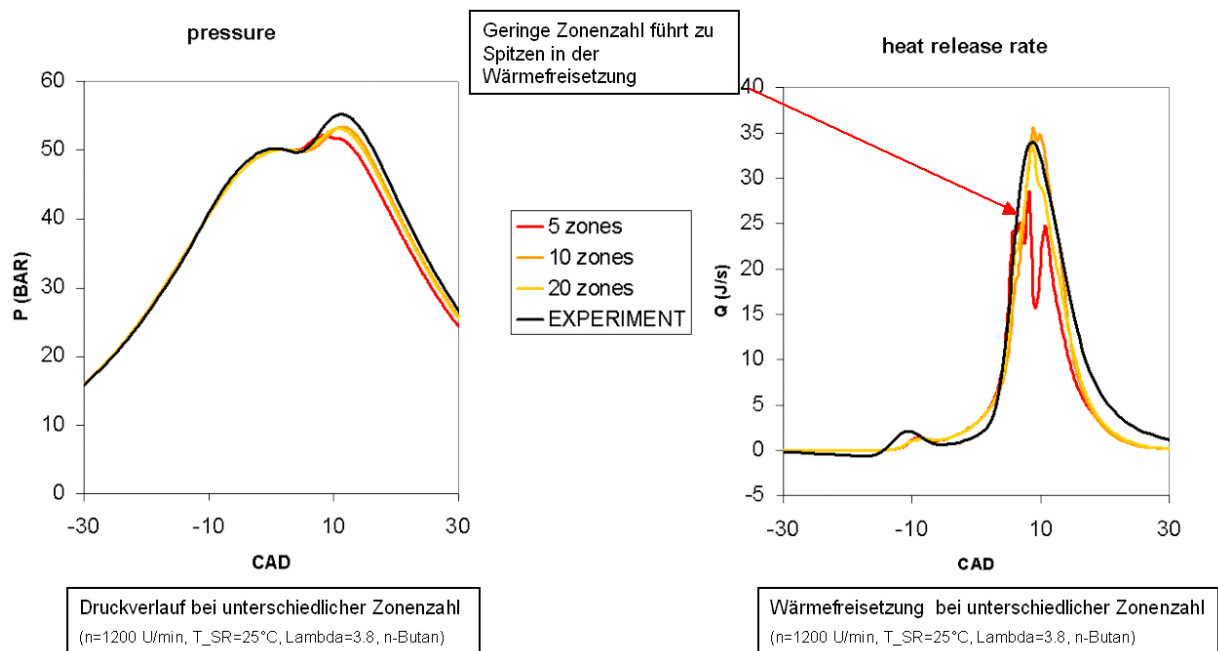


Abb. 13: Druckverlauf und Wärmefreisetzung bei unterschiedlicher Zonenzahl

Quasi-homogene Gemische können als eine Anzahl Zonen (Partikeln) mit stochastisch unterschiedlichen Temperatur und Spezieskonzentrationen betrachtet werden. In Abbildung 12 ist die Sensitivität des Druckverlaufes und der Wärmefreisetzung auf die Standardabweichung der Temperatur bei Einlassschliesst zu sehen. Eine hohe Standardabweichung führt zu grösseren Temperaturunterschiede in den einzelnen Zonen. Dies führt zu einem ungleichmässigen Beginn der Verbrennung die Anhand der Spitzen in der Wärmefreisetzung zu sehen ist. Die Zonenanzahlvariation in Abbildung 13 zeigt, dass für den gewählten Fall 10 stochastische Zonen ausreichend sind um ihn darzustellen. Die Zonenanzahl ist jedoch vom Betriebspunkt abhängig.

Nationale Zusammenarbeit

Das Projekt hat keine Schnittstellen mit nationalen Instituten oder Industrie. An der ETH Zürich werden innerhalb vom Projekt mehrere Semester- und Diplomarbeiten durchgeführt.

Internationale Zusammenarbeit

Seit 1. März 2003 wird am Laboratorium für Aerothermochemie der ETH Zürich ein Teilprojekt des Forschungsvorhabens der deutschen Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) „homogene Dieselvebrennung“ bearbeitet. Neben rund 30 Industriepartnern aus der Motoren- und Zuliefererindustrie sind die Universität Stuttgart, die Technische Universität (TU) Braunschweig sowie die Hochschule für Technik und Wirtschaft (HWT) Dresden im Arbeitskreis involviert.

Der Beitrag der ETH Zürich soll ein fundiertes Verständnis für die Selbstzündung von diversen Kraftstoffen im homogenen sowie teilhomogenen Fall liefern. Neben der Simulation wurden

Experimente in der Hochdruck-Hochtemperatur Zelle (HDTZ) sowie im Einhubtriebwerk der ETH Zürich durchgeführt.

Bewertung 2004 und Ausblick 2005

Das Jahr 2004 kann rückblickend als erfolgreiches Jahr für die Simulation gewertet werden. Die erfolgsversprechenden Ansätze respektive Methoden haben sich im Verlaufe des Jahres herauskristallisiert. Unterschiedliche Ideen wurden für die Mechanismenreduktion untersucht und unterschiedliche Mechanismen aus der Literatur getestet. Mit den nun gewählten Ansatz für die Reduktion (Reaktionspfadanalyse, Wärmefreisetzungsanalyse und Optimierung mit bio-inspirierten Algorithmen) scheint ein Durchbruch bei der Mechanismenreduktion gelungen zu sein. Diese Methode hat jedoch auch ihre Grenzen. Die wesentlichsten Reaktionen und Spezies werden identifiziert und einige Kettenreaktionen können zu Globalreaktionen zusammengefasst werden. Eine komplette Darstellung des Mechanismus mit einigen wenigen Globalreaktionen ist mit nur diesem Ansatz nicht möglich. Bisherige Untersuchungen [19] haben jedoch gezeigt, dass skelettartige Mechanismen infolge der besseren Numerik meist schneller sind als reduzierte Mechanismen. Der Gültigkeitsbereich des skelettartigen Mechanismus ist jedoch auf ähnliche Randbedingungen, wie diejenigen die bei der Reduktion vorherrschten, angewiesen.

Die Kopplung detaillierter und reduzierter Chemie mit instationärer Turbulenzwechselwirkung für Zündung und Flammausbreitung besteht ebenfalls. Es müssen im nächsten Jahr gezielte Betriebspunkte unserer Projektpartner gerechnet werden. Im weiteren muss der Code noch etwas „gereinigt“ werden. Die Ergebnisse mit dem Vielzonenmodell sind ebenfalls vielversprechend. Im nächsten Jahr müssen verschiedene Betriebspunkte unserer Projektpartner simuliert werden. Im weiteren müssen die Methoden und die Ergebnisse publiziert werden. Es stehen einige Publikationen an, darunter eine Dissertation.

Im Berichtsjahr wurden Kenntnisse über Techniken und Methoden zur experimentellen Bestimmung des Zündzeitpunktes sowie der Entflammungsorte in der Hochdruck-Hochtemperatur Zelle (HDTZ) der ETH Zürich aufgebaut und erweitert. Die HDTZ ist für den vorgemischten (homogenen) Fall ungeeignet und es wurde bereits im Jahr 2002 der Kauf eines Einhubtriebwerks (auch bekannt unter dem Begriff Schnellverdichtungsapparatur, Rapid Compression Machine) ins Auge gefasst. Im Frühjahr 2003 wurde der Entscheid zu Gunsten des Einhubtriebwerks gefällt und die technische Abnahme erfolgte im August 2004 an der ETH Zürich ohne nennenswerte Probleme.

Durch den Vorsprung der Evaluation und Entwicklung der Messtechniken an der HDTZ ist es nun möglich, die komplette Messapparatur von der HDTZ an das Einhubtriebwerk zu adaptieren und rasch in produktivem Betrieb zu nehmen. Erste exemplarische Messungen mit Druckindizierung und Aufnahme der Entflammung von früher Einspritzungen von Dieselmotorkraftstoff wurden bereits durchgeführt. Zur Zeit wird der Abgleich mit einem realen Kolbenmotor vorgenommen mit dem Ziel, den $T(t)$ oder $p(t)$ Verlauf im Bereich von $\pm 20^\circ$ KW um OT nachzubilden. Als Vergleich dienen experimentelle Daten von Schleppmessungen von einem Einzylinderaggregat der Universität Stuttgart.

Parallel zu den experimentellen Arbeiten wird am Institut eine Lösung entwickelt, um für das Einhubtriebwerk die Wärmefreisetzung aus dem Druckverlauf zu bestimmen.

In einem weiteren Schritt wird das Einhubtriebwerk für den Betrieb von gasförmigen Kraftstoffen erweitert, um das Zündverhalten im voll-homogenen Fall zu untersuchen. Auf Grund der guten Verdampfungseigenschaften von n-Butan wurde entschieden, die ersten Messungen mit diesem Kraftstoff durchzuführen. Dazu bedarf es der Neukonstruktion eines Saugrohrs, welche bis im Januar 2005 abgeschlossen sein sollte, sodass im Einhubtriebwerk gasförmige und flüssige Kraftstoffe parallel untersucht werden können. Neben Messungen im voll-homogenen Betrieb sind auch Untersuchungen im teil-homogenen Betrieb, beispielsweise durch eine kombinierte Einbringung von n-Butan und einem flüssigen Kraftstoff, denkbar.

Ab der zweiten Jahreshälfte 2005 sollen in Abhängigkeit von Betriebsparametern wie Druck und Temperatur im Brennraum, Abgasrückführung, Sauerstoffgehalt, Homogenisierungsgrad (bei später Gemischaufbereitung), Kraftstoffart sowie – nach Möglichkeit – gezielter Beeinflussung lokaler thermischer Randbedingungen erfolgen.

Referenzen

- [1] Schneider B., „**Experimentelle Untersuchungen zur Spraystruktur in transienten, verdampfenden und nicht verdampfenden Brennstoffstrahlen unter Hochdruck**“, Diss. ETH Zürich Nr. 15004, 2003
- [2] Wenger M., Margari O., Escher A., „**Different visualisation methods in high-temperature, high-pressure cell**“, Semesterarbeit WS 03/04, Nov. 2003
- [3] Gary S., „**Full-scale Schlieren Flow Visualization**“, Proc. Intl. Symposium on Flow Visualization, Seattle Washington, Sept. 1995
- [4] Settles G. S., „**Schlieren and Shadowgraph Techniques: Visualizing phenomena in transparent media**“, Springer Verlag, Berlin 2001
- [5] 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
- [6] 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
- [7] Eisen S., Ofner B., „**Schnelle Kompressionsmaschine – eine Alternative zum Transparentmotor?**“, Forschung Kompressionsmaschine, MTZ 9/2001, Seite 62 ff
- [8] Boulouchos, K., Margari, O., Escher, A., Barroso, G., Schneider, B., Kunte, S.: **Optical Diagnostic on Diesel Sprays for the Validation of Computer Aided Simulation**, Proceedings, 6. Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik, Baden-Baden, 2004
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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
- [12] Curran, H. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J., and Westbrook, C. K.: „**A Comprehensive Modeling Study of iso-Octane Oxidation**“, Combustion and Flame 129:253-280 (2002).
- [13] J.C. Hewson, „**Pollutant Emissions from Nonpremixed Hydrocarbon Flames**“, Ph. D. Dissertation, Engineering Sciences (Mechanical Engineering), University of California, San Diego, USA, 1997
- [14] Tanaka, S., Ayala, F., Keck, J.C.: „**A reduced chemical kinetic model for HCCI combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine**“, Combustion and Flame, 133 (2003), Seiten 467 – 481

- [15] Curran, H. J., Gaffuri, P., Pitz, W. J., and Westbrook, C. K.: **"A Comprehensive Modeling Study of n-Heptane Oxidation"**, Combustion and Flame 114 149-177 (1998)
- [16] Müller, U.C.: **"Reduzierte Reaktionsmechanismen für die Zündung von n-Heptan und iso-Oktan unter motorrelevanten Bedingungen"**, Dissertation, Fakultät Maschinenbau, Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, 1993
- [17] Miller, J.A.: **Chemkin-II: A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics**, Sandia National Laboratories Livermore, CA, 1996
- [18] Goodwin, D.G.: **Cantera**, Division of Engineering and Applied Science, California Institute of Technology, 2003
- [19] Frouzakis, C. E., Boulouchos, K.: **"Analysis and Reduction of the CH₄-Air Mechanism at Lean Conditions"**, Combust. Sci. and Tech., Vol. 159, Seiten 281-303 (2000)
- [20] Warth, M., Obrecht, P., Koch, Th., Boulouchos, K.: **"Vorausberechnung von Brennverlauf, NO- und Rußemissionen beim Dieselmotor – Optimierung und Validierung eines neuen Ansatzes"**, 9. Tagung Der Arbeitsprozess des Verbrennungsmotors, Graz, 2003
- [21] Harris, S.D., Elliott, L., Ingham, D.B., Pourkashanian, M., Wilson, M. : **"The optimisation of reaction rate parameters for chemical kinetic modelling of combustion using genetic algorithms"**, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg., Vol. 190, Seiten 1065-1090 (2000)
- [22] Elliott, L., Ingham, D.B., Kyne, A.G., Mera, N.S., Pourkashanian, M., Wilson, M. : **"A novel approach to the optimisation of reaction rate parameters for methane combustion using multi-objective genetic algorithms"**, Proceedings of Turbo Expo 2003, Atlanta, Georgia, 2003
- [23] Hamosfakidis, V., Reitz, R.D. : **"Optimization of a hydrocarbon fuel ignition model using genetic algorithms"**, Engine Research Center, University of Wisconsin-Madison, 2001
- [24] Streule, T.: **"Dreidimensionale Simulation von Selbstzündung, Verbrennung und Schadstoffbildung in DE-Dieselmotoren"**, Dissertation, Fakultät Maschinenbau, Universität Karlsruhe, 1993
- [25] E. Mastorakos, Y.M. Wright: **"Simulations of Turbulent Spray Auto-ignition with Elliptic Conditional Moment Closure"**, Proceedings of the European Combustion Meeting 2003