

Politechnika Śląska Wydział Inżynierii Środowiska i Energetyki Instytut Techniki Cieplnej

Rozprawa doktorska

Obszerne streszczenie

Experimental and numerical investigation of combustion process of conventional and alternative fuels in Internal Combustion Engine

Gliwice, Marzec 2019

Autor:

Grzegorz Kruczek Politechnika Śląska Wydział Inżynierii Środowiska i Energetyki Instytut Techniki Cieplnej ul. Konarskiego 22 44-100 Gliwice Polska website: www.itc.polsl.pl/gkruczek e-mail: Grzegorz.Kruczek@polsl.pl

Promotor:

dr hab. inż. Wojciech Adamczyk Wydział Inżynierii Środowiska i Energetyki, Gliwice, Polska

Recenzenci:

1-szy recenzent: Prof. dr hab. inż. Andrzej Teodorczyk Politechnika Warszawska, Warszawa, Polska

2-gi recenzent: Dr hab. inż. Zdzisław Stelmasiak, prof. ATH Akademia Techniczno-Humanistyczna w Bielsku Białej, Bielsko Biała, Polska

Pierwsza edycja Copyright © 2018, Grzegorz Kruczek Instytut Techniki Cieplnej Politechnika Śląska

Spis treści

1	1 Wprowadzenie						
	1.1	Cele p	racy	3			
	1.2	Literat	ture review	4			
2	Bad	lania e	ksperymentalne	7			
	2.1	Stanov	visko pomiarowe	7			
	2.2	Wynik	i badań eksperymentalnych	9			
3	Mo	del nui	neryczny	17			
	3.1	Model	e spalania	17			
		3.1.1	Model kinetyczny	17			
		3.1.2	Zredukowany kinetyczny mechanizm chemiczny	20			
		3.1.3	Model zapłonu	21			
4	Wyı	niki ob	liczeń numerycznych	23			
	4.1	Model	owanie spalania	23			
		4.1.1	Stopień wypalenia paliwa	23			
		4.1.2	Porównanie przebiegu ciśnienia	28			
	4.2	Analiz	a emisji związków szkodliwych	31			
		4.2.1	Tlenek węgla	31			
		4.2.2	Węglowodory	35			

	4.2.3	Tlenki azotu	•••	 	 	 	 	35
5	Podsumov	vanie i wnio	ski					39
Bi	bliography							48

Rozdział 1

Wprowadzenie

Rosnące ograniczenia dotyczące spalin w dziedzinie motoryzacji zmuszają inżynierów do budowy coraz to nowszych i bardziej skomplikowanych silników spalinowych. Korzystanie z silników nie ogranicza się tylko do zastosowań w branży motoryzacyjnej. W ostatnich latach zaobserwowano zwiększone zainteresowanie małymi silnikami stacjonarnymi wykorzystywanymi do kogeneracji ciepła i energii elektrycznej.

Wadą tego podejścia jest, jak pokazują statystyki w tabeli 1.1, wyższa emisja prawie wszystkich szkodliwych związków w porównaniu z sektorem produkcji energii. Dlatego też naukowcy określili główne wyzwania dla nowoczesnych silników spalinowych [38, 55, 68, 70, 71]:

Tablica 1.1: Emisje zanieczyszczeń powietrza i gazów cieplarnianych z sektora energetycznego i silników spalinowych w odniesieniu do ogólnej emisji dla Unii Europejskiej, 2016 r [19]

Sector	CO_2	N_2O	CH_4	$\rm NMVOC^1$	PM2.5	PM10	NO_x
Energy production	27.80%	2.83%	0.87%	8.38%	4.35%	4.84%	17.15%
Road Transport	24.00%	3.80%	0.26%	9.06%	10.87%	10.36~%	38.86~%

- poprawa sprawności konwersji [68,71],
- nowe zastępcze paliwa w celu zapewnienia zrównoważonego zasilania ropą naftową dla silników i obniżenia emisji dwutlenku węgla [55, 70],
- poprawa procesu spalania w celu zmniejszenia emisji sadzy, PM i gazów cieplarnianych [38,70],
- zmniejszenie zużycia pierwotnych zasobów energii [68,71].

¹niemetanowy lotny związek organiczny

Wszystkie te wyzwania mają wspólny rezultat, mianowicie redukcję emisji CO_2 i szkodliwych związków ze spalania paliw kopalnych. Można to osiągnąć na dwa sposoby. Po pierwsze, poprawa sprawności cieplnej silnika obniża zużycie paliwa.

Redukcję dwutlenku węgla można również osiągnąć dzięki zastosowaniu alternatywnych paliw kopalnych. Niemniej jednak paliwa gazowe są najczęściej wykorzystywane w jednostkach stacjonarnych, ponieważ często biopaliwo jest produktem ubocznym innych procesów, takich jak fermentacja beztlenowa na składowiskach, piroliza biomasy, zgazowanie odpadów stałych i inne.

Biopaliwa pochodzące z biomasy mają potencjał skutecznego ograniczenia emisji CO₂. Biogaz pochodzący z fermentacji beztlenowej jest wciąż modną technologią [22,46], a wraz z wprowadzeniem biopaliw drugiej generacji technologia zyska na znaczeniu.

Średni skład surowego biogazu przedstawiono w tabeli 1.2. Widać, że biogaz jest również znaczącym źródłem zanieczyszczenia metanem i dwutlenkiem węgla, gdy nie jest używany.

Z drugiej strony stwierdzono, że biogaz jest gorszym paliwem niż paliwa konwencjonalne ze względu na niską wartość opałową i szybkość płomienia. Dlatego, w zależności od jego zastosowania, jest często wzbogacany wodorem lub metanem (transport) lub wtryskiwany do istniejącej sieci gazu ziemnego. W związku z tym biogaz, pomimo jego wad, może być skutecznie wykorzystywany.

Związek	udział molowy
Metan	60%
Dwutlenek węgla	35%
Para wodna	3.1%
Azot	1%
Tlen	0.3%
Wodór	< 1%
Amoniak	$0.7 \mathrm{mg/m^3}$
Siarkowodór	500mg/m^3

Tablica 1.2: Średni skład surowego biogazu

Kolejnym wyzwaniem jest zmniejszenie zanieczyszczeń powietrza pod względem tlenków azotu, cząstek stałych (PM 2,5 i PM 10), węglowodorów i tlenku węgla. Obecnie redukcję szkodliwych związków uzyskuje się za pomocą trójdrożnego katalizatora do redukcji emisji tlenków azotu, tlenku węgla i węglowodorów oraz filtra cząstek stałych do redukcji emisji cząstek stałych. [23]. Podobny rezultat można jednak osiągnąć dzięki starannej kontroli procesu spalania.

Co więcej, spalanie wewnątrz komory nie zostało w pełni zrozumiane. [63]. Dane eksperymentalne są ograniczone, ponieważ proces spalania jest szybki, a niektóre parametry, takie jak temperatura, szybkość uwalniania ciepła i stopień wypalenia paliwa są trudne lub nawet niemożliwe do zmierzenia. Możliwe jest jednak ich obliczenie za pomocą metod numerycznych w zakresie numerycznej mechaniki płynów (CFD).

Sama symulacja spalania jest bardzo złożonym problemem ze względu na fakt, że często wpływają na nią stochastyczne turbulencje. Nawet proste spalanie metanu wymaga setek reakcji chemicznych.

Niniejsza rozprawa opisuje kompletną metodologię wykorzystaną do określenia modelu numerycznego silnika spalinowego stosując zarówno kody Ansys Fluent, jak i Forte, którą można postrzegać jako cyfrową reprezentację rzeczywistego systemu. Ponadto badania koncentrują się również na eksperymentalnym badaniu procesu spalania paliw konwencjonalnych i alternatywnych. Eksperymentalne stanowisko badawcze zostało zaprojektowane, opracowane i zmodernizowane tak, aby działało we wszystkich nowoczesnych trybach (GDI, HCCI, PCCI i RCCI). Dlatego uznano go za uniwersalną i nowoczesną jednostkę zdolną do zaawansowanych badań.

Dlatego przeprowadzono kompleksowe badania eksperymentalne poparte symulacjami numerycznymi w celu wyjaśnienia różnic między spalaniem metanu i biogazu.

1.1 Cele pracy

Główne cele pracy:

- rozpoznanie aktualnej wiedzy na temat modelowania silników spalinowych,
- wybranie możliwych technik numerycznych umożliwiających symulację procesu,
- opracowanie eksperymentalnego stanowiska badawczego zdolnego do badania spalania różnych paliw ciekłych i gazowych,
- wybranie najdokładniejszej techniki modelowania poprzez walidację wyników numerycznych względem danych eksperymentalnych,
- zbadanie spalania, propagacji frontu płomienia, tworzenia szkodliwych związków wewnątrz komory spalania za pomocą procesu wizualizacji CFD.

Cele osiągnięto za pomocą:

- przeglądu literatury przedmiotu,
- wdrożenia filozofii małych kroków do symulacji numerycznych (aby nie wprowadzać zbyt wielu złożoności w jednym kroku),
- podziału symulacji na kilka etapów (prosty model 2D, model 3D ze spalaniem i bez spalania przy użyciu prostego podejścia, model 3D ze złożonym modelem spalania),

- badań eksperymentalne w celu zebrania niezbędnych danych do walidacji modelu numerycznego,
- badania dokładności kodów numerycznych pod kątem Ansys Fluent i Ansys Reaction Design Forte,
- opracowania modelu numerycznego i jego testowanie w szerokim zakresie parametrów pracy,
- przedstawienia wyników i wpływu składu paliwa na pracę silnika spalinowego.

1.2 Literature review

Literatura przedmiotu w przypadku paliw gazowych głównie skupia się na paliwie opartym na metanie. CNG może być stosowane zarówno w silnikach Otto, jak i Diesla ze względu na niską temperaturę samozapłonu, łatwość mieszania paliwa z utleniaczem i wyższą liczbę oktanową, która umożliwia zastosowanie wyższych stopni kompresji [61]. Ponadto sprawność cieplna wzrasta o 1% dzięki wyższej sprawności spalania [6]. Emisje weglowodorów, tlenku wegla i dwutlenku wegla są znacznie niższe w porównaniu ze spalaniem benzyny [5,28]ze względu na lepsze wymieszanie z powietrzem, wyższy stosunek H/C i temperaturę spalania. Wadą takiego spalania jest wyższa zawartość NOx (o prawie 50% większa w stosunku do benzyny). Inną wadą jest większe zużycie paliwa z powodu niższej wartości opałowej mieszanki paliwowo-powietrznej, a tym samym niższy stosunek mocy do pojemności [26]. Ponadto niższa laminarna prędkość spalania [56] może powodować przedłużone spalanie w trakcie suwu rozpreżania lub nawet spalanie w kolektorze wydechowym. CNG ma również znacznie dłuższą fazę początkowego rozwoju zapłonu, która wymaga zaawansowanych technik zapłonu i dłuższych czasów pracy świecy zapłonowej [43]. Niemniej jednak gaz ziemny jest nadal paliwem kopalnym, a zatem zasoby sa ograniczone, a emisja spalin powoduje efekt cieplarniany.

Jednym z paliw gazowych opartych na metanie jest biogaz pochodzący z fermentacji beztlenowej. Zalety biogazu są podobne do gazu ziemnego. Wraz ze wzrostem zawartości gazu obojętnego w paliwie, liczba oktanowa wzrasta, a temperatura spalania spada. Efekt ten pozwala na bardzo wysoki stopień kompresji bez stuku, dodatkowo zwiększa sprawność cieplną i utrzymuje bardzo niski poziom emisji dla szerokiego zakresu zawartości CO₂ [11, 30,58]. Główną zaletą biogazu nad metanem jest znacznie niższa emisja tlenków azotu. Główną wadą spalania biogazu w ICE jest niska laminarna prędkość spalania, a dodatkowo dłuższa początkowa faza rozwoju płomienia [2,10,24]. W niektórych przypadkach może to spowodować opóźnione spalanie, które zachodzi wewnątrz kolektora wydechowego i wypadanie zapłonów, które prowadzą do silnych skoków ciśnienia pomiędzy cyklami [33, 52].

W ostatnich latach badania eksperymentalne dotyczące spalania w silników spalinowych zostały uzupełnione o dodatkową analizę numeryczną w zakresie numerycznej mechaniki płynów (CFD).

W większości literatury do silnika z zapłonem iskrowym zastosowano wstępnie wymieszany (premixed) model spalania. Szczegółowa analiza wstępnie wymieszanego modelu spalania została przedstawiona w sekcji 3.1.1. Można znaleźć przykład zastosowania modelu numerycznego do badania wpływu mieszanek biogaz-wodór w silnikach spalinowych działających z różnymi ciśnieniami doładowania [48]. Ponadto model wstępnie wymieszany został zastosowany przez autora [16] do zbadania wpływu czasu wtrysku metanu na zmiany między cyklami. Wyniki pokazały, że metan zapewnia bardziej chaotyczne spalanie; jednakże autorzy doszli do wniosku, że dla pewnego okna czasowego wtrysku otrzymano wysoką powtarzalność. W pracy [74] zastosowano bardziej zaawansowany model. Autor zastosował model extended coherent flame model (ECFM) do modelowania spalania mieszanki uwarstwionej. Głównym celem było zbadanie wpływ różnych kształtów tłoków i strategii wtrysku paliwa. Większość badań została przeprowadzona przy użyciu kodu AVL Fire specjalizującego się w modelowaniu ICE, który wykorzystuje model CFM w połączeniu ze zredukowanym mechanizmem kinetycznym. Kod został również użyty do symulacji wpływu dodatku wodoru do paliwa [21, 29, 34]. Wyniki pokazuja pozytywny wpływ wodoru na emisje; jednakże przy wyższej zawartości H₂ odnotowuje się spalanie stukowe. Spalanie modelowano również przy użyciu kodu open source OPEN Foam z podejściem CFM [62] aby modelować rozciągniecie płomienia w silnikach o zapłonie iskrowym. Innym przykładem wykorzystania modelu ECFM jest [69], gdzie został wykorzystany opracowany przez autorów kod do symulacji LES do badania zmienności między cyklami.

Podejściem należącym do grupy modeli spalania wstępnie zmieszanego (premixed) jest równanie G opracowane przez [31,51]. Bardziej szczegółowe omówienie równania G przedstawiono w sekcji 3.1.1. W pracy [37] równanie G jest wykorzystywane do modelowania spalania metanu w silniku z zapłonem iskrowym przy użyciu niedawno opracowanego komercyjnego kodu Ansys Reaction Design Forte, który łączy wstępnie zmieszany model ze szczegółową kinetyką rozwiązaną przez Ansys Reaction Design Chemkin [3,4]. Wspomniana aplikacja nie została dotychczas dokładnie omówiona w literaturze. Pilnie potrzebna jest praca nad kodem Forte z weryfikacją danych eksperymentalnych i porównaniem z innymi szeroko stosowanymi kodami.

Inną ostatnio stosowaną metodą modelowania spalania jest modelowanie szczegółowej kinetyki. Jednak metoda ta jest bardzo wymagająca obliczeniowo. Dlatego większość autorów stosujących taką technikę koncentruje się wyłącznie na modelowaniu spalania bez mechaniki płynów [18,79]. Wyniki obliczeń wykazują bardzo dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi dotyczącymi składu gazów spalinowych. Szczegółowa kinetyka została wprowadzona do kodów CFD stosunkowo niedawno w postaci zredukowanych mechanizmów kinetycznych. Zredukowany mechanizm kinetyczny jest wywodzi się z ogólnego mechanizmu zawierającego szeroki zbiór paliw i związków chemicznych, ich reakcji, danych termodynamicznych i chemicznych. W pracy [72] modelowano mieszankę metan / wodór / dwutlenek węgla przy użyciu LES ze zredukowanym mechanizmem kinetycznym. Autor artykułu [66] wskazuje na zalety szczegółowej kinetyki oraz możliwości, które pozwalają modelować nawet powstawanie sadzy i PM jednocześnie śledząc ich cząstki.

W przeciwieństwie do Ansys Fluent, kod Forte został opracowany z myślą o specjalizacji w dziedzinie silników spalinowych. Główną różnicą między kodami jest metoda numeryczna stosowana do oceny równań różniczkowych cząstkowych (PDE). ANSYS Fluent korzysta z dobrze znanej metody skończonych objętości (FVM), podczas gdy Forte używa immersed boundary method (IBM) [49]. Konsekwencje tej procedury można zaobserwować głównie w podejściach stosowanych do modelowania ruchu części silnika, a także do generowania siatki obliczeniowej. Fluent stosuje metody zaprojektowane dla FVM, tj. remeshing, layering i smoothing. Operacje te maja bezpośredni wpływ na jakość siatki i czas obliczeniowy, ponieważ są one wywoływane w każdym momencie obliczeń. Z drugiej strony, Forte wykorzystuje inne podejście do dyskretyzacji przestrzeni i czasu w postaci IBM z metoda ALE. W skrócie, metoda ta pozwala podzielić ruch geometrii części silnika i siatki numerycznej na dwa oddzielne i niezależne procesy [1, 50]. Geometria jest zanurzona w domenie siatki i może swobodnie się w niej poruszać. Dlatego siatka jest nieruchoma, a podczas ruchu geometrii komórki siatki nie zmieniają swojej pozycji. W przypadku, gdy geometria przecina granicę siatki, zostaną dodane dodatkowe komórki, aby wypełnić pustą geometrię bez siatki.

Innym ważnym aspektem jest konieczność omówienia znaczenia biopaliw w sektorze energetycznym. Ze względu na fakt, że zasoby paliw kopalnych są ograniczone, a zapotrzebowanie na energię stale wzrasta, biopaliwa stają się coraz bardziej atrakcyjne [14, 27]. wWdług pracy [15] korzyści płynące z biopaliw obejmują większe bezpieczeństwo energetyczne, mniejszy wpływ na środowisko, oszczędności walutowe i kwestie społecznoekonomiczne związane z sektorem wiejskim. Dlatego inwestorzy są ostatnio bardziej skłonni do inwestowania w rozwój biopaliw w produkcji i utylizacji [9]. Główną wadą produkcji biopaliw i biomasy jest trylogia żywność-energia-środowisko [73]. Ziemia potrzebna do produkcji żywności może zostać wykorzystana do produkcji biopaliw, co może prowadzić do głodu zwłaszcza w krajach rozwijających się. Z drugiej strony ostatnie zmiany w technologii produkcji biogazu z odpadów rolniczych [25] stanowią realną alternatywę dla produkcji żywności i biopaliw.Podsumowując, zapotrzebowanie na paliwa alternatywne rośnie, a w przyszłości może być podstawowym źródłem energii w sektorze silników spalinowych.

Rozdział 2

Badania eksperymentalne

2.1 Stanowisko pomiarowe

Eksperymentalny silnik badawczy został zbudowany na podstawie jednocylindrowego silnika badawczego wyprodukowanego w 1952 r. przez Hermanna Rufa w Mannheim w Niemczech. Reszta części stanowiska badawczego, tj. jednostka sterująca prędkością obrotowa silnika, która składa się z silnika prądu stałego wraz z jednostka zarządzajaca [35, 65], system przygotowania paliwa gazowego z układem wtryskiwaczy gazowych, system przygotowania paliwa ciekłego z bezpośrednim i pośrednim systemem wtrysku, system chłodzenia do pomiaru i kontroli temperatury czynnika chłodzącego oraz system pomiarowy NI cRIO z opracowaną w NI LabVIEW aplikacją pomiarową zostały zbudowane w Instytucie Techniki Cieplnej na Politechnice Slaskiej podczas przygotowania rozprawy doktorskiej. Ponadto głowica silnika, kolektor dolotowy i kolektor wydechowy zostały zmodernizowane tak, aby pasowały do wtryskiwaczy bezpośrednich i pośrednich cieczy, wtryskiwaczy gazowych, urządzeń pomiarowych w zakresie sondy lambda, rurki pomiarowej analizatora gazu i termopary do pomiaru temperatury spalin. Dodatkowo, zaawansowana jednostka sterująca silnikiem w postaci LINK ECU [36] została nabyta i połączona ze stanowiskiem badawczym, aby umożliwić zaawansowane ustawienia wtrysku i synchronizacji zapłonu. Ponadto do celów badania spalania układ pomiarowy składał się z przetwornika ciśnienia [32], analizatora spalin [59], miernika strumienia masowego paliwa [17] opartego na zjawisku Coriolisa i różnych termopar, w celu obliczenia indykowanych profilów ciśnień, sprawności silnika, emisji (i.e., O₂, CO₂, HC, CO and NO) jak również i innych parametrów termodynamicznych (i.e., HRR, HR, MFB, IMEP, temperatura wewnątrz cylindra, straty ciepła i inne). Doświadczenia przeprowadzono dla pięciu wartości współczynników nadmiaru powietrza (λ : 0.95, 1.00, 1.05, 1.10, 1.20), i trzech katów wyprzedzenia zapłonu 30, 35, 40 OWK.

Specyfikacja silnika badawczego jest przedstawiona w tabeli 2.1. Jest to czterosuwowy silnik wolnossący o zapłonie iskrowym (SI) z płaską głowicą i płaskim tłokiem, wyposażony w dwa górne zawory i świecę zapłonową umieszczoną z boku między zaworami. Wałek rozrządu silnika znajduje się poniżej tłoka (Cam-in-block). Dlatego położenie krzywki rozrządu jest przekazywane do wahacza za pośrednictwem popychaczy umieszczonych na zewnątrz bloku silnika. Smarowanie silnika uzyskano za pomocą pompy oleju mechanicznie połączonej z wałkiem rozrządu.

Tablica 2.1: Charakterystyczne parametry techniczne silnika (EVO–zawór wylotowy otwarty, EVC–zawór wylotowy zamknięty, IVO–zawór wlotowy otwarty, IVC–zawór wlotowy zamknięty)

Średnica×dkok	$65{\times}100 \text{ mm}$
Cykl	4S
Ilość cylindrów	1
Stopień kompresji	4 - 10:1
Maksymalna moc	10 kW
Pojemność skokowa	331 cm^3
Długość korbowodu	200 mm
Maksymalne otwarcie zaworu	4 mm
EVO	110 OWK po GMP
EVC	340 OWK po GMP
IVO	360 OWK przed GMP
IVC	170 OWK przed GMP

Układ wydechowy został wyposażony w kilka urządzeń pomiarowych. Najpierw zapewniono gniazdo dla sondy lambda; naprzeciwko umierszono sondę analizatora gazu i termoparę typu K do pomiaru temperatury spalin.

Wreszcie zmodyfikowano chłodzenie silnika, aby utrzymać stabilną temperaturę i wydłużyć czas pracy. System chłodzenia grawitacyjnego zastąpiono obiegiem chłodzenia wodnego. Temperaturę wody zmierzono za pomocą dwóch termopar typu K dla linii gorącej i zimnej, a przepływ objętościowy wody zmierzono za pomocą wodomierza. Termopary znajdowały się przy wejściu do głowicy. Sprzęt pomiarowy został podłączony do systemu NI cRIO [47] w celu gromadzenia i interpretacji danych. W rezultacie temperatura w trakcie kampanii eksperymentalnej mieściła się w wąskim zakresie od 80°C do 85°C.

Skład biogazu mierzono za pomocą analizy FTIR. Próbki zbierano do worków tedlar przed i po badaniach eksperymentalnych. Uzyskany skład przedstawiono w tabeli 2.2 wraz z estymacją błędu statystycznego.

Parametry robocze przedstawiono w tabeli 2.3.

Procedura doświadczalna była poprzedzona oceną stopnia kompresji (CR). CR ustalono stosując pomiar objętości w górnym martwym punkcie. Wynikowa wartość CR wynosiła 9.99.

Następnym krokiem było podgrzanie silnika. Po osiągnięciu pożądanej temperatury płynu chłodzącego na wylocie głowicy w zakresie od 80° C i 85° C, zbadano przypadek

związek chemiczny	udział molowy	odchylenie standardowe
Methane	50.36%	1.339
Carbon dioxide (CO_2)	44.14%	0.605
Carbon monoxide (CO)	1.228%	0.031
Hydrogen (H_2)	0.587%	0.098
Nitrogen (N_2)	5.954%	1.195
Oxygen (O_2)	0.573%	0.330

Tablica 2.2: Skład biogazu uzyskany za pomocą analizy FTIR

zimnego przepływu. Stąd uzyskano referencyjny przebieg ciśnienia dla znanego stopnia kompresji. W późniejszym etapie ten przebieg został wykorzystany do walidacji i ewentualnej korekcji stopnia kompresji w trakcie badań ze spalaniem. Kolejnym krokiem były eksperymentalne badania spalania metanu i biopaliwa dla różnych parametrów pracy. Ze względu na dwuwymiarowe badanie parametryczne (współczynnik nadmiaru powietrza, λ , oraz kąt wyprzedzenia zapłonu), badanie podzielono na mniejsze grupy przy stałym współczynniku nadmiaru powietrza. Dla danej λ , zbadano trzy kąty wyprzedzenia zapłonu. Następnie dla każdej grupy λ , zbadano przebieg ciśnienia bez spalania w celu sprawdzenia stopnia kompresji.

Tablica 2.3: Parametry pracy dla przypadku przepływu zimnego i spalania (WOT - W pełni otwarta przepustnica)

	Zimny przepływ	CNG	Biogaz
Temperatura otoczenia	300 K	296 K	293 K
Ciśnienie otoczenia	100 kPa	105 kPa	102.5 kPa
Otwarcie przepustnicy	WOT	WOT	WOT
Prędkość obrotowa	$1500 \mathrm{rpm}$	$1500 \mathrm{rpm}$	$1500 \mathrm{rpm}$
λ	-	0.95 - 1.2	0.95 - 1.2
Paliwo	-	CNG	$44\% \text{ CO}_2 \& 50\% \text{ CH}_4$
Kąt wyprzedzenia zapłonu	-	40-30 OWK	40-30 OWK
Długość czasu zapłonu	-	15 OWK	15 OWK

2.2 Wyniki badań eksperymentalnych

Najważniejszym mierzonym parametrem jest przebieg ciśnienia w cylindrze, ponieważ jest to jedyny parametr mierzony in-situ w komorze spalania. Porównanie przebiegu ciśnień dla tych samych kątów zapłonu zostało przedstawione na Rys. 2.1. Można zauważyć,

że generalnie wyższe ciśnienie uzyskuje się przy użyciu paliwa CNG. Ponadto oczekiwano, że ciśnienie będzie równomiernie rozłożone jak w przypadku KWZ 35 OWK dla paliwa CNG. Widoczne są jednak pewne zależności, tj. dla współczynnika nadmiaru powietrza 1.2 ciśnienie jest znacznie niższe dla wszystkich przypadków. Spalanie CNG wykazało, że bogate i stechiometryczne warunki dają podobne wyniki do przypadku z ubogą mieszanką (z wyjątkiem przypadków współczynnika nadmiaru powietrza 1.2). Biorąc pod uwagę paliwo biogazowe, wyniki pokazują, że przy stosunku nadmiaru powietrza do 1.1 przebiegi ciśnienia są porównywalne. Jednak maksymalne występowanie ciśnienia ma odwrotną tendencję w porównaniu z wynikami dla CNG (Rys. 2.2). Te ostatnie pokazują, że przy spalaniu mieszanki ubogiej maksimum występuje później, co jest zgodne z wynikami uzyskanymi dla turbulentnej prędkości płomienia.

Wolniejsze spalanie mieszanek ubogich przesuwa maksymalne ciśnienie w głąb suwu ekspansji, jednocześnie obniżając maksymalne ciśnienie. Z drugiej strony biogaz wykazuje odwrotną zależność, w której maksymalne ciśnienie występuje wcześniej dla mieszanek ubogich. Powodem tego jest znowu prędkość frontu płomienia. Wartość turbulentnej prędkości spalania jest tak niska, że mieszanka pali się w trakcie suwu rozprężania, gdzie zmiana objętości bardziej wpływa na ciśnienie niż wzrost temperatury. Dlatego przebieg spalania biogazu jest bardziej płaski i wydłużony aż do suwu rozprężania. Należy jednak wspomnieć w tym miejscu, że znacznie niższe maksymalne ciśnienie w porównaniu z metanem wpływa na laminarną prędkość spalania. W wyniku niższego maksymalnego ciśnienia i wciąż wysokiej temperatury, laminarna prędkość spalania wzrasta w pobliżu maksymalnego ciśnienia.

Na zmianę ciśnienia wewnątrz cylindra ma wpływ kilka czynników, takich jak stopień kompresji, przedmuch, wymiana ciepła i proces spalania. Proces spalania można opisać na różne sposoby, jednak najczęściej stosuje się szybkość uwalniania ciepła (HRR). HRR to prędkość, z jaką ciepło ze spalania jest uwalniane z egzotermicznego utleniania paliwa i jest zdefiniowane w następujący sposób

$$HRR = dU_s + dQ_{ht} + dW + \sum h_i dm_i$$
(2.1)

gdzie U_s jest energią wewnętrzną, Q_{ht} to przepływ ciepła przez ściany, W jest pracą na cykl i równą pdV, a $\sum h_i dm_i$ reprezentuje strumień masy w postaci przedmuchów i wtrysków.

Porównanie HRR dla wszystkich przypadków (Rys. 2.3) pokazuje, że ogólnie, maksymalne wartości są wyższe dla paliwa CNG, czego oczekiwano ze względu na wyższą wartość opałową gazu ziemnego. Co więcej, przebieg jest znacznie bardziej stromy z wcześniejszym szczytem HRR, który określa punkt przegięcia przebiegu temperatury.

Z drugiej strony, HRR biogazu wykazuje niższe wartości maksymalne w porównaniu z gazem ziemnym, jednak jego szczyt występuje po maksymalnym ciśnieniu, w przeciwieństwie do wyników dla paliwa CNG. W związku z tym przebieg ciśnienia jest bardziej płaski i wydłużony w przypadku spalania biogazu.

Dokonując porównania z energią dostarczoną na początku cyklu, można oszacować



Rysunek 2.1: Porównanie zmierzonego przebiegu ciśnienia w cylindrze dla różnych kątów wyprzedzenia zapłonu



Rysunek 2.2: Występowanie maksymalnego ciśnienia w funkcji współczynnika nadmiaru powietrza

sprawność spalania paliwa. Parametr ten jest również związany z tak zwanym stopniem wypalenia paliwa (MFB). Jest to znormalizowana ilość z zakresem od 0 do 1, opisująca proces wypalenia paliwa podczas spalania. Ten parametr został pierwotnie wprowadzony przez Rassweilera i Withrowa w 1938 roku [57] i jest nadal szeroko stosowany.



Rysunek 2.3: Porównanie zmierzonej szybkości uwalniania ciepła dla różnych kątów wyprzedzenia zapłonu

$$MFB = 1 - \frac{m_f}{m_{f,0}}$$
(2.2)

gdzie m_f jest masą paliwa w danym OWK, a $m_{f,0}$ oznacza początkową masę znajdującą się wewnątrz komory spalania. Parametru nie można jednak zmierzyć eksperymentalnie. Dlatego zaproponowano kilka równań aproksymacyjnych [57, 60, 75]. Równania Rassweiler'a-Withrow'a oraz pressure-ratio managment bazują na koncepcji, że wzrost ciśnienia ponad przebieg zimnego przepływu jest związany z stopniem wypalenia paliwa. Koncepcja ta sprawdza się bardzo dobrze w przypadku badań eksperymentalnych, gdzie badano zarówno zimny przepływ jak i spalanie. Zatem biorąc pod uwagę procedurę eksperymentalną, naturalne jest, że ta grupa metod zostanie zastosowana w tej pracy. Dlatego, aby przetworzyć surowe dane eksperymentalne, stosuje się metodę pressure-ratio management [40–42]

$$MFB = \frac{MPR}{MPR_{max}} = \frac{p - p_{mot}}{p_{mot}} \cdot \frac{1}{MPR_{max}}$$
(2.3)

gdzie p_{mot} jest ciśnieniem dla tego samego OWK co ciśnienie w przypadku spalania, MPR definiuje zmodyfikowany stosunek ciśnienia, a MPR_{max} oznacza maksymalną wartość MPR. Metoda ta opiera się na równaniu Rassweilera-Withrowa [57], ale nie wymaga szacowania końca parametru spalania. W przeciwieństwie do jego pierwotnej postaci

jest mniej podatny na różne turbulentne prędkości spalania. Wyniki obliczeń MFB w oparciu o przebieg ciśnienia w cylindrze przedstawiono na Rys. 2.4. Można zauważyć, że ogólna wartość dla wszystkich przypadków nie przekracza 0.9. Przedstawiona metoda nie obejmuje wpływu strat ciepła.



Rysunek 2.4: Porównanie obliczonego stopnia wypalenia paliwa dla różnych kątów wyprzedzenia zapłonu

Następny zestaw parametrów jest związany z analiza jakościową pracy silnika. Układ dolotowy w postaci kolektora dolotowego, gaźnika/wtryskiwacza, przepustnicy, filtra powietrza, portu i zaworu ogranicza przepływ mieszanki paliwowo-powietrznej do cylindra podczas suwu napełniania. Parametr opisujący jakość napełniania jest nazywany współczynnikiem napełnienia

$$\eta_{vol} = \frac{m_{fluid}}{\rho_{a,i} V_d} \tag{2.4}$$

gdzie m_{fluid} jest masą płynu w cylindrze, $\rho_{a,i}$ jest gęstością powietrza wewnątrz kolektora dolotowego, a V_d jest pojemnością skokową. Współczynnik napełnienia zaprezentowany na Rys. 2.5(a) pokazuje niewielki wpływ współczynnika nadmiaru powietrza na wynik dla paliwa CNG. Większe różnice można zaobserwować w przypadku biogazu, w szczególności dla przypadku KWZ 30 OWK. Jednak maksymalna względna różnica dla tego samego KWZ została obliczona na poziomie 1.5%. W związku z tym można stwierdzić, że na wydajność objętościową wpływ ma głównie skład paliwa, a zatem CNG wykazuje ogólnie wyższą sprawność objętościową niż jego odpowiednik.

Ten parametr nie opisuje jednak w pełni wydajności silnika. Dlatego proponuje się bardziej użyteczny parametr, mianowicie indykowane ciśnienie skuteczne (IMEP), który jest stosunkiem indykowanej pracy na cykl do objętości skokowej zdefiniowanej jako

$$IMEP = \frac{\oint p \mathrm{d}V}{V_d} \tag{2.5}$$

gdzie p to przebieg ciśnienia wewnątrz cylindra, a V oznacza objętość chwilową. Ten parametr jest powszechnie stosowany do porównywania ilości wykonywanej pracy dla różnych parametrów pracy.

Wyniki obliczeń IMEP przedstawiono na Rys. 2.5(b). Paliwo CNG wykazywało ogólnie wyższe wartości niż jego odpowiednik. Zaobserwowano jednak tendencję spadkową ze wzrostem stosunku nadmiaru powietrza. Najwyższe wartości odnotowano dla mieszanek bogatych, z wyjątkiem wcześniejszego zapłonu, którego pik zarejestrowano przy $\lambda = 1$. Ponadto najniższy IMEP zaobserwowano dla KWZ 40 OWK. Co więcej, spadek IMEP przy rosnącym stosunku nadmiaru powietrza jest niższy w porównaniu z biopaliwem.

Z drugiej strony, szczyt dla paliwa biogazowego był zlokalizowany dla warunków stechiometrycznych, a wyższy stosunek nadmiaru powietrza powodował niższe wartości IMEP. Ponadto najniższe wartości, w przeciwieństwie do gazu ziemnego, odnotowano dla niższych wartości KWZ.

Sprawność cieplną silnika można zdefiniować jako

$$\eta = \frac{P}{\dot{m}_f Q_{LHV}} = \frac{1}{sfc \cdot Q_{LHV}} \tag{2.6}$$

gdzie Q_{LHV} jest wartością opałową.

Sprawność cieplna przedstawiona na Rys. 2.5(c) prezentuje ciekawe wyniki. Paliwo CNG wykazuje stały trend wzrostowy wraz ze współczynnikiem nadmiaru powietrza. Ze względu na brak dalszych informacji dotyczących większych wartości λ , nie jest możliwe wskazanie lokalizacji maksymalnej sprawności. Niemniej jednak, w przypadku mieszanki bogatej wyższa sprawność została uzyskana dla późniejszego zapłonu. W przypadku $\lambda = 1.05$ wyższą sprawność została uzyskana dla KWZ 35 OWK. Możliwe, że w dla przypadków $\lambda > 1.2$ wcześniejszy zapłon może być korzystniejszy pod względem sprawności. Z drugiej strony maksymalna wartość sprawności dla biogazu została uzyskana dla $\lambda = 1.05$. Najniższe wartości zarejestrowane zostały dla KWZ 30 OWK a najwyższe dla najwcześniejszego zapłonu. W przypadku spalania stechiometrycznego oraz dla $\lambda = 1.05$ biogaz uzyskał wyższą wartość sprawności w porównaniu do CNG.

Działanie silnika charakteryzuje się emisją tlenków azotu, tlenku węgla i węglowodorów. Poziom emisji można opisać za pomocą uniwersalnego parametru standardu emisji

$$ES_x = \frac{\dot{m}_x}{P} \tag{2.7}$$

Wyniki badań doświadczalnych w zakresie porównania emisji tlenku węgla metanu i biogazu przedstawiono na rys. 2.6. Można zauważyć, że wraz ze wzrostem stosunku nadmiaru powietrza spada emisja CO. Ponadto wyniki pokazują, że dla mieszanek stechiometrycznych i ubogich zawartość CO w spalinach jest podobna, z wyjątkiem przypadku



Rysunek 2.5: Porównanie różnych parametrów pracy paliwa CNG i biogazu

biogazu $\lambda = 1.2$ KWZ 30 OWK, gdzie wystąpiło niecałkowite i niezupełne spalanie. Ze względu na niską laminarną prędkość spalania oraz późny zapłon tlenek węgla nie został w pełni utleniony.

Porównanie emisji węglowodorów dla biogazu i paliwa CNG przedstawiono na Rys. 2.6. CNG wykazuje tendencję spadkową wraz ze wzrostem stosunku nadmiaru powietrza. Ponadto najniższe emisje odnotowano dla KWZ 30 OWK.

Biogaz charakteryzuje się niższymi emisjami dla tego samego kąta wyprzedzenia zapłonu w porównaniu z CNG. Najniższe wartości emisji HC zostały odnotowane dla $\lambda = 1.05$ za wyjątkiem przypadku KWZ 40 OWK , którego minimum przypada dla $\lambda = 1.1$.

Eksperymentalne badania emisji NOx wykazały (Fig. 2.6) wyższy poziom emisji dla paliwa CNG, ze względu na wyższą temperaturę spalin wewnątrz cylindra. Głównym czynnikiem wpływającym na to są termiczne NOx, ze względu na to, że CNG oraz biogaz nie zawiera tlenków azotu w paliwie oraz inne źródła mają charakter marginalny. Ponadto można zauważyć, że późniejszy zapłon przedstawia niższe wartości tlenków azotu dla obu paliw. Ponadto maksymalne emisje obserwuje się dla $\lambda = 1.1$ w przypadku paliwa CNG

oraz dla $\lambda=1.0$ dla biogazu. Ogólnie biogaz charakteryzuje się niższymi emisjami, podczas gdy dla $\lambda=1.2$ temperatura spalania była zbyt niska, aby utworzyć termiczne tlenki azotu.



Rysunek 2.6: Wyniki analizy spalin

Rozdział 3

Model numeryczny

W tym rozdziale opisano proces budowy kompletnego modelu CFD, który można wykorzystać do przewidywania ciśnienia w cylindrze i emisji szkodliwych gazów w różnych warunkach pracy silnika. Do opracowania modelu wykorzystano kody CFD Ansys Fluent i ANSYS Reaction Design Forte. Główne trudności napotkane podczas pracy były związane z wdrożeniem i wyborem odpowiednich modeli, tak aby uzyskać zbieżność i właściwe wyniki dla szerokiego zestawu parametrów wejściowych. Ponadto wykorzystano narzędzie Ansys CHEMKIN w celu utworzenia tabeli laminarnych prędkości spalania dla paliwa biogazowego. W przypadku paliwa CNG ANSYS zaopatrzył kod Forte w taką tablicę. Istnieje pilna potrzeba opracowania narzędzia numerycznego, które byłoby solidne, wiarygodne, dokładne i skuteczne w celu zmniejszenia kosztów przydzielonych na prace eksperymentalne. Dlatego zbadano niezawodność i dokładność równania G opisującego powierzchnię frontu płomienia w połączeniu ze zredukowanym kinetycznym mechanizmem chemicznym. Ponadto przeprowadzono test wrażliwości parametrów modelu spalania na różne warunki pracy. Wyniki emisji NOx i CO przeanalizowano w celu zlokalizowania procesu ich tworzenia w trakcie spalania w silniku spalinowym.

3.1 Modele spalania

3.1.1 Model kinetyczny

Opisując naturę spalania wewnątrz silnika spalinowego, należy określić typ spalania. W tym przypadku paliwo i utleniacz wchodząc do komory zostały wcześniej wymieszane kolektorze, a zatem zastosowano model kinetyczny.

Mając to na uwadze zastosowano model Extended Coherent Flamelet Model [39] (ECFM). Opiera się on na modelu równania C, który dzieli pole reagującego płynu na dwa obszary niespalonego i spalonego gazu [8]. Regiony te są powiązane za pomocą uśrednionej zmiennej postępu reakcji (stopień wypalenia paliwa) \bar{c} która opisuje postęp spalania. Wartości wahają się od zera dla niespalonego obszaru do jedności w całkowicie przereago-

wanym obszarze. Reakcja zachodzi jednak w cienkiej warstwie płomienia, która oddziela wyżej wymienione obszary. Zmienna postępu reakcji zmienia się tam w zakresie od zera do jedności zgodnie z procesem wypalenia paliwa [7]. W obszarze spalania zdefiniowane zostało dodatkowe równanie transportu dla zmiennej postępu reakcji w postaci [54]

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\rho \bar{c} \right) + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{u} \bar{c} \right) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_T}{\mathrm{Sc}_T} \right) \nabla \bar{c} \right] + \omega_c \tag{3.1}$$

gdzie, Sc_T jest turbulentną liczbą Schmidta, μ_T jest lepkością turbulentną, ω_c oznacza średnią szybkość reakcji, k jest laminarną przewodnością termiczną mieszaniny, c_p oznacza ciepło właściwe dla mieszaniny przy stałym ciśnieniu. Aby obliczyć średnią szybkość reakcji ω_c zastosowano model gęstości powierzchni płomienia ECFM [13] który rozwiązuje dodatkowe równanie (3.2) dla gęstości obszaru płomienia Σ (m²/m³) zdefiniowane jako

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}\Sigma) = \nabla \cdot \left[\left(\frac{k}{c_p} + \frac{\mu_T}{\mathrm{Sc}_T} \right) \nabla \cdot \left(\frac{\Sigma}{\rho} \right) \right] + \left(P_1 + P_2 + P_3 \right) \Sigma + P_4 - D \qquad (3.2)$$

gdzie, P_1 , P_2 , P_3 , P_4 są źródłami wynikającymi odpowiednio z oddziaływania turbulencji, dylatacji w płomieniu, ekspansji spalonego gazu i normalnej propagacji, D jest dyssypacją powierzchni płomienia. Rówaniami domykającym źródła w modelu ECFM, które zostały wykorzystane w obliczeniach, zostały oparte na pracy Meneveau [13]. Dla znanej wartości Σ średnia szybkość reakcji $\omega_c = \Sigma \rho_0 S_l$ jest zdefiniowana jako iloczyn Σ oraz lokalnej szybkości zużycia paliwa odniesionej do jednostkowej powierzchni płomienia $\rho_0 S_l$ (ρ_0 jest gęstością świeżej mieszanki S_l jest średnią laminarną prędkością płomienia wzdłuż powierzchni płomienia). Mówiąc prosto, w regionach o dużej gęstości powierzchni płomienia, gdzie warstwa płomienia jest silnie zniekształcona przez turbulencje, oczekuje się dużej szybkości reakcji.

Oprócz definicji modelu płomienia należy wziąć pod uwagę bardzo ważny aspekt, mianowicie należy zastosować odpowiednią metodę obliczania laminarnej prędkości spalania, ponieważ jest to istotny punkt wyjścia do dalszego obliczania turbulentnej prędkości spalania. Laminarną prędkość spalania zostałą określona za pomocą prawa Metghalchi-Keck [45]

$$S_{L} = S_{L,\text{ref}} \left(\frac{T_{u}}{T_{u,ref}} \right)^{\gamma} \left(\frac{p_{u}}{p_{u,\text{ref}}} \right)^{\beta}$$

$$S_{L,ref} = C_{1} + C_{2} \left(\phi - C_{3} \right)^{2}$$

$$\gamma = 2.18 - 0.8 \left(\phi - 1 \right)$$

$$\beta = -0.16 - 0.22 \left(\phi - 1 \right)$$
(3.3)

gdzie, T_u i p_u to temperatura i ciśnienie niespalonej mieszanki, $T_{u,ref} = 298$ K, $p_{u,ref} = 1$ atm, a $S_{L,ref}$ to wartość odniesienia dla laminarnej prędkości spalania. Ten zestaw równań empirycznych został eksperymentalnie przetestowany dla kilku czystych paliw węglowodorowych (w tym metanu). Jednak każda mieszanina tych węglowodorów z gazami obojętnymi może znacząco wpływać na wartość laminarnej prędkości spalania. Dlatego to podejście nie może zostać wykorzystane do modelowania spalania z paliwem biogazowym.

W porównaniu do Ansys Fluent, Reaction Design Forte stosuje inne podejście do modelu spalania kinetycznego (równanie G), który również należy do grupy modeli opisujących gęstość płomienia [31]. Podczas gdy równanie C śledzi postęp spalania, z którego zostaje obliczona propagacja frontu płomienia, równanie G rozwiązuje równanie chwilowej pozycji powierzchni płomienia i jej wariancji [51,53]

$$\frac{\partial G}{\partial t} + (\bar{\mathbf{u}} - \mathbf{u}_{vertex}) \cdot \nabla \bar{G} = \frac{\bar{\rho}_u}{\bar{\rho}_b} S_T \left| \nabla \bar{G} \right| - D_T \tilde{\kappa} \left| \nabla \bar{G} \right|
\frac{\partial \overline{G^{n2}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \overline{G^{n2}} = \nabla_{||} \cdot \left(\frac{\bar{\rho}_u}{\bar{\rho}_b} D_T \nabla_{||} \overline{G^{n2}} \right) + 2D_T \left(\nabla \bar{G} \right)^2 - c_s \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \overline{G^{n2}}$$
(3.4)

gdzie \overline{G} i $\overline{G^{n2}}$ są odpowiednio równaniem pola chwilowej pozycji płomienia i jej wariancji, $\nabla_{||}$ jest operatorem gradientu stycznego, **u** oznacza prędkość, \mathbf{u}_{vertex} jest prędkością ruchomego wierchołka, ρ_u oraz ρ_b są gęstościami odpowiednio świeżej i spalonej mieszanki, D_T jest turbulentną dyfuzyjnością, $\tilde{\kappa}$ to średnia krzywizna czoła płomienia uśredniona metodą Favre, c_s jest stałą modelu, \tilde{k} i $\tilde{\varepsilon}$ są turbulentną energią kinetyczną oraz jej szybkością dyssypacji uśrednioną metodą Favre.

Mimo to w wyżej wymienionym równaniu nieznana jest turbulentna prędkość płomienia S_T , która została zamodelowana następującym równaniem

$$\frac{S_T}{S_L} = 1 + I_P \left\{ -\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} \frac{l_I}{l_F} + \left[\left(\frac{a_4 b_3^2}{2b_1} \frac{l_I}{l_F} \right)^2 + a_4 b_3^2 \frac{u' l_I}{S_L^0 l_F} \right]^{1/2} \right\}$$
(3.5)

gdzie S_L^0 to laminarna prędkość spalania uzyskana z tablic, l_I to integral length scale dla turbulencji, l_F jest grubością laminarnego płomienia, u' jest intensywnością turbulencji a_4 jest turbulentnym współczynnikiem dyfuzji, b_1 jest turbulentnym stosunkiem prędkości płomienia, b_3 jest turbulentnym współczynnikiem dyfuzji płomienia, a I_P jest zmienną postępu zdefiniowaną jako

$$I_P = \left[1 - \exp\left(-c_{m2}\frac{t - t_0}{\tau_c}\right)\right]^{1/2} \tag{3.6}$$

gdzie c_{m2} jest współczynnikiem rozwoju płomienia, t to czas, t_0 to początkowy czas, τ_c to chemiczna skala czasowa. Zmiennej postępu modeluje wpływ zaburzeń pochodzących od otaczających wirów na powierzchnię frontu płomienia od początkowego stadium zapłonu do w pełni rozwiniętego turbulentnego płomienia. [4].

Ponieważ równanie G modeluje tylko położenie powierzchni płomienia, następnym etapem definicji modelu spalania jest sformułowanie równania transportu związków chemicznych i szybkości reakcji chemicznych, które występują wewnątrz strefy reakcji. Równanie transportu związków chemicznych jest opisane jako

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}_k \bar{\mathbf{u}}\right) = \nabla \cdot \left[\bar{\rho} D \nabla \bar{Y}_k\right] + \nabla \cdot \Phi + \dot{\bar{\rho}}_k^c + \dot{\bar{\rho}}_k^s \tag{3.7}$$

gdzie ρ to gęstość, indeks dolny k definiuje indeks związku chemicznego, $\bar{\mathbf{u}}$ jest wektorem prędkości, $Y_k = \frac{\rho_k}{\rho}$ jest ułamkiem masowym k-tego gatunku, D jest współczynnikiem dyfuzji molekularnej, Φ jest modelowane i uwzględnia skutki filtrowania wyrażeń konwekcyjnych. $\dot{\rho}_k^{\bar{c}}$ oraz $\dot{\rho}_k^{\bar{s}}$ są odpowiednio źródłami spowodowanymi reakcją chemiczną i parowaniem rozpylonej cieczy.

3.1.2 Zredukowany kinetyczny mechanizm chemiczny

Jak wcześniej wspomniano, spalanie w Ansys Forte jest połączone ze zreduowanym kinetycznym mechanizmem chemicznym. Dlatego zestaw reakcji chemicznych, ich szybkości i bilans energetyczny rozwiązuje Ansys CHEMKIN. As previously mentioned, the Ansys Forte combustion is coupled with detailed kinetics mechanism. Therefore, the set of chemical reactions, their rates and energy balance is solved by Ansys CHEMKIN. The whole process is based on chemical mechanism that contains all the reactions, compounds, chemical and thermodynamic data. W tej pracy został wykorzystany zredukowany mechanizm kinetyczny opracowany dla paliw metanowych [64], który zawiera 53 związki chemiczne oraz 325 rekacji. Chociaż te dane wejściowe definiują niezbędne dane dla równań 3.8 do 3.12, to laminarna prędkość spalania w równaniu 3.5 wciąż jest nieznana. Dla paliwa CNG odpowiednie tablice i dane były dostępne razem z kodem, natomiast w przypadku biogazu wymagane było stworzenie swoich własnych tablic laminarnej prędkości spalania dla szerokiego spektrum warunków pracy(tj. ciśnienie, temperatura niespalonego gazu, stosunek nadmiaru powietrza i EGR).

Szybkości reakcji chemicznych rozwiązuje solver Reaction Design Chemkin Pro. Odwracalne reakcje są przedstawione w ogólnej formie

$$\sum_{k=1}^{K} \nu'_{ki} \chi_k \Leftrightarrow \sum_{k=1}^{K} \nu''_{ki} \chi_k \tag{3.8}$$

gdzie ν_{ki} są współczynnikami stechiometrycznymi are the stoichiometric coefficients a χ_k jest symbolem k-tego związku chemicznego. Szybkość tworzenia k-tego związku chemicznego opisuje

$$\dot{\omega}_{ki} = (\nu'_{ki} - \nu''_{ki}) q_i, \qquad (k = 1, \dots, K)$$
(3.9)

gdzie ω_{ki} jest szybkością tworzenia a q_i jest szybkością *i*-tej reakcji

$$q_i = k_{fi} \prod_{k=1}^{K} [X_k]^{\nu'_{ki}} - k_{ri} \prod_{k=1}^{K} [X_k]^{\nu''_{ki}}$$
(3.10)

gdzie X_k jest stężeniem molowym k-tego związku chemicznego, k_{fi} oraz k_{ri} są odpowiednio stałymi szybkości reakcji do przodu i wstecz dla *i*-tej reakcji. Suma $\dot{\omega}_{ki}$ po wszystkich reakcjach danego związku chemicznego opisuje źródło masy ze względu na reakcje chemiczne

$$\dot{\bar{\rho}_k^c} = W_k \sum_{i=1}^{I} \dot{\omega}_{ki} \tag{3.11}$$

Podobnie, uwalnianie ciepła z reakcji chemicznej w równaniu energii jest opisane przez

$$\dot{Q}_{c} = -\sum_{i=1}^{I} Q_{i} q_{i} = \sum_{i=1}^{I} \sum_{k=1}^{K} \left(\nu_{ki}' - \nu_{ki}''\right) \left(\Delta h_{f}^{0}\right)_{k} q_{i}$$
(3.12)

gdzie $(\Delta h_f^0)_k$ to entalpia tworzenia związku chemicznego k dla T = 0 K. Powyższy opis w skrócie podsumowuje fizykę stojącą za kodem Ansys Forte używanym do modelowania silnika spalinowego.

3.1.3 Model zapłonu

Ta sekcja będzie poświęcona opisowi modeli zapłonu. Ponieważ oba kody wykorzystują inne podejście do modelowania spalania, modele zapłonu również się różnią. Dlatego najpierw omówiony zostanie model Ansys Fluent, a następnie Ansys Forte. Ansys Fluent zakłada, że początkowy promień zapłonu iskry jest znacznie mniejszy niż rozmiar komórek, dlatego początkowy wzrost zapłonu obliczany jest w przestrzeni podkomórkowej. Przyjmuje się, że kształt zapłonu jest idealnie sferyczny z nieskończenie cienkim frontem płomienia. Iskra przesuwa się i zwiększa swój promień, r, w czasie, t, zgodnie z równaniem różniczkowym zwyczajnym

$$\frac{\partial r}{\partial t} = \frac{\rho_u}{\rho_b} S_T \tag{3.13}$$

gdzie ρ_u i ρ_b reprezentują odpowiednio gęstość niespalonego i spalonego płynu, S_T jest turbulentną prędkością spalania obliczoną zgodnie z modelem Turbulent Length opisanym

$$S_T = \max\left(S_L, S_T\left(r\right)\right) \tag{3.14}$$

gdzie S_L jest laminarną prędkością spalania, $S_T(r)$ jest turbulentną prędkością spalania obliczoną dla turbulent length scale promienia zapłonu.

Dodatkowo do powyższych równań, model ECFM wprowadza równania dla średniej wartości zmiennej postępu, c, i średniej gęstości powierzchni płomienia , Σ , dla zapłonu

$$c = \left(\frac{r}{r_t}\right)^3$$

$$\Sigma = \frac{1}{\max\left(r, 0.0001\ m\right)}$$
(3.15)

gdzie r_t jest promieniem reprezentatywnej kuli. Średnia gęstość powierzchni płomienia jest obliczana przy użyciu podejścia Zimonta [76–78].

Definicja modelu zapłonu w Ansys Reaction Design Forte jest podobna do opisanej powyżej. Jednak model wyznacza pozycję frontu płomienia za pomocą cząstek Lagrange'a, a gęstość powierzchni płomienia uzyskuje się z liczby cząstek w komórce obliczeniowej. To podejście zaproponowane przez [20,67] nazywa się modelem Discrete Particle Ignition Kernel (DPIK). Wzrost promienia jądra zapłonu jest opisany jako

$$\frac{\partial r_k}{\partial t} = \frac{\rho_u}{\rho_k} \left(S_{plasma} + S_T \right) \tag{3.16}$$

gdzi
e ρ_k 42/5000 jest gęstością gazu wewnątrz jądra iskry. Prędkość plazmy jest z
definiowana jako

$$S_{plasma} = \frac{Q_{spk} \cdot \eta_{eff}}{4\pi r_k^2 \left[\rho_u \left(u_k - h_u\right) + P\frac{\rho_u}{\rho_k}\right]}$$
(3.17)

gdzie h_u to entalpia niespalonej mieszaniny, u_k jest energią wewnętrzną mieszaniny wewnątrz jądra iskry. \dot{Q}_{spk} jest energią wyładowania iskry, η_{eff} jest sprawnością przekazania energii. Oba są parametrami zdefiniowanymi przez użytkownika na podstawie danych producenta i danych naukowych, tj. [23].

Przejście od modelu zapłonu do burzliwego modelu spalania jest kontrolowane przez porównanie promienia jądra z promieniem krytycznym, który jest proporcjonalny do lokalnie uśrednionej wartości turbulentnej integral length scale

$$r_c = c_{m1} 0.16 \frac{k_2^3}{\varepsilon}$$
(3.18)

gdzie r_c jest wielkością krytyczną c_{m1} jest stałą w równaniu przejścia z modelu zapłonu do modelu spalania. Dodatkowo definiuje się minimalną wielkość krytyczną r_{min} , dla której zachodzi przejście z modelu zapłonu do modelu spalania: $r > r_{min}$.

Rozdział 4

Wyniki obliczeń numerycznych

4.1 Modelowanie spalania

Początkowo modele spalania w Ansys Fluent były testowane na modelu 2D. Podczas badań zastosowano eddy-dissipation, model kinetyczny oraz model kinetyczny z tablicami PDFw celu ilościowego określenia stosowalności każdego podejścia w modelowaniu silników spalinowych. Eddy-dissipation zostało wybrane ze względu na jego wszechstronność, model kinetyczny został zasugerowany przez autorów kodu, a model kinetyczny z tablicami PDF dodaje możliwość modelowania składu spalin. W celu uproszczenia procesu pominięto przepływ ciepła przez ścianę i zjawiska przedmuchu.

W przypadku wyników obliczeń dla modelu kinetycznego z tablicami PDF mieszanka paliwowo-powietrzna nie została poprawnia zapalona. Przez to przebieg ciśnienia w cylindrze znacząco odbiegał od danych eksperymentalnych. Dalsza analiza modelu trójwymiarowego pokazała, że również turbulentna prędkość spalania została niedoszacowana, co spowodowało niecałkowite i niezupełne spalanie, bądź brak zapłonu. Z tego względu w dalszych rozważaniach model kinetyczny z tablicami PDF został pominięty przy modelowaniu silnika spalinowego.

Model kinetyczny w porównaniu do Eddy Dissipation pozwala na bardziej stabilne obliczenia ze względu na to, że szybkość spalania nie jest tylko kontrolowana mieszaniem ale również dodatkowym równaniem gęstości powierzchni płomienia. Ponadto uzyskano dokładniejsze wyniki dla początkowej fazy rozwoju płomienia oraz przebiegu ciśnienia wewnątrz cylindra.Wadą tego modelu jest brak informacji dotyczących chemii spalania.

W późniejszych symulacjach zastosowano model kinetyczny

4.1.1 Stopień wypalenia paliwa

Następnym etapem jest badanie stopnia wypalenia paliwa, ponieważ jest on silnie skorelowany z prędkością płomienia. Dane eksperymentalne uzyskano za pomocą me-

tody [41].Jednak, jak wszystkie szybkie metody, ta nie jest wolna od założeń, które wpływają na wyniki. Główną ideą tej metody jest to, że stopień wypalenia paliwa jest skorelowany ze wzrostem ciśnienia podczas spalania w odniesieniu do ciśnienia dla przepływu zimnego. Metoda ta nie bierze jednak pod uwagę, że strumień ciepła w przypadku ze spalaniem i bez jest inny. Z tego względu większy strumień ciepła w przypadku ze spalaniem bardziej wpływa na przebieg ciśnienia niż w przypadku zimnego przepływu. Dlatego wartości stopnia wypalenia paliwa są niedoszacowane.

Wyniki dotyczące porównania danych numerycznych i eksperymentalnych przedstawiono dla CNG na rys. 4.1 a dla biogazu na Rys. 4.2. Wyniki są podzielone na dwa osobne rysunki dla każdego paliwa a każdy rysunek zawiera pięć wykresów dla każdego współczynnika nadmiaru powietrza. Aby zachować przejrzystość pracy podobny proces zastosowany dla reszty rysunków zawierających takie porównanie.

Widać, że we wszystkich przypadkach zapłon zachodzi szybciej dla symulacji numerycznej. Różnica jest jednak niewielka i wynika z niedokładności modelu DPIK, który nie uwzględnia wpływu krzywizny iskry. W przypadku stosunku nadmiaru powietrza 1.2, wyniki pokazują większe rozbieżności, szczególnie w przypadkach dla kąta wyprzedzenia zapłonu 30 OWK i 40 OWK. Niemniej jednak ogólnie wyniki symulacji numerycznych są w zgodzie z wynikami eksperymentalnymi.

W przypadku stopnia wypalenia paliwa dla biogazu wyniki symulacji numerycznych są w dobrej zgodności z danymi eksperymentalnymi. Z drugiej strony można zauważyć większe różnice. Po pierwsze, można zauważyć, że przebieg MFB osiąga wyższe wartości w porównaniu z wynikami dla CNG. Jest to spowodowane niższymi stratami ciepła podczas spalania. Ponadto podobnie jak dla paliwa CNG zapłon następuje wcześniej w obliczeniach numerycznych. Bardziej znaczące różnice w przebiegach stopnia wypalenia paliwa zostały zauważone dla mieszanek bogatych przy $\lambda = 1.2$, gdzie MFB jest niedoszacowane.

Po wynikach uzyskanych dzieki analizie termodynamicznej przebiegów ciśnienia w cylindrze przeprowadzana jest bardziej wnikliwa analiza. Stąd, używając wyników uzyskanych z symulacji, przestrzenny przebieg MFB jest przedstawiony na przekroju poprzecznym przez cylinder w odległości 3 mm od głowicy. Przestrzenne rozkłady stopnia wypalenia paliwa dla kolejnych katów obrotu wału korbowego (Rys. 4.3) prezentuja przebieg frontu płomienia w cylindrze w kolejnych krokach czasowych. Obrazy również zawierają moment przełączenia z modelu zapłonu na model spalania dla 7 OWK po zapłonie. Widać, że początkowo podczas fazy rozwoju płomienia na płomień znacząco wpływa przepływ płynu wewnątrz cylindra. Jądro zapłonu jest lekko przesunięte na lewą stronę komory (7-13 OWK po zapłonie). W wyniku przemieszczającego się frontu płomienia, po prawej stronie i w pobliżu tulei cylindra, świeży ładunek jest wpychany pod front płomienia (19-25 OWK po zapłonie) zapobiegając przedostaniu się płomienia do ściany. Później (31-41 OWK po zapłonie) obrazy MFB wykazują podobne zachowanie po lewej stronie, gdzie przepływ płynu utworzony przez wir jest wpychany między ścianę a front płomienia. Bardzo interesujący wir jest widoczny w lewym górnym rogu, tuż pod zaworem wydechowym. Ruch wiru w prawy górnym rogu ostatecznie zatrzyma front płomienia i utworzy klin tuż pod zaworem włotowym. Mechanizm ten jest widoczny we



Rysunek 4.1: Porównanie obliczonej wartości stopnia wypalenia dla CNG

wszystkich przypadkach, jednak jego wpływ zależy od tego gdzie początkowo występuje granica między górnym i dolnym wirem. Im dalej od iskry znajduje się linia zderzenia, tym zaobserwowano mniejszy wpływ na front płomienia w ostatniej fazie. Wpływ oraz przyczyny tego procesu będą badane w późniejszych pracach.



Rysunek 4.2: Porównanie obliczonej wartości stopnia wypalenia dla biogazu



Rysunek 4.3: Wybór obrazów przestrzennego rozkładu MFB dla CNG w przekroju przez cylinder dla kąta wyprzedzenia zapłonu 350WK oraz współczynnika nadmiaru powietrza 1.05 (ASOS - po zapłonie)

4.1.2 Porównanie przebiegu ciśnienia

Głównym celem pracy było wierne odtworzenie przebiegu ciśnienia w cylindrze, ponieważ jest to jedyna ilość mierzona wewnątrz scylindra. Dlatego ciśnienie jest główną wielkością walidacyjną, ponieważ reszta parametrów oparta na danych ekperymentalnych jest albo obliczana za pomocą modeli termodynamicznych i empirycznych, albo uśredniana w kilku cyklach.

Na początku zostało zbadane paliwo CNG (Rys. 4.4)dla mieszaniny stechiometrycznej i KWZ 35 OWK. Ten przypadek wykorzystano do dopasowania parametrów modelu spalania i zapłonu, które wykorzystano w dalszych symulacjach numerycznych. Następnie przeprowadzono symulacje dla pozostałych przypadków. Wynik analizy wykazał dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi. Większe różnice zostały zaobserwowane dla przypadków z $\lambda = 1.2$. Oznacza to, że parametry modelu spalania są w pewnym stopniu zależne od współczynnika nadmiaru powietrza.

W przypadku paliwa biogazowego zastosowano podobny proces doboru parametrów modelu spalania i zapłonu. Dane uzyskane z symulacji numerycznych przedstawiono na Rys. 4.5. Można zauważyć dobrą zgodność dla stosunku nadmiaru powietrza od 1 do 1.2, podczas gdy przypadek $\lambda = 0.95$ wykazał niedoszacowany przebieg ciśnienia wewnątrz cylindra. Rozbieżność jest spowodowana inną strukturą przepływu płynu wewnątrz cylindra, co osłabiło zapłon. Ponadto po spaleniu połowy paliwa prędkość propagacji frontu płomienia znacznie spadła. Podobnie jak w przypadku paliwa CNG dla mieszanek ubogich uzyskano niską zgodność. W celu poprawienia wyników parametry modelu spalania zostały ponownie dobrane dla tego przypadku.

Podobnie jak w przypadku CNG, dokładność rozwiązania była w mniejszym stopniu zależna od stosunku nadmiaru powietrza i bardziej zależna od ustawienia zapłonu. W celu odkrycia zależności parametrów modelu od λ lub KWZ należy przeprowadzić bardziej szczegółowe badania dotyczące dodatkowych paliw i warunków.



Rysunek 4.4: Porównanie zmierzonych i obliczonych przebiegów ciśnienia dla CNG



Rysunek 4.5: Porównanie zmierzonych i obliczonych przebiegów ciśnienia dla biogazu

4.2 Analiza emisji związków szkodliwych

W przeciwieństwie do metody eksperymentalnej omówionej w sekcji 2.2 porównanie wyników numerycznych i eksperymentalnych przedstawiono w odniesieniu do udziałów molowegych. Powodem jest to, że proces tworzenia i niszczenia związków chemicznych jest porównywany między symulacją numeryczną i badaniami eksperymentalnymi. Dlatego taka reprezentacja jest w tym przypadku bardziej odpowiednia.

4.2.1 Tlenek węgla

Wyniki obliczeń numerycznych (Rys. 4.6) pokazują dobre, choć nieco niedoszacowane wyniki. Kinetyka reakcji CO jest szybsza w porównaniu z wynikami eksperymentalnymi ze względu na fakt, że bardziej skomplikowane reakcje zawierające tlenek węgla, nie są zawarte w zredukowanym mechanizmie GRI 3.0. Zatem zawartość CO jest niższa w spalinowych w przypadku symulacji. Lepsza zgodność wyników została uzyskana dla biogazu (Rys. 4.6(b)).

Niemniej jednak symulacja numeryczna dokładnie przewiduje trend emisji CO dla obu paliw. Zauważalna rozbieżność została odnotowana dla biogazu i stosunku nadmiaru powietrza 1.2, co spowodowane jest niecałkowitym i niezupełnym spalaniem. Więcej szczegółów na ten temat zostało zawartych w sekcji 4.2.2.



Rysunek 4.6: Wyniki eksperymentalne i numeryczne emisji tlenku węgla

Proces tworzenia się tlenku węgla wraz z powierzchnią frontu płomienia w trakcie pracy silnika przedstawione zostały w przekroju poprzecznym przez cylinder na Rys. 4.7 i 4.8. Dzięki temu mozna łatwo odróżnić regiony niespalone i spalone. Wyniki obliczeń numerycznych dla tlenku węgla dla wszystkich przypadków przedstawiono w postaci udziału molowego w mieszaninie dla tego samego zakresu.

Widać, że propagacja frontu płomienia zwalnia w okolicy zaworu wlotowego. Proces został omówiony w sekcji 4.1.1, jednak warto wspomnieć, że wyniki są zgodne z innymi ustaleniami w pracy [44]. Zaobserwowano wytwarzanie CO tuż za frontem płomienia w całej objętości strefy spalonej mieszanki. Jednak większość zawartości tlenku węgla pojawiła się w pobliżu świecy zapłonowej. Ponadto od momentu 50 OWK po zapłonie można zauważyć redukcję zawartości CO ze względu na proces dopalania tlenku węgla.



Rysunek 4.7: Wybór obrazów przestrzennego rozkładu emisji tlenku węgla dla kąta wyprzedzenia zapłonu 35 OWK, $\lambda=1.00$ i paliwa CNG

Wyniki biogazu w porównaniu z metanem pokazują, że zapłon jest wolniejszy, ponie-

waż występuje o 10 OWK później. Dlatego proces spalania CO jest opóźniony. Znaczące różnice zostały zaobserwowane dla przypadku $\lambda = 1.2$, co jest związane z ograniczeniami Ansys Forte. Powolny proces spalania dla tego przypadku powoduje spalanie w trakcie suwu wydechu. Z drugiej strony w momencie otwarcia zaworu wylotowego moduł chemii zostaje wyłączony, ponieważ wprowadza błędy numeryczne. Nakładające się procesy spalania, szybko zmieniającej się domeny obliczeniowej i przepływu przez zawór prowadzą do błędów numerycznych, które zakończyły obliczenia.



Rysunek 4.8: Wybór obrazów przestrzennego rozkładu emisji tlenku węgla dla kąta wyprzedzenia zapłonu 35 OWK, $\lambda=1.00$ i biogazu

4.2.2 Weglowodory

Wyniki obliczeń numerycznych zaprezentowano na Rys. 4.9. W obu przypadkach uzyskano niesatysfakcjonującą zgodność. W przypadku CNG wartości są niedoszacowane i dla większości przypadków emisja HC jest bliska 0. Powodem tego jest brak modelu gaszenia płomienia w okolicy ściany.

Z drugiej strony, biogaz (Fig. 4.9(b)) prezentuje zawyżone wyniki. Główną przyczyną jest prędkość frontu płomienia, który nie zdąża dopalić paliwa w trakcie suwu rozprężania. W efekcie proces spalania występuje w trakcie suwu wydechu, a jak wspomniano w sekcji 4.2.1 moduł chemii w momencie otwarcia zaworu wylotowego zostaje wyłączony. Dodatkowo tablice laminarnej prędkości spalania nie zostały zwalidowane co miało wpływ na propagację frontu płomienia. Ponadto w przypadku mieszanek ubogich został zauważony proces gaszenia płomienia przed pełnym wypaleniem paliwa. W celu poprawy wyników należałoby zwalidować tablice laminarnej prędkości spalania oraz opracować model gaszenia płomienia w okolicy ścian.



Rysunek 4.9: Wyniki eksperymentalne i numeryczne emisji węglowodorów

4.2.3 Tlenki azotu

IAby opisać emisję tlenków azotu, należy podkreślić, że wzięto pod uwagę tylko termiczne i szybkie NOx ze względu na fakt, że paliwo gazowe jest wolne od azotu paliwowego [12].

TPorównanie wyników symulacji numerycznej z eksperymentem przedstawiono dla CNG na Rys 4.10(a) ai biogazuina Rys.4.10(b). OMożna zauważyć, że w przypadku CNG uzyskano dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi. Jednak dla wyższych wartości stosunku nadmiaru powietrza($\lambda \ge 1.1$) zostały zauważone większe różnice Ogólnie wyniki są niedoszacowane w porównaniu z danymi eksperymentalnymi. Dlatego bardziej złożony mechanizm NOx może poprawić rozwiązanie. Ponadto wyniki emisji NOx pośrednio potwierdzają wyniki temperatury wewnątrz cylindra. Stąd można powiedzieć, że obliczona temperatura dla CNG była niedoszacowana. W przeciwieństwie do paliwa CNG, biogaz przedstawia zawyżone wyniki. Uzyskana została dobra zgodność dla mieszanki bogatej i stechiometrycznej. Ponadto poziomy emisji NOx zostały bardzo dobrze odtwarzone w przypadku KWZ 30 OWK. Pozostałe przypadki wykazały rozbieżności między badaniami numerycznymi i eksperymentalnymi, co sugeruje, że obliczona temperatura wewnątrz cylindra była zawyżona. Dlatego do zredukowanego mechanizmu GRI 3.0 należy wprowadzić bardziej złożoną bibliotekę reakcji NOx, aby poprawić wyniki emisji.



Rysunek 4.10: Wyniki eksperymentalne i numeryczne emisji tlenków azotu

TPrzestrzenny rozkład udziałów molowych tlenku azotu wraz z frontem propagacji płomienia został zaprezentowany na Rys.?? fdla CNGaorazFRys ?? dla biogazu w przekroju poprzecznym przez cylinder silnika spalinowego.

Widać, że podobnie jak w przypadku tlenku węgla, większość zawartości NOx została zaobserwowana w pobliżu świecy zapłonowej. Skala czasowa reakcji jest jednak większa, co prowadzi do opóźnionej produkcji. Z analizy szybkości reakcji produkcji tlenku azotu oraz destrukcji metanu wynika, że przy temperaturze powyżej 2100K reakcja metanu zachodzi szybciej niż reakcje produkcji tlenku azotu z tlenu i OH. Model spalania GRI-MECH 3.0 wskazuje, że przy tak wysokich temperaturach dużo szybciej wypalane są związki odpowiedzialne za produkcję NO. Dominującą rolę w produkcji tlenków azotu przejmuje za to reakcja azotu z dwutlenkiem węgla.

W porównaniu z CNG paliwo biogazowe wykazuje podobną lokalizację maksymalnej zawartości NOx (w okolicach świecy zapłonowej). Jednak poziom emisji jest kilkakrotnie niższy. Szybkość produkcji termicznych NOx jest znacząco spowolniona przez niższą temperaturę gazu wewnątrz komory spalania. Dlatego w przypadku $\lambda 1.2$ dla danych eksperymentalnych emisja NOx jest bliska 0. Z drugiej strony, proces destrukcji tlenków azotu widoczny dla większości przypadków paliwa CNG nie występuje w przypadku paliwa biogazowego, ponieważ do tej reakcji wymagana jest wysoka energia aktywacji. Podczas spalania biogazu inicjowanie takiej reakcji jest osłabione w wyniku niskiej temperatury spalanego gazu.



Rysunek 4.11: Wybór obrazów przestrzennego rozkładu emisji tlenku azotu dla kąta wyprzedzenia zapłonu 35 OWK, $\lambda=1.00$ i CNG



Rysunek 4.12: Wybór obrazów przestrzennego rozkładu emisji tlenku azotu dla kąta wyprzedzenia zapłonu 35 OWK, $\lambda=1.00$ i biogazu

Rozdział 5

Podsumowanie i wnioski

W pracy przedstawiono wyniki badań nad konwencjonalnym i alternatywnym paliwami spalanymi w silniku spalinowym. Nacisk położono na eksperymentalne i numeryczne badania sprawności i emisji substancji szkodliwych silnika, jak również w przypadku badania numerycznego, na wiarygodność cyfrowej reprezentacji modelu. Głównym celem rozprawy było zbadanie procesu spalania, tworzenia szkodliwych związków chemicznych i ogólnego porównania krzywych parametrów pracy dla CNG i biogazu przy użyciu metod eksperymentalnych i numerycznych.

Na początku zostały przeprowadzone badania eksperymentalne. Początkowy etap polegał na modernizacji i rozbudowie stanowiska badawczego, aby spełniało najnowsze standardy badań. Dlatego też silnik został wyposażony w układ przygotowania i wtrysku paliwa ciekłego i gazowego, układ chłodzenia, system kontroli prędkości obrotowej, system zarządzania silnikiem oraz, co nie mniej ważne, różne nowoczesne systemy pomiarowe połączone z aplikacją NI LabVIEW napisaną dla tego silnika w celu zbierania danych. Badania eksperymentalne przeprowadzono dla obu paliw, w tym 5 różnych współczynników nadmiaru powietrza i 3 kątów wyprzedzenia zapłonu. Dlatego stworzono obszerną bazę danych do porównywania wyników i dalszej walidacji modeli matematycznych i numerycznych. Ponadto przedstawiono ilościowe i jakościowe porównanie zarówno paliwa CNG, jak i biogazu pod względem przebiegu ciśnienia, temperatury, szybkości uwalniania ciepła (HRR), stopnia wypalenia paliwa M(FB), stopnia napełnienia cylindra, IMEP, sprawności cieplnej i analizy emisji związków szkodliwych.

Na koniec przeprowadzono symulacje numeryczne dla wszystkich badanych przypadków. Prace obejmowały dwa różne podejścia, mianowicie szeroko stosowanego Ansys Fluent i niedawno wprowadzonego Ansys Forte. Ten pierwszy wykorzystuje metodę skończonych objętości i model kinetyczny spalania który jest często wykorzystywany w różnych aplikacjach. Ten ostatni został opracowany specjalnie dla silników spalinowych i wykorzystuje nowe podejście w zakresie metody IBM-ALE, która znacznie upraszcza proces ruchu zaworu i tłoka w siatce. Ponadto wykorzystano model spalania opisujący lokalizację frontu płomienia w postaci równania G ze zredukownym kinetycznym mechanizmem chemicznym do symulacji procesu spalania i tworzenia zanieczyszczeń. Dodatkową zaletą jest znaczne skrócenie czasu obliczeniowego dzięki możliwości zmniejszenia ilości elementów w siatce obliczeniowej. Wstępne wyniki pokazały, że Ansys Forte dokładniej przewiduje zjawiska zachodzące wewnątrz cylindra w porównaniu z Ansys Fluent, stąd do dalszych badań wybrano pierwszy kod. Wynikiem tych prac było stworzenie i zwalidowanie pełnego modelu 3D silnika spalinowego wykorzystując dane eksperymentalne. Podczas procesu walidacji dopasowano parametry modelu spalania dla przypadku $\lambda = 1.00$ oraz KWZ 35 OWK. Następnie przeprowadzono obliczenia dla pozostałych przypadków, wykorzystując parametry dobrane dla przypadku walidacji. Celem było zbadanie wrażliwości modelu na zmienne parametry wejściowe (tj. stosunek nadmiaru powietrza i kat wyprzedzenia zapłonu). Ponadto zbadano przyczynę powstawania tlenków azotu i tlenku węgla podczas spalania w silniku spalinowym. Dlatego solver CHEMKIN Ansys jest uwzgledniony w procesie obliczeniowym Ansys Forte. Zredukowany kinetyczny mechanizm GRI-MECH 3.0 wykorzystano do symulacji reakcji chemicznych zachodzących wewnątrz komory spalania. Proces ten wykorzystuje tablice laminarnej prędkości spalania dla danego paliwa. Ze względu na brak takich tablic dla biogazu zostały one dodatkowo obliczone wykorzystując oprogramowanie Reaction Design CHEMKIN. Wyniki symulacji numerycznych dla różnych warunków pracy porównano z wynikami eksperymentalnymi. Ponadto został przedstawiony przestrzenny rozkład zawartości NOx i CO dla wybranych kroków czasowych w przekroju przez cylinder w celu zrozumienia procesu tworzenia tych substancji. Również przygotowany został przestrzenny rozkład stopnia wypalenia paliwa dla wybranych kroków czasowych w przekroju przez cylinder w celu wizualizacji przebiegu frontu płomienia wewnątrz komory spalania.

Paliwo biogazowe pochodzące z fermentacji beztlenowej okazało się ważną alternatywą dla paliw kopalnych, zwłaszcza dla stacjonarnych silników spalinowych. Wyniki uzyskane z badań eksperymentalnych wykazały ogólnie niższa moc wyjściowa biogazu, jednak spowodowaną tylko niższym stopniem napełnienia i wartością opałową. Sprawność cieplna wykazała wyższe wartości dla biogazu w warunkach stechiometrycznych i dla $\lambda = 1.05$, dla którego zarejestrowano maskimum sprawności. Z drugiej strony CNG w całym zakresie wskazywało na tendencję wzrostową osiągając dla mieszanki ubogiej sprawności znacząco wyższe niż biogaz. Porównanie emisji zanieczyszczeń dla przypadków najwyższej sprawności wykazało, że poziomy CO i HC są podobne dla obu paliw, jednak wartości NOx sa znacznie niższe w przypadku paliwa biogazowego, co omówiono w sekcjach 2.2 i 4.2. Główną przyczyną tego zjawiska jest efekt dodatku gazu inertnego. Wysoka zawartość CO2 w paliwie zastępuje recyrkulację spalin, co znacznie obniża temperaturę spalania w cylindrze. Z drugiej strony znacznie wolniejsze spalanie biogazu prowadzi do wyższej emisji HC dla przypadku $\lambda = 1.2$ w porównaniu z CNG. Czas przebywania mieszanki paliwowo-powietrznej w cylindrze w porównaniu do prędkości spalania jest zbyt krótki, co może powodować spalanie podczas suwu rozprężania, a nawet przedwczesne zgaśnięcie płomienia. Stąd biogaz prezentuje węższe okno parametrów pracy w porównaniu z CNG.

Przeprowadzone symulacje numeryczne pomogły lepiej zrozumieć wyniki uzyskane z badań eksperymentalnych. Początkowo przetestowano model 2D w połączeniu z różnymi modelami spalania. Wyniki pokazały, że tylko model kinetyczny (tj. równanie C) był w stanie poprawnie przewidzieć proces spalania wewnątrz cylindra. Dlatego opracowano

pełny model 3D w Ansys Fluent, którego wyniki były częściowo niezadowalające. Główną wada był brak informacji dotyczacych emisji. Ponadto ciśnienie w cylindrze podczas suwu sprężania było zawyżone, a faza zapłonu i rozwoju płomienia wystąpiły zbyt wcześnie w porównaniu z danymi eksperymentalnymi. Z drugiej strony wyniki Ansys Forte wykazały bardzo dobra zgodność podczas suwu sprężania. Ciśnienie podczas spalania było wyższe w porównaniu z danymi eksperymentalnymi, jednak dodatkowe zastosowanie modelu przedmuchu i staranny dobór parametrów modelu spalania znacznie poprawiły wyniki. Symulacje przeprowadzone dla paliw gazowych wykazały bardzo dobrą zgodność z danymi eksperymentalnymi dla przypadków zwalidowanych. Badania wiarygodności modelu spalania w postaci równania opisującego pozycję frontu płomienia dla różnych warunków pracy doprowadziły do wniosku, że na model spalania wpływaja głównie skład paliwa i tabele laminarnej prędkości spalania (section 4.1.2). Dla danego paliwa na model głównie wpływają większe wartości współczynnika nadmiaru powietrza. Przypadki λ =1.2 i 1.1 dla biogazu wykazały znaczące rozbieżności w przebiegu ciśnienia, dlatego w celu uzyskania lepszych wyników ponownie dostosowano parametry modelu. Powodem tych rozbieżności jest tablica laminarnych prędkości spalania, której wartości nie zostały zwalidowane na stanowisku pomiarowym. W odniesieniu do literatury poza przypadkiem mieszanki ubogiej wszystkie wartości laminarnej prędkości spalania były niższe. Ponadto model zapłonu wykazywał zależność od kąta wyprzedzenia zapłonu.

Symulacja CFD umożliwiła również wizualizację propagacji frontu płomienia i powstawania zanieczyszczeń (Rys. 4.3, 4.7, 4.8, 4.11 i 4.12). Analiza przestrzennego rozkładu przebiegu frontu płomienia wykazało, że na początkową fazę rozwoju płomienia silny wpływ ma przepływ płynu wewnątrz cylindra. W przypadku paliwa biogazowego wskazywała na wolniejszy wzrost jądra zapłonu we wczesnej fazie płomienia, co doprowadziło do dłuższego spalania, niższej sprawności, mocy wyjściowej, powtarzalności cykli, a w niektórych przypadkach wyższych emisji HC i CO w wyniku spalania podczas suwu wydechu. Badanie powstawania zanieczyszczeń dało interesujące wyniki. Powstawanie tlenku węgla głównie występuje w warstwie płomienia w wyniku utleniania metanu, podczas gdy tworzenie NOx jest opóźnione. Najwyższa zawartość NOx została zarejestrowana w okolicy świecy zapłonowej w obszarze wypalonego gazu (sekcja 4.2).

Podsumowując, główną zaletą paliwa biogazowego w porównaniu z paliwem CNG jest znacząco niższa emisja tlenków azotu. Dla odowiednich warunków pracy paliwo to uzyskało wyższą sprawność niż CNG. Do głównych wad można zaliczyć podwyższoną zawartość węglowodorów w spalinach, dłuższy czas spalania oraz niższa wartość pracy z cyklu.

Bibliografia

- [1] A.A. Amsden and C.W. Hirt. Yaqui: an arbitrary lagrangian–eulerian computer program xfor fluid flow at all speeds. 1973.
- [2] W. Anggono, I. Wardana, M. Lawes, K.J. Hughes, and A. Hayakawa. The behaviour of biogas containing carbon dioxide in spark ignited premix combustion at various pressures, March 2016.
- [3] ANSYS, Inc. Reaction Design Chemkin . On-line: http://www.ansys.com.
- [4] ANSYS, Inc. Reaction Design Forte . On-line: http://www.ansys.com.
- [5] M.U. Aslam, H.H. Masjuki, M.A. Kalam, H. Abdesselam, T.M.I. Mahlia, and M.A. Amalina. An experimental investigation of cng as an alternative fuel for a retrofitted gasoline vehicle. *Fuel*, 85(5):717 724, 2006.
- [6] K. Bhandari, A. Bansal, A. Shukla, and M. Khare. Performance and emissions of natural gas fueled internal combustion engine: A review. *Journal of Scientific and Industrial Research*, 64(5):333–338, 2005.
- [7] P. Boudier, S. Henriot, T. Poinsot, and T. Baritaud. A model for turbulent flame ignition and propagation in spark ignition engines. *Symposium (International) on Combustion*, 24(1):503–510, 1992.
- [8] K.N.C. Bray, M. Champion, and P.A. Libby. The interaction between turbulence and chemistry in premixed turbulent flames. In *Turbulent Reactive Flows*, pages 541–563. Springer, 1989.
- [9] E. Brutschin and A. Fleig. Geopolitically induced investments in biofuels. *Energy Economics*, 74:721 732, 2018.
- [10] B. Adouane C. Mokrane1 and A. Benzaoui. Composition and stoichiometry effects of biogas as fuel in spark ignition engine. *International Journal of Automotive and Mechanical Engineering*, 15(1):5036 – 5052, 2018.

- [11] R. Chandra, V.K. Vijay, P.M.V. Subbarao, and T.K. Khura. Performance evaluation of a constant speed ic engine on cng, methane enriched biogas and biogas. *Applied Energy*, 88(11):3969 – 3977, 2011.
- J.S. Clark, S.M. DeCorso, ASTM Committee D-2 on Petroleum Products, Lubricants, and ASTM Committee D-3 on Gaseous Fuels. Stationary gas turbine alternative fuels
 : a symposium. 1983. Includes bibliographical references.
- [13] O. Colin, A. Benkenida, and C. Angelberger. 3d modeling of mixing, ignition and combustion phenomena in highly stratified gasoline engines. *Oil & gas science and technology*, 58(1):47–62, 2003.
- [14] A. Guillouzouic-Le Corff. Did oil prices trigger an innovation burst in biofuels? Energy Economics, 75:547 – 559, 2018.
- [15] A. Demirbas. Political, economic and environmental impacts of biofuels: A review. Applied Energy, 86:S108 – S117, 2009. Bio-fuels in Asia.
- [16] S.-L. Ding, E.-Z. Song, L.-P. Yang, G. Litak, Y.-Y. Wang, Ch. Yao, and X.-Z. Ma. Analysis of chaos in the combustion process of premixed natural gas engine. *Applied Thermal Engineering*, 121:768 – 778, 2017.
- [17] Endress+Hauser. Coriolis flowmeter Proline Promass . Online: https://www.pl.endress.com/.
- [18] J. Etheridge, S. Mosbach, M. Kraft, H. Wu, and N. Collings. Modelling cycle to cycle variations in an si engine with detailed chemical kinetics. *Combustion and Flame*, 158(1):179 – 188, 2011.
- [19] Eurostat. Environment and energy database on greenhouse gas emissions by source sector.
 Online: http://ec.europa.eu/eurostat/data/database.
- [20] L. Fan and R.D. Reitz. Development of an ignition and combustion model for sparkignition engines. SAE Transactions, 109:1977–1989, 2000.
- [21] C. Gong, D. Li, Z. Li, and F. Liu. Numerical study on combustion and emission in a disi methanol engine with hydrogen addition. *International Journal of Hydrogen Energy*, 41(1):647 – 655, 2016.
- [22] V.N. Gunaseelan. Anaerobic digestion of biomass for methane production: A review. Biomass and Bioenergy, 13(1):83 – 114, 1997.
- [23] J.B. Heywood. Internal Combustion Engine Fundementals, volume 21. 1988.
- [24] Na. Hinton and R. Stone. Laminar burning velocity measurements of methane and carbon dioxide mixtures (biogas) over wide ranging temperatures and pressures. *Fuel*, 116:743 – 750, 2014.

- [25] J.B. Holm-Nielsen, T. Al Seadi, and P. Oleskowicz-Popiel. The future of anaerobic digestion and biogas utilization. *Bioresource Technology*, 100(22):5478 – 5484, 2009. OECD Workshop: Livestock Waste Treatment Systems of the Future: A Challenge to Environmental Quality, Food Safety, and Sustainability.
- [26] S. Di Iorio, P. Sementa, and B. M. Vaglieco. Analysis of combustion of methane and hydrogen-methane blends in small di si (direct injection spark ignition) engine using advanced diagnostics. *Energy*, 108:99 – 107, 2016. Sustainable Energy and Environmental Protection 2014.
- [27] J. Duffield M. Garboski H. Shapouri J. Sheehan, V. Cambreco. An overview of biodiesel and petroleum diesel life cycles. A report by US Department of Agriculture and Energy, pages 1–35, 1998.
- [28] M.I. Jahirul, H.H. Masjuki, R. Saidur, M.A. Kalam, M.H. Jayed, and M.A. Wazed. Comparative engine performance and emission analysis of cng and gasoline in a retrofitted car engine. *Applied Thermal Engineering*, 30(14):2219 – 2226, 2010.
- [29] C. Ji, X. Liu, B. Gao, S. Wang, and J. Yang. Numerical investigation on the combustion process in a spark-ignited engine fueled with hydrogen–gasoline blends. *International Journal of Hydrogen Energy*, 38(25):11149 – 11155, 2013.
- [30] Y. Jiang, S. Xiong, W. Shi, W. He, T. Zhang, X. Lin, Y. Gu, Y. Lv, X. Qian, Z. Ye, C. Wang, and B. Wang. Research of biogas as fuel for internal combustion engine. In 2009 Asia-Pacific Power and Energy Engineering Conference, pages 1–4, March 2009.
- [31] A.R. Kerstein, W.T. Ashurst, and F.A. Williams. Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Phys. Rev. A*, 37:2728–2731, Apr 1988.
- [32] Kistler Group. Kisler 6117B . Online: https://www.kistler.com/.
- [33] E.-C. Kwon, K. Song, M. Kim, Y. Shin, and S. Choi. Performance of small spark ignition engine fueled with biogas at different compression ratio and various carbon dioxide dilution. *Fuel*, 196:217 – 224, 2017.
- [34] O. Laget, S. Richard, D. Serrano, and D. Soleri. Combining experimental and numerical investigations to explore the potential of downsized engines operating with methane/hydrogen blends. *International Journal of Hydrogen Energy*, 37(15):11514 11530, 2012. Hydrogen Enriched Methane.
- [35] Leine & Linde. RSI 503. Online: http://www.leinelinde.com/.
- [36] Link. XTREME ECU. Online: https://www.linkecu.com/.

- [37] J. Liu and C.E. Dumitrescu. 3d cfd simulation of a ci engine converted to si natural gas operation using the g-equation. *Fuel*, 232:833 844, 2018.
- [38] H. Maldonado, T. D. Durbin, X. Zhu, J.M. Norbeck, and D. Cocker. Internal Combustion Engine (ICE) Air Toxic Emissions. *Sulphur*, 92521(909):169, 2004.
- [39] F.E. Marble and J.E. Broadwell. The coherent flame model for turbulent chemical reactions, 1977.
- [40] F. Matekunas. Engine combustion control with dilution flow by pressure management ratio, 11 1986. US patent no. 4624229.
- [41] F. Matekunas. Engine combustion control with fuel balancing by pressure management ratio, 11 1986. US patent no. 4621603.
- [42] F. Matekunas. Engine combustion control with ignition timing by pressure management ratio, 11 1986. US patent no. 4622939.
- [43] S.S. Merola, S. Di Iorio, A. Irimescu, P. Sementa, and B. M. Vaglieco. Spectroscopic characterization of energy transfer and thermal conditions of the flame kernel in a spark ignition engine fueled with methane and hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy*, 42(18):13276 – 13288, 2017.
- [44] S.S. Merola, A. Irimescu, C. Tornatore, S. Valentini, G. Kruczek, A. Szlek, and W. Adamczyk. UV-visible digital imaging of split injection in a gasoline direct injection engine. *Thermal Science*, 19(6), 2015.
- [45] M. Metghalchi and J.C. Keck. Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combustion and Flame*, 38:143 – 154, 1980.
- [46] S.N. Naik, V.V. Goud, P.K. Rout, and A.K. Dalai. Production of first and second generation biofuels: A comprehensive review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 14(2):578 – 597, 2010.
- [47] National Instruments Corp. LabVIEW . Online: http://www.ni.com.
- [48] J. Park and J. Choi. A numerical investigation of lean operation characteristics of spark ignition gas engine fueled with biogas and added hydrogen under various boost pressures. Applied Thermal Engineering, 117:225–234, 2017.
- [49] C.S. Peskin. Flow patterns around heart valves: A numerical method. Journal of Computational Physics, 10(2):252 – 271, 1972.
- [50] C.S. Peskin. The immersed boundary method. Acta Numerica, 11:479–517, 2002.
- [51] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge Monographs on Mechanics. Cambridge University Press, 2000.

- [52] L. Pizzuti, C.A. Martins, and P.T. Lacava. Laminar burning velocity and flammability limits in biogas: A literature review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 62:856 – 865, 2016.
- [53] T. Poinsot and D. Veynante. Theoretical and numerical combustion. RT Edwards, Inc., 2005.
- [54] S.B. Pope. The evolution of surfaces in turbulence. International journal of engineering science, 26(5):445–469, 1988.
- [55] A.S. Ramadhas, S. Jayaraj, and C. Muraleedharan. Use of vegetable oils as i.c. engine fuels –a review. *Renewable Energy*, 29(5):727 – 742, 2004.
- [56] E. Ranzi, A. Frassoldati, R. Grana, A. Cuoci, T. Faravelli, A.P. Kelley, and C.K. Law. Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38(4):468 – 501, 2012.
- [57] G.M. Rassweiler and L. Withrow. Motion pictures of engine flames correlated with pressure cards. SAE Technical Paper, 1938.
- [58] O. Razbani, N. Mirzamohammad, and M. Assadi. Literature review and road map for using biogas in internal combustion engines. In *Third International Conference* on Applied Energy, 16-18 May 2011.
- [59] Saxon-Junkalator. Infralyt EL. Online: https://www.saxon-junkalor.de/.
- [60] M. C. Sellnau, F. A. Matekunas, P. A. Battiston, and Ch.-F. Chang. Cylinderpressure-based engine control using pressure-ratio-management and low-cost nonintrusive cylinder pressure sensors. (2000-01-0932), 2000. SAE Technical Paper.
- [61] R.A.B. Semin. A technical review of compressed natural gas as an alternative fuel for internal combustion engines. American Journal of Engineering and Applied Sciences, 1(4):302–311, 2008.
- [62] L. Sforza, T. Lucchini, and A. Onorati. Cfd modelling of flame stretch in si engines. *Energy Procedia*, 82:59 – 66, 2015. 70th Conference of the Italian Thermal Machines Engineering Association, ATI2015.
- [63] S.A. Skeen, J. Manin, L.M. Pickett, E. Cenker, G. Bruneaux, K. Kondo, T. Aizawa, F. Westlye, K. Dalen, A. Ivarsson, T. Xuan, J.M. Garcia-Oliver, Y. Pei, S. Som, W. Hu, R.D. Reitz, T. Lucchini, G. D'Errico, D. Farrace, S.S. Pandurangi, Y.M. Wright, M.A. Chishty, M. Bolla, and E. Hawkes. A progress review on soot experiments and modeling in the engine combustion network (ecn). *SAE Int. J. Engines*, 9:883–898, 04 2016.

- [64] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner Jr., V.V. Lissianski, and Z. Qin. Gri-mech 3.0. On-line: http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [65] T-T Electric. LAK 4000a. Online: http://www.t-telectric.com/.
- [66] J. Yang Tan, F. Bonatesta, H.K. Ng, and S. Gan. Developments in computational fluid dynamics modelling of gasoline direct injection engine combustion and soot emission with chemical kinetic modelling. *Applied Thermal Engineering*, 107:936 – 959, 2016.
- [67] Z. Tan and R.D. Reitz. An ignition and combustion model based on the level-set method for spark ignition engine multidimensional modeling. *Combustion and Flame*, 145(1):1 – 15, 2006.
- [68] A.M.K.P. Taylor. Science review of internal combustion engines. Energy Policy, 36(12):4657–4667, 2008.
- [69] K. Truffin, C. Angelberger, S. Richard, and C. Pera. Using large-eddy simulation and multivariate analysis to understand the sources of combustion cyclic variability in a spark-ignition engine. *Combustion and Flame*, 162(12):4371 – 4390, 2015.
- [70] S. Verhelst and T. Wallner. Hydrogen-fueled internal combustion engines. Progress in Energy and Combustion Science, 35(6):490–527, 2009.
- [71] T.J. Wallington, E.W. Kaiser, and J.T. Farrell. Automotive fuels and internal combustion engines: a chemical perspective. *Chemical Society Reviews*, 35(4):335, 2006.
- [72] T. Wang, X. Zhang, J. Xu, S. Zheng, and X. Hou. Large-eddy simulation of flame-turbulence interaction in a spark ignition engine fueled with methane/hydrogen/carbon dioxide. *Energy Conversion and Management*, 104:147 – 159, 2015. Special Issue on Sustainable development of energy, water and environment systems.
- [73] X. Wang, M.K. Lim, and Y. Ouyang. Food-energy-environment trilemma: Policy impacts on farmland use and biofuel industry development. *Energy Economics*, 67:35 – 48, 2017.
- [74] X. Wang, H. Zhao, and H. Xie. Effect of piston shapes and fuel injection strategies on stoichiometric stratified flame ignition (SFI) hybrid combustion in a PFI/DI gasoline engine by numerical simulations. *Energy Conversion and Management*, 98:387–400, jul 2015.
- [75] I. Wiebe. Halbempirische formel für die verbrennung-geschwindigkeit. Verlag der Akademic der Wissenschaften der VdSSR, 1956.

- [76] V. Zimont, W. Polifke, M. Bettelini, W. Weisenstein, et al. An efficient computational model for premixed turbulent combustion at high reynolds numbers based on a turbulent flame speed closure. *Transactions-American Society of Mechanical Engineers Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 120:526–532, 1998.
- [77] V.L. Zimont. Gas premixed combustion at high turbulence. turbulent flame closure combustion model. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 21(1):179–186, 2000.
- [78] V.L. Zimont and A.N. Lipatnikov. A numerical model of premixed turbulent combustion of gases. *Chem. Phys. Rep*, 14(7):993–1025, 1995.
- [79] A. Zschutschke, J. Neumann, D. Linse, and C. Hasse. A systematic study on the applicability and limits of detailed chemistry based nox models for simulations of the entire engine operating map of spark-ignition engines. *Applied Thermal Engineering*, 98:910 – 923, 2016.