

AUTOREN



Michael Göldner, M. Sc.
 ist wissenschaftlicher Mitarbeiter des Lehrstuhls Fahrzeugantriebe am Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen (IVK) der Universität Stuttgart.



Christopher Blomberg, M. Sc.
 ist Berechnungsingenieur/CFD bei Winterthur Gas & Diesel Ltd. (Schweiz).



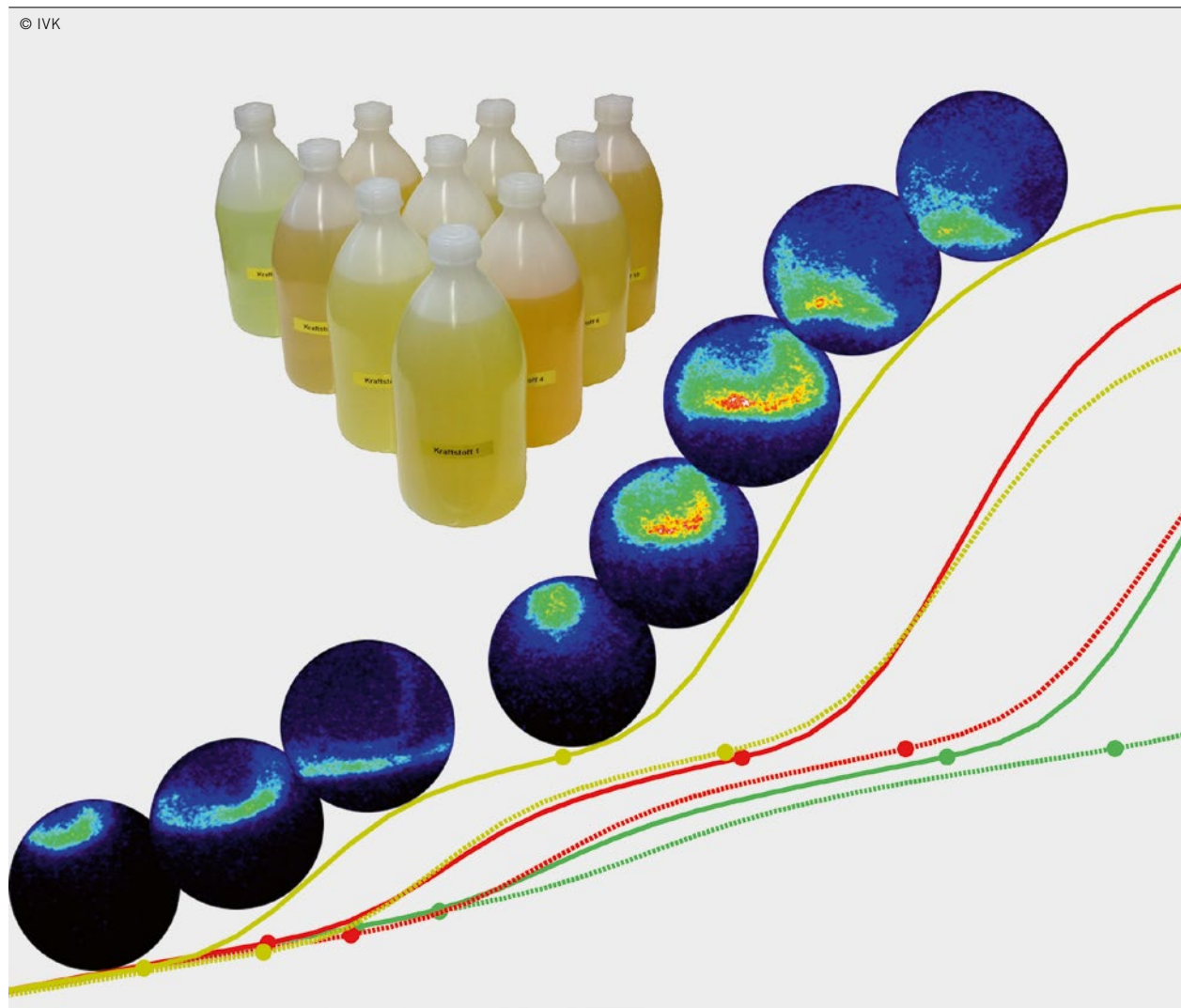
Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende
 ist Leiter des Lehrstuhls Fahrzeugantriebe am Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen (IVK) der Universität Stuttgart.



Dr. Yuri M. Wright
 ist Senior IT Engineer und leitet die motorische CRFD Gruppe am Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssystem von Prof. K. Boulouchos an der ETH Zürich (Schweiz).

Zündverhalten von Dieselkraftstoffen im homogenen Grenzfall

Für die Entwicklung von Dieselbrennverfahren mit hohem Vormischanteil sowie deren modellbasierte numerische Berechnung ist ein tiefgreifendes Verständnis der Zweistufenzündung von homogenen Dieselkraftstoff-Luftgemischen unverzichtbar. Daher wurden im FVV-Forschungsvorhaben Kraftstoffkennzahlen II detaillierte 1-D-/3-D-Zündverzugsmodelle erstellt, wobei die Ergebnisübertragbarkeit von Einzylinder-Motorversuchen mit Realkraftstoffen auf Messungen in einem Einhubtriebwerk mit Ersatzkraftstoffen erfolgreich realisiert werden konnte.



1	MOTIVATION
2	EXPERIMENTELLE UNTERSUCHUNGEN
3	NUMERISCHE MODELLIERUNG
4	ZUSAMMENFASSUNG

1 MOTIVATION

Die Verbrauchsreduzierung bei gleichzeitiger Senkung der Schadstoffemissionen sind Schwerpunkte der aktuellen Motorenentwicklung. Diesel-Brennverfahren mit partiell vorgemischter Ladung (PCCI) versprechen im Teillastbereich den besten Kompromiss bezüglich Steuerbarkeit, Emissionssenkung und hoher Effizienz [1]. Im Vergleich zum konventionellen Diesel-Brennverfahren wird der chemische Zündverzug (ZV) beim PCCI mit steigender Vormischrate dominanter [2]. Der Fokus aktueller Verbrennungsmodelle liegt jedoch auf dem physikalischen ZV [3]. Um einer gesamtlichen Modellierung des ZV von PCCI-Brennverfahren näher zu kommen, wurde im FVV-Forschungsprojekt Kraftstoffkennzahlen II zunächst der chemische ZV-Anteil näher betrachtet, indem der homogene Grenzfall (HCCI) untersucht wurde.

In motorischen Untersuchungen wurden der ZV von Dieselloststoffen im HCCI-Betrieb vermessen und dessen Korrelation zur

Cetanzahl (CZ) untersucht. Weiterhin wurden empirische 1-D-/3-D-ZV-Modelle auf Basis von 1-/3-Arrhenius-Ansätzen erstellt. Der charakteristischen Zweistufenzündung der HCCI-Verbrennung wird durch die Integration eines Wärmefreisetzungsmodells Rechnung getragen. Dies ist insofern bedeutsam, da der ZV der Hauptzündung maßgeblich von der freigesetzten Wärme der Niedertemperaturreaktionen (Cool Flame) abhängt. Die Bearbeitung des Forschungsprojekts erfolgte am IVK, Universität Stuttgart (Schwerpunkt motorische Untersuchungen) sowie am LAV, ETH Zürich (Schwerpunkt 1-D-/3-D-Modellierung).

2 EXPERIMENTELLE UNTERSUCHUNGEN

Am IVK wurden als Versuchsträger ein BASF-Prüfmotor [4] und ein Einzylinder-Versuchsmotor, abgeleitet von einem aktuellen Dieselmotor (OM642), eingesetzt. Zur Gewährleistung der Ergebnisübertragbarkeit zwischen beiden Motoren wurden die Messungen am OM642 mit zwei Brennraumgeometrien durchgeführt. Ein Flachkolben bildet die Hauptbrennkammergeometrie des BASF-Prüfmotors nach, der eingesetzte Omega-Muldenkolben entspricht dem Serien-OM642. Das geometrische Verdichtungsverhältnis bleibt konstant. Durch die Einbeziehung des BASF-Prüfmotors ist eine Überprüfung der CZ-Eignung als HCCI-Kenngröße möglich und das bestehende CZ-Verfahren [4] kann um einen HCCI-Test ergänzt werden. Die Projektziele erforderten eine Aktualisierung der am BASF-Prüfmotor verwendeten Messtechnik (unter anderem Druckindizierung, ZV-Auswertung). Zur Realisierung eines nahezu idealhomogenen Gemischs wurden beide Motoren mit einem zweiten Gemischbildner, dem Atomizer [5, 6], ausgestattet.

Acht Dieselloststoffe dreier CZ-Gruppen wurden vermessen, um unter anderem die Auswirkung von im Kraftstoffmolekül gebundenem Sauerstoff auf den ZV zu erfassen, **BILD 1** (links). Neben den in [4] festgelegten Betriebspunkten wurde im HCCI-Betrieb für jeden Kraftstoff eine Variation von Ansauglufttemperatur, AGR-Rate, Motorlast und -drehzahl durchgeführt.

Am LAV der ETH Zürich wurden in einem optisch zugänglichen Einhubtriebwerk (Rapid Compression Expansion Machine, RCEM) den Originalkraftstoffen korrespondierende Surrogate charakterisiert, **BILD 1** (rechts). Für diese lagen detaillierte Reaktionskine-

	Originalkraftstoffe			Surrogatekraftstoffe		
	CZ ~ 38	CZ ~ 55	CZ ~ 78	CZ ~ 38	CZ ~ 55	CZ ~ 78
Nicht mit Sauerstoff angereichert	CZ = 39,6 57,5 % _{Vol} DK B0 + 42,5 % _{Vol} Eurosuper	CZ = 55,6 DK B0-1	CZ = 78,6 HVO	CZ = 39,6 41 % _{Vol} Iso-Oktan + 59 % _{Vol} n-Heptan	CZ = 55,3 n-Heptan	CZ = 76 n-Dekan
	–	CZ 55,8 DK B0-2 + Ethyl-Hexylnitrat	–	–	CZ = 51,4 92,7 % _{Vol} n-Heptan + 7,3 % _{Vol} Toluol	–
Mit Sauerstoff angereichert	CZ = 36,5 66,5 % _{Vol} DK B0 + 33,5 % _{Vol} ETBE (4,4 % _{Vol} O ₂ -Gehalt)	CZ = 55,2 64 % _{Vol} DK B0 + 36 % _{Vol} RME (4,2 % _{Vol} O ₂ -Gehalt)	–	CZ = 37,8 68,2 % _{Vol} n-Heptan + 31,8 % _{Vol} n-Butanol (7,7 % _{Vol} O ₂ -Gehalt)	CZ = 50,1 90,9 % _{Vol} n-Heptan + 9,1 % _{Vol} n-Butanol (2,29 % _{Vol} O ₂ -Gehalt)	–

BILD 1 Motorkraftstoffe (BASF/OM642, links) und entsprechende Surrogate (RCEM) (© IVK)

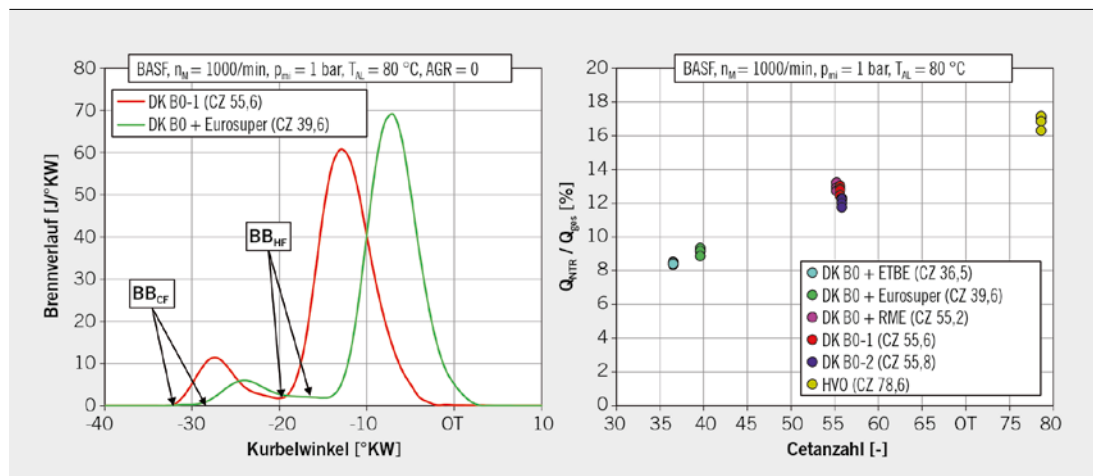


BILD 2 Brennvorgangvergleich zweier Kraftstoffe unterschiedlicher CZ bei homogener Verbrennung im BASF-Prüfmotor (links) sowie Verhältnis der Niedertemperatur- zur Gesamt-Wärmefreisetzung in Abhängigkeit der CZ (rechts) (© IVK)

tiken vor, die bei der anschließenden Modellentwicklung/-Parametrierung zur Anwendung gelangten.

2.1 ERGEBNISSE DER MOTORENVERSUCHE

Zum Nachweis der ordnungsgemäßen Funktion des BASF-Prüfmotors wurden Messungen nach [4] durchgeführt. Durch die eingesetzte Indizierung konnte gezeigt werden, dass, vor allem bei Kraftstoffen hoher CZ, bei den normierten Betriebspunkten eine Niedertemperaturwärmefreisetzung (Q_{NTR}) auftritt [6]. Da die CZ-Bestimmung nach [4] einen integralen Korrelationswert liefert, dem die Q_{NTR} aufgeprägt ist, scheint daher die in der Literatur beschriebene (zum Beispiel in [7]), gute Übereinstimmung der CZ mit den im HCCI-Betrieb gemessenen Größen (ZV und Q_{NTR}) folgerichtig.

Bei der Auswertung der HCCI-Versuche konnte, unabhängig von der Kraftstoffzusammensetzung, der erwähnte Zusammenhang zwischen der CZ und den HCCI-Kenngrößen nachgewiesen werden, **BILD 2** (links). So wird beispielsweise der ZV der Cool Flame mit steigender CZ geringer, was auf die zündbegünstigende Wirkung längerer Molekülketten von Kraftstoffen mit hoher CZ zurückge-

führt werden kann. Ursächlich hierfür ist die hohe Anzahl einfachgebundener Wasserstoffatome im Kraftstoffmolekül, die den Ausgangspunkt der Dehydration der Kraftstoffmoleküle und damit die beginnende Oxidation kennzeichnen. Das Aufbrechen von Mehrfachbindungen erfordert eine höhere Brennraumtemperatur [8], **BILD 3**. Anders stellt sich die Situation beim Beginn der Hochtemperatur-Reaktion dar. Wie in **BILD 3** dargestellt, ist die Brennraumtemperatur zu Beginn der Hot Flame für alle untersuchten Kraftstoffe im selben Betriebspunkt nahezu identisch und charakterisiert den Beginn der Wasserstoffperoxid-Reaktion [9]. Das Erreichen dieser Temperatur ist maßgeblich von der freigesetzten Wärmemenge der Niedertemperaturreaktionen Q_{NTR} abhängig, die ihrerseits mit der CZ korrelieren, **BILD 2** (rechts). Der frühere Brennbeginn von Kraftstoffen mit hoher CZ kann demnach als eine Kombination aus frühem Brennbeginn der Cool Flame bei gleichzeitig hoher Q_{NTR} interpretiert werden [6]. Die Auswertung der in der RCEM charakterisierten Surrogate führte zu identischen Erkenntnissen [6].

3 NUMERISCHE MODELLIERUNG

Sowohl am IVK der Uni Stuttgart als auch am LAV der ETH Zürich wurden Modelle entwickelt, um die HCCI-Verbrennung abzubilden. Beim Modell des IVK handelt es sich um ein Livengood-Wu-Integral [10], in dem eine auf einem 1-Arrhenius-Ansatz basierende ZV-Formulierung [5] integriert wird. Das Integral wird mittels der aus den Motorversuchen gewonnen Randbedingungen (Einspritz-/Brennbeginn, Zustandsgrößen im Zylinder) parametrisiert und iterativ gelöst. Zielgröße der Berechnung ist die der ZV-Formulierung inhärente Aktivierungsenergie. Wie in [6] ausführlich dargestellt, kann diese Aktivierungsenergie als Kraftstoffkennzahl interpretiert werden.

Am LAV wurde das in **BILD 4** schematisch dargestellte 3-Arrhenius-Modell [11, 12] weiterentwickelt, das die drei Bereiche der Zweistufenzündung langkettiger Kohlenwasserstoffe (Niedertemperaturzündung, Bereich mit negativem Temperaturkoeffizienten (Negative Temperature Coefficient, NTC) und Hochtemperaturzündung) abbildet. Schwerpunkt der Entwicklungen stellte unter anderem die Parametrierung der Modelle dar. Anhand der detaillierten Reaktionskinetiken wurden zuerst für alle Surrogate in motorrelevanten Druck- und Temperaturbereichen und für idealhomogene

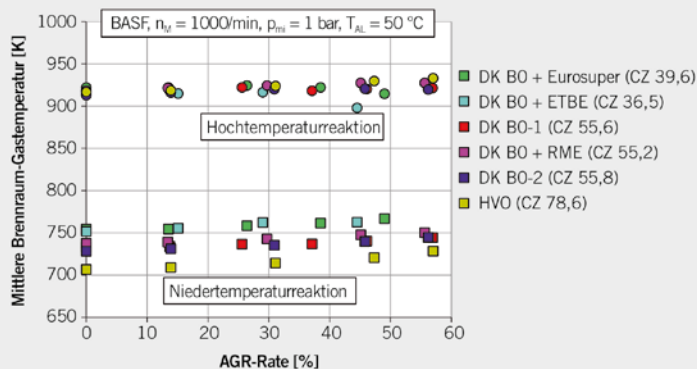


BILD 3 Mittlere Brennraumtemperatur zu Beginn der Cool- und Hot-Flame-Wärmefreisetzung für verschiedene AGR-Raten in einem exemplarischen Motorbetriebspunkt (© IVK)

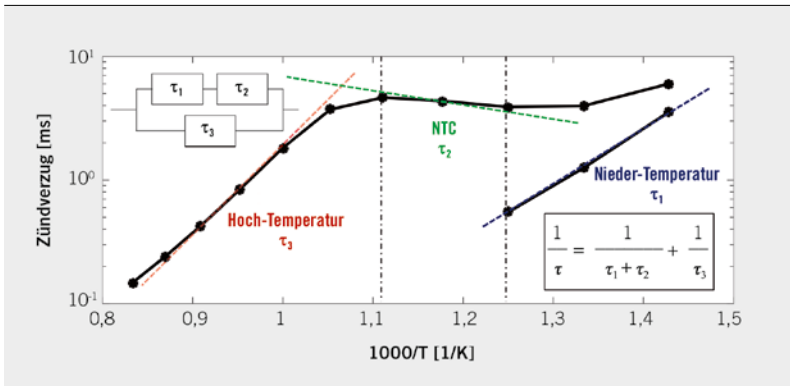


BILD 4 Zündverzögerung von Kraftstoffen mit Zweistufenzündung und 3-Arrhenius-Modell mit den charakteristischen Bereichen der Nieder- und Hochtemperaturzündung sowie negativem Temperaturkoeffizienten (NTC) © LAV

Gasgemische Zündverzögerung in Abhängigkeit vom Mischungszustand und der AGR-Rate berechnet (Perfectly Stirred Reactors, mittels des Senkin-Pakets [13] von Chemkin [14]).

Mit den so gewonnenen Daten können die Parameter des 3-Arrhenius-Modells vorabgestimmt werden. Diese Anfangsschätzung wird anschließend mit genetischen Algorithmen optimiert, wobei zur Validierung Messdaten aus der RCEM dienen [15]. Hierzu werden entlang des Druck- und Temperaturverlaufs im Verdichtungshub für die Nieder- und Hochtemperaturzündung separat zwei Livengood-Wu-Zündintegrale [10] integriert, **BILD 5** (links unten). Um den Druck- und Temperaturanstieg infolge der Wärme-

freisetzung der Niedertemperaturreaktionen berücksichtigen zu können, muss deren zeitlicher Verlauf und freigesetzte Wärmemenge vorhergesagt werden. Hierzu wurde ein „Cool Flame Heat Release“-Modell [16], basierend auf einem Wiebeansatz, **BILD 5** (links oben), entwickelt. Dieses wurde für alle Kraftstoffe in weiten motorrelevanten Bereichen erfolgreich validiert, wie in **BILD 5** (rechts oben) für die freigesetzte Wärmemenge exemplarisch dargestellt. Dabei setzen Kraftstoffe mit hohen CZ (zum Beispiel n-Dekan, blau) deutlich mehr Wärme frei als solche mit tiefen CZ (beispielsweise n-Butanol/n-Heptan, gelb). Als Folge davon werden für erstere deutlich kürzere Zündverzögerung vorhergesagt, was sehr

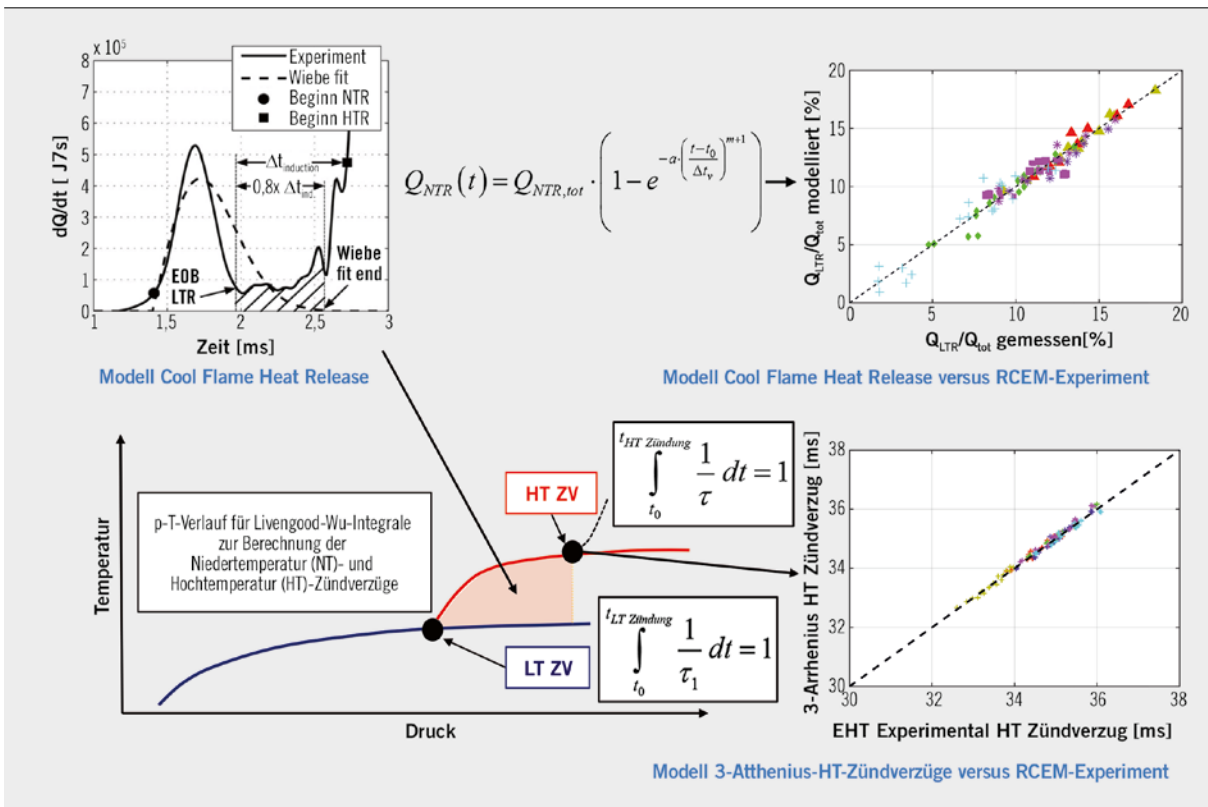


BILD 5 Kombination des 3-Arrhenius-Modells und dem entwickelten Modell für die Niedertemperaturwärme freisetzung (oben links und rechts), mit Livengood-Wu-Zündintegralen zur Vorhersage von Nieder- und Hochtemperaturzündung bei Druck-/Temperaturverläufen eines Verdichtungshubs (unten links) in der RCEM mit unterschiedlichen Surrogaten und Betriebsbedingungen – die berechneten ZV zeigen hervorragende Übereinstimmung mit den Messungen (unten rechts) (Farben gemäß Kraftstoffen in **BILD 1**) © LAV

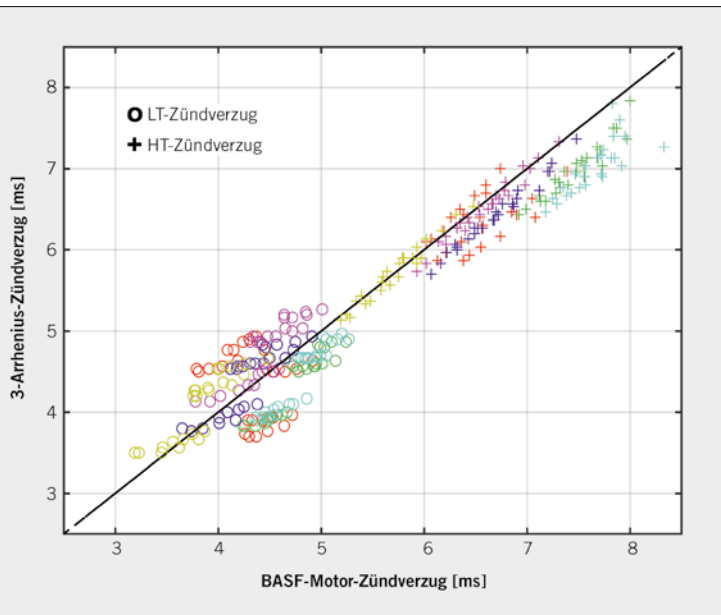


BILD 6 Zündverzugsvorhersagen des mittels Surrogaten in der RCEM parametrisierten Modells im Vergleich mit Messungen am OM642 mit den Motorkraftstoffen (Farben gemäß Kraftstoffen in **BILD 1**) © IVK und LAV

gut sowohl mit den in der RCEM gemessenen Daten als auch den Einzylinderuntersuchungen übereinstimmt, **BILD 2**. Dieser Ansatz ermöglicht eine vollständige Simulation der Hochtemperaturzündung, wie die gute Übereinstimmung für alle Brennstoffe über einen weiten Bereich von Betriebsbedingungen im RCEM gezeigt hat, **BILD 5** (rechts unten). Die Übertragbarkeit der Surrogatparametrierung auf den Motor, betrieben mit den Originalkraftstoffen, wurde in einem letzten Schritt untersucht, wobei eine sehr gute Übereinstimmung für weite Betriebspunktbereiche erfolgreich dargestellt werden konnte, **BILD 6**.

4 ZUSAMMENFASSUNG

Im FVV Projekt Kraftstoffkennzahlen II wurden Messungen an zwei mit Atomizer ausgerüsteten Versuchsmotoren und an einem optisch zugänglichen Einhubtriebwerk durchgeführt, um motorisch relevante Kraftstoffe (mit und ohne sauerstoffhaltigen Komponenten) im HCCI-Betrieb zu charakterisieren und so geeignete Kennzahlen zu erarbeiten. Hierbei konnten die für die gute Korrelation zwischen CZ- und HCCI-Verbrennung ursächlichen Hintergründe aufgezeigt und die Verwendung der Kennzahlen sowohl für die CZ- als auch für HCCI-Anwendungen bestätigt werden.

Im zweiten Projektteil wurden für das HCCI-Verfahren 1- und 3-Arrhenius-ZV-Modelle weiterentwickelt. Letzteres wurde für die Motorkraftstoffen entsprechenden Surrogate parametrisiert; die Optimierung erfolgte mittels genetischer Algorithmen. Die Initialparametrierung basierte dabei auf mit detaillierten Reaktionskinetiken berechneten Zündverzugsdaten. Durch Integration des 3-Arrhenius-ZV-Modells zusammen mit dem entwickelten „Cool Flame Heat Release“-Modell in zwei Zündverzugsintegrale nach Livengood-Wu ist das erstellte Modell voll vorhersagefähig. Die ausführliche Validierung erfolgte anhand der RCEM-Daten. Die Übertragbarkeit der Surrogatparametrierung auf den Motor konnte erfolgreich nachgewiesen werden.

LITERATURHINWEISE

[1] Reitz, R.: Directions in internal combustion engine research. In: Combustion And Flame 160 (2013), S. 1-8
 [2] Merker, G. P.; Teichmann, R.: Grundlagen Verbrennungsmotoren. Wiesbaden: Springer Vieweg, 2014
 [3] Rether, D.: Modell zur Vorhersage der Brennrate bei homogener und teilhomogener Dieselverbrennung. Stuttgart, Universität Stuttgart, Dissertation, 2012
 [4] DIN 51773: Prüfung flüssiger Kraftstoffe – Bestimmung der Zündwilligkeit (Cetanzahl) von Dieselmotoren mit dem BASF-Prüfmotor. Berlin: Beuth, 2010
 [5] Beck, S.: Beschreibung des Zündverzuges von dieselähnlichen Kraftstoffen im HCCI-Betrieb. Stuttgart, Universität Stuttgart, Dissertation, 2012
 [6] Blomberg, C. Göldner, M.: Kraftstoffkennzahlen II. Frankfurt a. M.: FVV-Hef 1107, 2016
 [7] Risberg, P.; Kalghatgi, G.; Angstrom, H.-E.; Wahlin, F.: Auto-ignition quality of Diesel-like Fuels in HCCI engines. In: SAE Technical Papers Series (2005), Nr. 2005-01-2127
 [8] Westbrook, C. K.; Pitz, W. J.; Leppard, W. R.: The Autoignition Chemistry of Paraffinic Fuels and Pro-Knock and Anti-Knock Additives: A Detailed Chemical Kinetic Study. In: SAE Technical Papers Series (1991), Nr. 912314
 [9] Tanaka, S.; Ayala, F.; Heywood, J. B.: Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives. In: Combustion And Flame 132 (2003), S. 219-239
 [10] Livengood, J.; Wu, P.: Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines. In: Symposium on Combustion (1955), Bd. 5 (1), S. 347-356
 [11] Weisser, G.: Modelling of combustion and nitric oxide formation for medium-speed DI Diesel engines. Zürich, ETH, PhD-Thesis, 2001
 [12] Vandersickel, A.; Hartmann, M.; Vogel, K.; Wright, Y. M.; Fikri, M.; Starke, R.; Schulz, C.; Boulouchos, K.: The autoignition of practical fuels at HCCI conditions: High-pressure shock tube experiments and phenomenological modeling. In: Fuel (2011), Bd. 93, S. 492-501
 [13] Kee, R. J.; Rupley, F. M.; Meeks, E.; Miller, J. A.: Chemkin-III: A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-phase Chemical and Plasma Kinetics. Albuquerque, Sandia National Laboratories SAND96-8216, 1996
 [14] Lutz, A. E.; Kee, R. J.; Miller, J.: SENKIN: A Fortran program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis. Albuquerque, Sandia National Laboratories SAND87-8248, 1988
 [15] Blomberg, C.; Mitakos, D.; Bardi, M.; Vandersickel, A.; Boulouchos, K.; Wright, Y. M.: Extension of the Phenomenological 3-Arrhenius Auto-Ignition Model for Six Surrogate Automotive Fuels. SAE International Journal Engines 9 (3): 1544-1558 (2016)
 [16] Mitakos, D.; Blomberg, C.; Wright, Y.M.; Obrecht, P.; Schneider, B.; Boulouchos, K.: Integration of a Cool-Flame Heat Release Rate Model into 3-stage Ignition Model for HCCI Applications and Different Fuels. In: SAE Technical Paper No. 2014-01-1268 (2014)

DANKE

Der am Institut für Verbrennungsmotoren bearbeitete Projektteil wurde durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) über die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen e.V. (AiF) (AiF-Nr. 17554 N/1), finanziell gefördert. Weitere finanzielle Förderung der am Laboratorium für Aerothermochemie und Verbrennungssysteme durchgeführten Arbeiten erfolgte durch Eigenmittel der Forschungsvereinigung Verbrennungsmotoren (FVV-Vorhaben-Nr. 1125), dem schweizerischen Bundesamt für Energie (S/1500801-01, S/1500818-01) sowie der Schweizerischen Erdölvereinigung. Das Vorhaben wurde von einem Arbeitskreis der FVV, unter der Leitung von Dr.-Ing. Frank Atzler, Continental AG, begleitet. Diesem Arbeitskreis gebührt unser Dank für die große Unterstützung. Ferner danken wir der OMV AG für die kostenlose Bereitstellung der Kraftstoffe sowie der Daimler AG für die Überlassung des Versuchsmotors und der kostenfreien Ersatzteilversorgung.



READ THE ENGLISH E-MAGAZINE

Test now for 30 days free of charge: www.mtz-worldwide.com

ATZ live

Netzintegration der Elektromobilität

Mobilitätswandel konsequent entwickeln

2. Internationale ATZ-Fachtagung
16. und 17. Mai 2017 | Berlin

INTEGRATION DEZENTRALER
ERNEUERBARER ENERGIEQUELLEN

NUTZUNG VON FLEXIBILITÄTEN BEI LADEPROZESSEN

DATENÜBERTRAGUNG UND DATA SECURITY

INFRASTRUKTUR UND REGULATORISCHE
RAHMENBEDINGUNGEN

/// KEYNOTE-VORTRÄGE

Christian Senger, Volkswagen AG

Volker Blandow, TÜV SÜD AG



© BMW

/// PARTNER

BMW i. 

ATZ live
Abraham-Lincoln-Straße 46
65189 Wiesbaden | Deutschland

Telefon +49 611 7878-131
Telefax +49 611 7878-452
ATZlive@springer.com

PROGRAMM UND ANMELDUNG
www.ATZlive.de