



Doctoral Thesis

Two approaches to auto-ignition modelling for HCCI applications

Author(s):

Vandersickel, Annelies

Publication Date:

2011

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-006776450> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

DISS. ETH No.19965

Two Approaches to Auto-ignition Modelling for HCCI Applications

A dissertation submitted to the
ETH ZURICH

for the degree of
DOCTOR OF SCIENCES

presented by

ANNELIES VANDERSICKEL

ir., K.U.Leuven
born April 19th, 1984
citizen of Belgium

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Konstantinos Boulouchos, ETH Zurich, examiner
Prof. Dr. Norbert Peters, RWTH Aachen University, Germany, co-examiner
Dr. Yuri Martin Wright, ETH Zurich, co-examiner

2011

Abstract

In the context of global warming and increasingly stringent emission regulations, the HCCI engine has been put forward as a promising alternative to the current internal combustion engines, combining the low NO_x and soot emissions of current gasoline engines with the diesel engine efficiency. The control of this promising combustion mode, however, is challenging, as ignition is no longer controlled by an external initiator, but solely depends on the auto-ignition of the fuel/air charge.

A profound understanding of the interaction between the fuel's specific ignition chemistry and the local charge conditions, and compact chemical reaction mechanisms to investigate the latter are thus a prerequisite for the further development of HCCI engines. The present study therefore proposes two approaches to auto-ignition modelling for HCCI applications. In contrast to previous HCCI modelling studies, this investigation focuses on practical, full boiling range fuels, for which at present no compact chemical reaction schemes exist.

Based on insights from literature and an extensive set of experimental shock tube data, two compact ignition models have been developed and generalized for application to six strongly differing naphtha and kerosene like fuels. The shock tube ignition delays constitute a first benchmark against which the performance of both models has been tested; whereas their validity for engine application has been assessed by means of heat release and pressure data from HCCI engine experiments for a wide range of operating conditions, with EGR rates up to 60%.

The first approach employs an ignition integral expression combined with a 3-Arrhenius model for the fuel dependent chemical ignition delay, to quickly assess the impact of changing engine operating conditions on ignition. In

addition to the main ignition delay, the 3-Arrhenius model is now capable of predicting the start of the cool flame heat release typically observed in HCCI engines. Especially for homogeneous operating conditions, very good agreement between the measured and predicted trends in the ignition delays was found. The integral model has further confirmed that shock tube ignition data is highly relevant for homogeneously operated engine experiments.

As second approach, a compact reaction mechanism has been proposed, employing 8 species and 7 reactions to predict – in addition to ignition delays – the evolution of heat release, pressure, temperature and key species during ignition. Despite the simplicity of the model, also the fuel-to-fuel variations in the ignitability and cool flame heat release observed in the engine experiments were found to be reproduced very well.

Both models have proven to be elaborate enough to model a wide range of fuels using the same overall scheme, upon changing the model parameters only. Especially the global reaction model, but also the 3-Arrhenius model combined with a cool flame heat release model, therefore present a promising tool to allow parametric studies for practical engine fuels for which at present no chemical reaction mechanisms are available – provided experimental data for model parameterization is available. Additionally, the models have the potential to speed up HCCI engine calculations for known fuels, by mapping the results of larger detailed reaction mechanism onto one of these compact schemes.

Zusammenfassung

Im Hinblick auf die globale Erderwärmung und immer strenger werdenden Emissionsvorschriften, stellt die Anwendung eines HCCI-Brennverfahrens in einem Motor eine vielversprechende Alternative zum konventionellen Verbrennungsmotor dar. Das HCCI-Brennverfahren kombiniert dabei die niedrigen NO_x- und Russemissionen eines Benzinmotors mit der hohen Effizienz eines Dieselmotors. Da bei der HCCI-Verbrennung eine Selbstzündung des Kraftstoff/Luft-Gemisches stattfindet, stellt die Kontrolle des Brennverfahrens vor allem hinsichtlich der Zündung eine Herausforderung dar.

Ein vertieftes Verständnis der Wechselwirkungen zwischen der kraftstoff-spezifischen Zündchemie und den lokalen Mischungszuständen sowie kompakter Reaktionsmechanismen zur Untersuchung dieser Vorgänge stellt eine äußerst wichtige Voraussetzung dar bezüglich der Weiterentwicklung von HCCI-Motoren. Die vorliegende Arbeit stellt deswegen zwei unterschiedliche Ansätze zur Modellierung der Selbstzündung bei HCCI-Anwendungen vor. Im Gegensatz zu früheren Arbeiten, beschäftigt sich diese Studie mit praktischen Multikomponenten-Kraftstoffen, für welche momentan keine detaillierten Reaktionsmechanismen vorhanden sind.

Basierend auf Erkenntnissen aus der Literatur und eines umfangreichen Satzes an experimentellen Daten aus Untersuchungen mit einem Stosswellenrohr, wurden zwei kompakte Zündmodelle entwickelt und für die Anwendung auf sechs stark unterschiedliche Naphta- und Kerosen-ähnliche Kraftstoffe generalisiert. Die in den Stosswellenrohrexperimenten gemessenen Zündverzögerungen bilden die Grundlage für die erste Validierung der beiden Modelle. Die Modellvalidierungen für motorische Bedingungen über einen weiten Betriebsbereich und AGR-Raten bis zu 60%, wurden anhand von gemessenen Druck- und Brennverläufen aus einem HCCI-Versuchsmotor durchgeführt.

Der erste Modellierungsansatz basiert auf der Kombination eines Zündintegrals mit einem 3-Arrhenius-Modells zur Beschreibung des kraftstoffspezifischen chemischen Zündverzuges. Dieser Ansatz erlaubt eine sehr schnelle Abschätzung des Einflusses der Betriebsbedingungen auf die Zündung. Dabei konnte speziell für homogene Betriebsbereiche eine sehr gute Übereinstimmung von gemessenen und berechneten Daten erreicht werden. Die Ergebnisse zeigen zudem, dass die aus den Stosswellenrohrexperimenten gewonnenen Daten von hoher Relevanz für die homogenen Betriebspunkte im HCCI-Motor sind.

Der zweite Ansatz beinhaltet die Verwendung eines kompakten Reaktionsmechanismus, mit welchem sich mittels 7 Reaktionen und 8 Komponenten zusätzlich zum Zündverzug die Evolution von Wärmefreisetzung, Druck, Temperatur und wichtigen Spezieskonzentrationen während der Zündung vorausberechnen lassen. Trotz der relativen Einfachheit des Reaktionsmechanismus ist dieser in der Lage, die Einflüsse der Kraftstoffeigenschaften auf das Zündverhalten und die Wärmefreisetzung während der Niedertemperaturzündung („Cool Flame“), welche in den motorischen Experimenten beobachtet wurden, gut abzubilden.

Beide Modellansätze haben sich für die Modellierung der Zündung von stark unterschiedlichen Kraftstoffen unter der Verwendung eines globalen Schemas mit kraftstoffspezifischen Modellparametern als ausreichend komplex erwiesen. Speziell das globale Reaktionsmodell, aber auch das 3-Arrheniusmodell in Kombination mit einem „Cool Flame“ Wärmefreisetzungsmodell, stellen einen vielversprechenden Ansatz zur Simulation von praktischen und motorisch relevanten Kraftstoffen dar unter der Voraussetzung, dass experimentelle Daten für die Parametrierung vorhanden sind. Zusätzlich bieten beide Modelle die Möglichkeit, eine deutliche Verkürzung der Rechenzeiten von HCCI-Motorsimulationen mit bekannten Kraftstoffen durch Parametrierung von grossen Reaktionsmechanismen auf die kompakten Modelle zu erreichen.