Višezonski simulacijski model HCCI motora s razdvojenim rješavačem

llinčić, Petar

Doctoral thesis / Disertacija

2015

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: University of Zagreb, Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture / Sveučilište u Zagrebu, Fakultet strojarstva i brodogradnje

Permanent link / Trajna poveznica: https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:235:130005

Rights / Prava: In copyright/Zaštićeno autorskim pravom.

Download date / Datum preuzimanja: 2024-12-20

Repository / Repozitorij:

Repository of Faculty of Mechanical Engineering and Naval Architecture University of Zagreb







Sveučilište u Zagrebu

FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

Petar Ilinčić, dipl. ing. stroj.

VIŠEZONSKI SIMULACIJSKI MODEL HCCI MOTORA S RAZDVOJENIM RJEŠAVAČEM

DOKTORSKI RAD

Zagreb, 2015.



University of Zagreb

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING AND NAVAL ARCHITECTURE

Petar Ilinčić, mag. ing. mech.

MULTI ZONE SIMULATION MODEL FOR HCCI ENGINE WITH A SEGREGATED SOLVER

DOCTORAL THESIS

Zagreb, 2015



Sveučilište u Zagrebu

FAKULTET STROJARSTVA I BRODOGRADNJE

Petar Ilinčić, dipl. ing. stroj.

VIŠEZONSKI SIMULACIJSKI MODEL HCCI MOTORA S RAZDVOJENIM RJEŠAVAČEM

DOKTORSKI RAD

Mentor: Prof. dr. sc. Zoran Lulić

Zagreb, 2015.



University of Zagreb

FACULTY OF MECHANICAL ENGINEERING AND NAVAL ARCHITECTURE

Petar Ilinčić, mag. ing. mech.

MULTI ZONE SIMULATION MODEL FOR HCCI ENGINE WITH A SEGREGATED SOLVER

DOCTORAL THESIS

Supervisor: Prof. dr. sc. Zoran Lulić

Zagreb, 2015

PODACI ZA BIBLIOGRAFSKU KARTICU

UDK: 621.43.01

Ključne riječi: HCCI motor, višezonski simulacijski model, razdvojeni rješavač Znanstveno područje: TEHNIČKE ZNANOSTI Znanstveno polje: Strojarstvo Institucija u kojoj je rad izrađen: Fakultet strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu Mentor rada: Prof. dr. sc. Zoran Lulić Broj stranica: 175 Broj slika: 96 Broj tablica: 25 Broj korištenih bibliografskih jedinica: 90 Datum obrane: 6. ožujak 2015. Povjerenstvo: Doc. dr. sc. Darko Kozarac (FSB, Zagreb) – predsjednik povjerenstva, Prof. dr. sc. Zoran Lulić (FSB, Zagreb) – mentor,

Prof. dr. sc. Ernest Bazijanac (FPZ, Zagreb) - član povjerenstva.

Institucija u kojoj je rad pohranjen: Fakultet strojarstva i brodogradnje Sveučilišta u Zagrebu Nacionalna i sveučilišna knjižnica u Zagrebu

ZAHVALA

Ovo je prilika da zahvalim svim dragim ljudima čija mi je nesebična podrška i pomoć tijekom izrade disertacije bila neprocjenjiva.

Prije svega, veliko hvala mentoru, prof. dr. sc. Zoranu Luliću, koji mi je pružio priliku da postanem dio tima Katedre za motore i vozila. Za sve što sam od njega naučio, znanstveno i manje znanstveno, strpljenje, podršku i prijateljstvo biti ću mu uvijek zahvalan.

Hvala prof. dr. sc. Ivanu Mahalcu na svim mudrim savjetima i bezrezervnoj podršci. Njegova predavanja i posvećenost studentima su nezamjenjivi.

Hvala doc. dr. sc. Darku Kozarcu na pomoći, brojnim raspravama i komentarima koji su ovaj rad učinili boljim.

Hvala prof. dr. sc. Ernestu Bazijancu na korisnim sugestijama, trudu i pažnji prilikom pregleda i ocjenjivanja doktorskog rada.

Prijateljima, kolegama s Katedre za motore i vozila hvala na podršci i pruženoj pomoći tijekom izrade ovoga rada.

Hvala prijateljima koji su uvijek bili blizu da zajedno sa mnom podijele mnoge lijepe i one manje lijepe trenutke.

Na kraju, veliko hvala mojoj obitelji na bezuvjetnoj ljubavi, pažnji i strpljenju.

Zagreb, ožujak 2015.

Petar Ilinčić

"The scientists of today think deeply instead of clearly. One must be sane to think clearly, but one can think deeply and be quite insane."

Nikola Tesla

Sažetak	vii
Summaryv	iii
Popis slika	ix
Popis tablica x	vi
Popis oznakaxv	iii
Popis kratica	xν
1. Uvod	. 1
1.1. Pregled dosadašnjih istraživanja	. 5
1.2. Motivacija	10
1.3. Cilj i hipoteza istraživanja	11
1.4. Metodologija i plan istraživanja	11
1.5. Struktura doktorskoga rada	13
2. HCCI motor – motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem	15
2.1. Povijesni pregled	15
2.2. Izgaranje u HCCI motoru	16
2.3. Usporedba Ottovog, Dieselovog i HCCI motora	18
2.3.1. Prednosti HCCI motora	22
2.3.2. Nedostaci HCCI motora	23
3. Simulacijski modeli motora s unutarnjim izgaranjem	26
3.1. Simulacijski modeli za HCCI motore	29
3.1.1. Utjecaj turbulencije na HCCI izgaranje	33
3.2. Opći jednozonski bezdimenzijski simulacijski model MSUI	34
3.3. Termodinamička svojstva kemijskih spojeva	37
3.4. Kemijska kinetika	39

SADRŽAJ

	3.5.	Zajednički i razdvojeni rješavač	45
4.	V	išezonski simulacijski model HCCI motora	51
	4.1.	Jednozonski model HCCI motora	53
	4.2.	Podmodel za podjelu prostora izgaranja na zone modela	56
	4.3.	Podmodel za određivanje početnih uvjeta	63
	4.4.	Podmodel za izmjenu topline zone	69
	4.5.	Podmodel za izjednačavanje tlaka u zonama	75
5.	V	erifikacija simulacijskog modela	84
	5.1.	Utjecaj proračunskog koraka	84
	5.2.	Utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona	96
	5.3.	Utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke prostora izgaranja	99
	5.4.	Utjecaj temperature usisa	102
	5.5.	Utjecaj tlaka usisa	104
6.	V	alidacija i primjena simulacijskog modela	107
	6.1.	Validacija modela s 24 zone	110
	6.2.	Validacija modela s 18 zona	117
	6.3.	Validacija modela s 12 zona	120
	6.4.	Validacija modela s 36 zona	125
	6.5.	Analiza izračuna tlaka u cilindru modelima s 12, 18, 24 i 36 zona	127
	6.6.	Analiza izračuna emisija modelima s 12, 18 i 24 zone	130
	6.7.	Utjecaj zone procijepa na emisije štetnih tvari – primjena modela	133
7.	Za	aključak	139
	7.1.	Glavna postignuća rada	139
	7.2.	Izvorni znanstveni doprinos	141
,	7.3.	Mogući smjer daljnjih istraživanja	141
Po	pis (citirane literature	142

Kratak životopis	. 149
Kratak životopis na engleskom jeziku	. 150

Sažetak

Kontinuirani razvoj motora s unutarnjim izgaranjem usmjeren je k postizanju što veće snage uz što manju potrošnju goriva. Istovremeno, sve stroži propisi o dozvoljenim emisijama štetnih tvari, postavljaju na suvremene motore zahtjeve koji će se postojećim Ottovim i Dieselovim motorima teško moći zadovoljiti.

Moguće rješenje je motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem – HCCI motor (engl. *Homogenuos Charge Compression Ignition – HCCI*). U svrhu daljnjeg napretka u području HCCI motora, u okviru ovog doktorskog rada razvijen je višezonski simulacijski model izgaranja s integriranom kemijskom kinetikom i razdvojenim rješavanjem stanja u zonama. Povećanjem broja zona modela može se povećati točnost proračuna procesa izgaranja u HCCI motoru. Obzirom da se model odnosi samo na visokotlačni dio radnog procesa, integracijom modela u programski paket AVL BOOST, omogućuje se simulacija čitavog radnog ciklusa HCCI motora.

Ključne riječi: HCCI motor, višezonski simulacijski model, razdvojeni rješavač

Summary

Continuous development of the internal combustion engines is focused on increasing the power output while decreasing the fuel consumption. At the same time, stricter emissions regulations raise the demands on modern engines that will be hardly fulfilled with the existing spark ignition and compression ignition engines.

A possible solution is a HCCI (*Homogenous Charge Compression Ignition*) engine. To make further progress in the field of HCCI engines, within this dissertation a multi-zone simulation model with integrated chemical kinetics and segregated solver is developed. By increasing the number of model zones, the accuracy of the combustion process calculation in the HCCI engine can be improved. Since the simulation model calculates the high pressure cycle only, integration of the model in the software package AVL BOOST allows the full cycle simulation of the HCCI engine.

Keywords: HCCI engine, multi-zone simulation model, segregated solver

Popis slika

Slika 1. Predviđanja porasta mobilnosti ljudi i roba [2]1
Slika 2. Smanjenje prosječne emisije CO2 flote godišnje proizvedenih osobnih
vozila [5]2
Slika 3. Projekcije prodaje osobnih vozila ovisno o vrsti pogona [7]3
Slika 4. Dopuštene razine emisije štetnih tvari iz motora s unutarnjim izgaranjem u
Europskoj uniji za vozila kategorije M1 (putnički automobili) [10]4
Slika 5. Prikaz oslobađanja topline Ottovog, HCCI i Dieselovog motora [11], [36]16
Slika 6. Karakteristike pripreme smjese i izgaranja u Dieselovom, Ottovom i HCCI
motoru
Slika 7. Područja emisija štetnih tvari i područja rada Ottovog, Dieselovog i HCCI
motora [42]
Slika 8. Shematski prikaz uporabe simulacija u procesu razvoja suvremenih motora
s unutarnjim izgaranjem [50]26
Slika 9. Razine kompleksnosti simulacijskih modela u ovisnosti o proračunskom
vremenu [54]
Slika 10. Usporedba rezultata jednozonskog i višezonskog simulacijskog modela s
eksperimentalnim rezultatima [55]31
Slika 11. Opći jednozonski simulacijski model motora s unutarnjim izgaranjem34
Slika 12. Promjena molarnog toplinskog kapaciteta CO2 ovisno o temperaturi
izračunata primjenom NASA polinomom
Slika 13. Vrste modela kemijske kinetike prikazane brojem kemijskih spojeva i
kemijskih reakcija kojima se opisuje određeni mehanizam44
Slika 14. Usporedni prikaz računskih koraka zajedničkog i razdvojenog rješavača
[30]47
Slika 15. Usporedba brzine izračuna razdvojenog i zajedničkog rješavača
Viskahamoorthy, [48]49

Slika 16. Usporedba brzine izračuna razdvojenog i zajedničkog rješavača, Kongsereeparp, [70]	50
Slika 17. Shematski prikaz integracije višezonskog modela HCCI motora u programski paket AVL BOOST	52
Slika 18. Profil tlaka u cilindru tijekom 10 ciklusa proračuna višezonskog modela HCCI motora	53
Slika 19. Jednozonski simulacijski model HCCI motora	54
Slika 20. Mehanizmi nastajanja emisija štetnih tvari u HCCI motoru, [75]	56
Slika 21. Izgled često korištenih podjela prostora izgaranja u višezonskim modelima, [77], [78]	58
Slika 22. Temperaturna raspodjela unutar cilindra motora Ricardo E6 – CFD simulacija [79]	58
Slika 23. Temperaturna raspodjela unutar cilindra motora Cummins B – CFD simulacija [33]	58
Slika 24. Podjela prostora izgaranja u zone modela	59
Slika 25. Različiti oblici glave cilindra i čela klipa [73]	61
Slika 26. Geometrijske značajke kojima se izračunavaju volumeni pojedinih zona modela	62
Slika 27. Tijek procesa izračuna početnih uvjeta višezonskog modela	63
Slika 28. Raspodjela temperatura u zonama modela s 12 i 24 zone izračunata podmodelom za određivanje početnih uvjeta	68
Slika 29. Dijagram toka izračuna početnih uvjeta višezonskog modela	69
Slika 30. Primjer modeliranja izmjene topline zone modela prikazan na primjeru zone 3	72
Slika 31. Termodinamičko stanje u zonama prije (iznad strelice) i poslije (ispod strelice) izjednačavanja tlaka u zonama na jedinstveni tlak	75
Slika 32. Zakon održanja energije u zoni prilikom izmjene mase sa susjednim zonama	79
Slika 33. Tlak u zonama modela sa sedam zona prije i poslije izjednačavanja tlaka.	80

Slika 34. Konvergencija rješenja izjednačavanja tlaka u zonama	81
Slika 35. Tlak u zonama 40-zonskog modela prije i poslije izjednačavanja tlaka, slučaj 1	81
Slika 36. Tlak u zonama 40-zonskog modela prije i poslije izjednačavanja tlaka, slučaj 2	82
Slika 37. Tlak u zonama 40-zonskog modela prije i poslije izjednačavanja tlaka, slučaj 3	82
Slika 38. Dijagram toka modela za izjednačavanje tlaka u zonama	83
Slika 39. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 24 zone i konstanata SET 1	85
Slika 40. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 24 zone i konstanata SET 1 – uvećano u području GMT	86
Slika 41. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 24 zone i konstanata SET 2	87
Slika 42. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 24 zone i konstanata SET 2 – uvećano u području GMT	87
Slika 43. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 36 zona i konstanata SET 1	89
Slika 44. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 36 zona i konstanata SET 1 – uvećano u području GMT	90
Slika 45. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 36 zona i konstanata SET 2	90
Slika 46. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 36 zona i konstante SET-2 – uvećano u području GMT	91
Slika 47. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstanata SET 1	92
Slika 48. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstante SET 1 – uvećano u području GMT	92

Slika 49. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstanata SET 2
Slika 50. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstanata SET 3
Slika 51. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstante SET 3 – uvećano u području GMT95
Slika 52. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona ZHTC na tlak u cilindru (model s 24 zone, WHT = 1,1)96
Slika 53. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona ZHTC na tlak u cilindru (model s 24 zone, WHT = 1,1) – uvećano u području GMT
Slika 54. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline ZHTC = $2,5 \cdot 10^{-5}$ (s) na temperature pojedinih zona i srednju temperaturu cilindra (24 zone, WHT = 1,1)
Slika 55. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline ZHTC = $70 \cdot 10^{-5}$ (s) na temperature pojedinih zona i srednju temperaturu cilindra (24 zone, WHT = 1,1)
Slika 56. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona ZHTC na brzinu oslobađanja topline. Kod zelene krivulje konstanta je 28 puta veća
Slika 57. Verifikacija modela: utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke WHT na tlak u cilindru (model s 24 zone, $ZHTC = 2,5 \cdot 10^{-5}$)100
Slika 58. Verifikacija modela: utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke WHT na tlak u cilindru (model s 24 zone, $ZHTC = 2,5 \cdot 10^{-5}$) – uvećano u području GMT
Slika 59. Verifikacija modela: utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke WHT na tlak u cilindru (model s 24 zone, $ZHTC = 1,0.10^{-3}$) – uvećano u području GMT
Slika 60. Verifikacija modela: usporedni prikaz utjecaja korekcijskog faktora WHT ovisno o ZHTC na tlak u cilindru za model s 24 zone, uvećano u području GMT101

Slika 61. Verifikacija modela: utjecaj temperature usisa na tlak u cilindru102
Slika 62. Verifikacija modela: utjecaj temperature usisa na krivulju tlaka u cilindru – uvećano u području GMT102
Slika 63. Verifikacija modela: usporedni prikaz brzina oslobađanja topline za dvije različite temperature usisa, T_{us} = 180 °C i T_{us} = 220 °C – uvećano u području GMT .103
Slika 64. Verifikacija modela: utjecaj tlaka usisa na krivulju tlaka u cilindru104
Slika 65. Verifikacija modela: utjecaj tlaka usisa na krivulju tlaka u cilindru – uvećano u području GMT104
Slika 66. Verifikacija modela: usporedni prikaz brzina oslobađanja topline za tri različite vrijednosti tlaka usisa – uvećano u području GMT105
Slika 67. Shematski prikaz eksperimentalnog postava [89]108
Slika 68. Shematski prikaz simulacijskog modela eksperimentalnog motora u programskom paketu AVL BOOST
Slika 69. Validacija modela s 24 zone: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima
Slika 70. Validacija modela s 24 zone: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT112
Slika 71. Validacija modela s 24 zone: usporedni prikaz emisija štetnih tvari
Slika 72. Raspodjela temperatura u prostoru izgaranja, model s 24 zone, SET 4 – uvećano u području GMT114
Slika 73. Raspodjela temperatura u prostoru izgaranja, model s 24 zone, SET 1 – uvećano u području GMT114
Slika 74. Validacija modela s 24 zone, SET 4: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT115
Slika 75. Validacija modela s 24 zone, SET 4: usporedba brzina oslobađanja topline za model sa 6 zona i model s 24 zone – uvećano u području GMT116
Slika 76. Validacija modela s 24 zone: usporedba profila temperature cilindra modela sa 6 zona i modela s 24 zone, SET 4116

Slika 77. Raspodjela temperature u prostoru izgaranja, modela sa 6 zona – uvećano u području GMT117
Slika 78. Validacija modela s 18 zone: usporedba profila izmjerenog tlaka (E1) i tlaka izračunatog simulacijskim modelima
Slika 79. Validacija modela s 18 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka (E1) i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT118
Slika 80. Validacija modela s 18 zona: usporedni prikaz emisija štetnih tvari119
Slika 81. Raspodjela temperatura u prostoru izgaranja, model s 18 zone, SET 1 – uvećano u području GMT120
Slika 82. Validacija modela s 12 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima
Slika 83. Validacija modela s 12 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT
Slika 84. Validacija modela s 12 zona: usporedni prikaz emisija štetnih tvari122
Slika 85. Raspodjela temperature u prostoru izgaranja, modela s 12 zona, SET 3 – uvećano u području GMT123
Slika 86. Validacija modela s 12 zona, SET 1: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT
Slika 87. Raspodjela temperature u prostoru izgaranja, modela s 12 zona, SET 1 – uvećano u području GMT124
Slika 88. Validacija modela s 36 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT126
Slika 89. Validacija modela s 36 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima s 24 i 36 zona SET 3 – uvećano u području GMT
Slika 90. Validacija modela: usporedba izmjerenog tlak u cilindru i izračunatog simulacijskim modelima sa 6, 12, 18, 24 i 36 zona
Slika 91. Validacija modela: usporedba izmjerenog tlak u cilindru i izračunatog simulacijskim modelima sa 6, 12, 18, 24 i 36 zona – uvećano u području GMT128

Slika 92. Validacija modela: srednja kvadratna pogreška simulacijskih modela u	
odnosu na izmjerene podatke tlaka	.129
Slika 93. Validacija modela: prikaz emisija štetnih tvari ovisno o broju zona	
modela u odnosu na izmjerene vrijednosti	.131
Slika 94. Primjena modela: promjena ukupne emisije HC uslijed promjene	
volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2	.136
Slika 95. Primjena modela: promjena ukupne emisije CO uslijed promjene	
volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2	.137
Slika 96. Primjena modela: promjena ukupne emisije NO_X uslijed promjene	
volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2	.137

Popis tablica

Tablica 1. Usporedba postojećih i predloženog višezonskih modela	11
Tablica 2. Karakteristike pojedinog tipa motora s unutarnjim izgaranjem	21
Tablica 3. Usporedba zajedničkog i razdvojenog rješavača	48
Tablica 4. Proračunski parametri verifikacije modela	85
Tablica 5. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 24 zone, SET 1	88
Tablica 6. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 24 zone, SET 2	88
Tablica 7. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 36 zona (SET 1)	91
Tablica 8. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 36 zona (SET 2)	91
Tablica 9. Proračunski parametri verifikacije modela s 12 zona	93
Tablica 10. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 12 zona (SET 1)	95
Tablica 11. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 12 zona (SET 3)	95
Tablica 12. Vrijednosti vremenske konstante izmjene topline između zona za verifikaciju modela s 24 zone	96
Tablica 13. Tehničke značajke motora korištenog za mjerenja, prije i poslije preinaka	07
Tablica 14. Osrednjeni rezultati ispitivanja 300 ciklusa za tri radne točke [88]10	09
Tablica 15. Parametri modela s 24 zone za validaciju radne točke 11	11
Tablica 16. Validacija modela s 24 zone: emisije štetnih tvari izračunate simulacijskim modelima i izmjerene ispitivanjem motora1	12
Tablica 17. Parametri modela s 18 zona za validaciju radne točke 11	17

Tablica 18. Validacija modela s 18 zona: emisije štetnih tvari izračunate
simulacijskim modelima i izmjerene ispitivanjem motora119
Tablica 19. Parametri modela s 12 zona za validaciju radne točke 1
Tablica 20. Validacija modela s 12 zona: emisije štetnih tvari izračunate s
različitim setovima parametara i izmjerene ispitivanjem motora122
Tablica 21. Vremena izračuna ovisna o proračunskom koraku za modele s 24 zone
i s 12 zona125
Tablica 22. Parametri modela s 36 zona za validaciju radne točke 1
Tablica 23. Validacija modela: emisije štetnih tvari izračunate modelima s
različitim brojem zona i izmjerene ispitivanjem motora130
Tablica 24. Vrijednosti volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2134
Tablica 25. Primjena modela: emisije štetnih tvari izračunate za različite vrijednosti
volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2

Popis oznaka

<u>Latinične oznake</u>

Simbol	Jedinica	Opis
A	-	Faktor učestalosti
a_i	promjenjiva	Koeficijent NASA polinoma
a_k	-	član k aritmetičkog niza
A_{KL}	m^2	Površina čela klipa
$A_{ m GL}$	m^2	Površina glave motora
$A_{ m W}$	m ²	Površina preko koje se izmjenjuje toplina
b	_	Temperaturni koeficijent Arrheniusova izraza
c_i	$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$	Molarna koncentracija kemijskog spoja <i>i</i>
CF_{j}	_	Korekcijski faktor zone j
C^0_{mp}	J kmol K	Standardni molarni toplinski kapacitet pri konstantnom tlaku
$\overline{c}_{\mathrm{p},j}$	$\frac{J}{kgK}$	Specifični toplinski kapacitet mješavine plinova pri konstantnom tlaku zone <i>j</i>
$C_{\nu,i}$	J kg K	Specifični toplinski kapacitet pri konstantnom volumenu <i>i</i> -tog kemijskog spoja
\overline{c}_{v}	J kg K	Specifični toplinski kapacitet mješavine plinova pri konstantnom volumenu
$\overline{c}_{\mathrm{v},j}$	J kg K	Specifični toplinski kapacitet mješavine plinova pri konstantnom volumenu zone <i>j</i>
d	_	Razlika aritmetičkog niza
D_c	m	Promjer cilindra
$E_{ m A}$	J kmol	Energija aktivacije

Simbol	Jedinica	Opis
$F_j^{(\mathrm{x})}$	promjenjiva	Transportni član
G_m^0	$\frac{J}{kmol}$	Standardna molarna Gibbsova slobodna energija
h	m	Pomak klipa u ovisnosti o zakretu KV
h_0	m	Visina cilindra kada se klip nalazi u GMT
$h_{i,j}$	J kg	Specifična entalpija kemijskog spoja <i>i</i> u zoni <i>j</i>
$h_{ m in}$	$\frac{J}{kg}$	Specifična entalpija koja ulazi u cilindar
$\Delta H^0_{f,29815}$	J kmol	Standardna molarna entalpija stvaranja
H_m^0	J kmol	Standardna molarna entalpija
h_{PR1}	m	Visina zone procjepa klip-cilindar,
h_{PR2}	m	Visina zone procjepa glava-cilindar
$h_{ m STCIL}$	m	Visina zone uz stijenku cilindra
$h_{ m out}$	$\frac{J}{kg}$	Specifična entalpija koja izlazi iz cilindara
H_{uk}	m	Trenutna visina prostora izgaranja
K	_	Ukupan broj reakcija oslobađanja topline
k	promjenjiva	Konstanta brzine reakcije
$k_{ m f}$	promjenjiva	Konstanta brzine kemijske reakcije prema naprijed
k _r	promjenjiva	Konstanta brzine kemijske reakcije prema nazad
$m_{ m bb}$	kg	Masa koja izlazi iz cilindara uslijed propuhivanja
$m_{\rm BL}$	kg	Masa u zoni graničnog sloja
m _c	kg	Masa smjese u cilindru motora

Simbol	Jedinica	Opis
<i>m</i> _{DP}	kg	Masa smjese koja izgara difuzijskim plamenom
$m_{ m f}$	kg	Masa goriva ubrizgana u cilindar
<i>m</i> _{FP}	kg	Masa smjese koja izgara u fronti plamena
m_i	kg	Masa kemijskog spoja i
M_i	kg kmol	Molarna masa kemijskog spoja <i>i</i>
m _{in}	kg	Masa koja ulazi u cilindar kroz usisne ventile
<i>m</i> _{ij}	kg	Masa kemijskog spoja i u zoni j
m_j	kg	Masa radne tvari u zoni j
M_J	-	Jakobijeva matrica
M_J	_	Član Jakobijeve matrica
M_{jk}	_	Matrica interakcije između zona
M_{jk}	_	Član matrice interakcije između zona
Δm_j	kg	Promjena mase zone j
$\Delta m_{j \rm KOR}$	kg	Korigirana promjena mase zone j
m_{jk}	kg	Masa koja se iz zone <i>j</i> prebaci u zonu <i>k</i>
$m_{jk { m IN}}$	kg	Masa koja iz zone k ulazi u zonu j
m _{jkOUT}	kg	Masa koja iz zone j izlazi u zonu k
mout	kg	Masa koja izlazi iz cilindara kroz ispušne ventile
m _p	kg	Masa predmiješane smjese u cilindru motora
Ν	-	Ukupan broj reakcijskih zona
N _{reak}	_	Ukupan broj kemijskih reakcija
N _{sp}	_	Ukupan broj kemijskih spojeva
$N_{ m v}$	-	Ukupan broj izmjerenih / simuliranih vrijednosti
N_z	_	Ukupan broj zona višezonskog modela

Simbol	Jedinica	Opis
pc	Ра	Tlak u cilindru
$p_{ m c,gon}$	Pa	Tlak gonjenog motora
p _{cyl}	Pa	Tlak u zonama nakon postupka izjednačavanja
p_j	Ра	Tlak u zoni j
$p_{ m tol}$	Ра	Tolerancija za izračun jedinstvenog tlaka cilindra
$p_{ m us}$	Ра	Tlak usisa
pz	Ра	Tlak u zonama nakon podjele prostora izgaranja u zone
Q_{lpha}	J	Toplina koja se izmijeni sa stijenkama konvekcijom
Q_{ε}	J	Toplina koja se izmijeni sa stijenkama zračenjem
$Q_{\rm CI}$	J	Ukupno oslobođena toplina izgaranjem u motoru s kompresijskim paljenjem
$Q_{ m f}$	J	Toplina oslobođena izgaranjem goriva
$Q_{ m HCCI}$	J	Ukupno oslobođena toplina izgaranjem u HCCI motoru
$q_{ m j}$	kJ/kg	Ogrijevna vrijednost smjese po jedinici mase
Q_{j}	J	Ukupna toplina koju zona <i>j</i> izmijeni s okolinom
$Q_{jW,x}$	J	Toplina koju zona j izmijeni sa stijenkom x
Q_{j-k}	J	Toplina koju zona j izmijeni sa zonom k
$Q_{\rm SI}$	J	Ukupno oslobođena toplina izgaranjem u Ottovom motoru
$Q_{ m W}$	J	Toplina izmijenjena sa stijenkama prostora izgaranja
$Q_{w,j}$	J	Toplina izmijenjena između zone <i>j</i> i stijenki cilindra
R	$\frac{J}{kgK}$	Individualna plinska konstanta
R_i	$\frac{J}{kgK}$	Individualna plinska konstanta kemijskog spoja i
R_j	$\frac{J}{kgK}$	Individualna plinska konstanta mješavine plinova zone j

Simbol	Jedinica	Opis
R_m	J kmol K	Opća plinska konstanta
S_m^0	J kmol K	Standardna molarna entropija
SKP	promjenjiva	Standardna kvadratna pogreška
Т	Κ	Temperatura
t	S	Vrijeme
$T_{\rm BL}$	Κ	Temperatura zone graničnog sloja
T _c	Κ	Temperatura u cilindru
\overline{T}_{jk}	Κ	Srednja temperatura nakon miješanja zona j i k
$T_{\rm core}$	Κ	Temperatura središnjih zona jednake mase
T_j	Κ	Temperatura zone <i>j</i>
$T_{ m tol}$	К	Tolerancija temperatura
T _{us}	К	Temperatura usisa
$T_{ m W}$	Κ	Temperatura stijenke s kojom se izmjenjuje toplina
Δt	S	Vremenska konstanta izmjene topline između zona (ZHTC)
U	J	Unutarnja energija
$U_{ m BL}$	J	Unutarnja energija zone graničnog sloja
U_j	J	Unutarnja energija zone j
U	$\frac{J}{kg}$	Specifična unutarnja energija
V	$\frac{m^3}{kg}$	Specifični volumen
v_0	m/s	Obodna brzina smjese u cilindru
V_c	m ³	Volumen cilindra
V_{j}	m ³	Volumen zone <i>j</i>

Simbol	Jedinica	Opis
\overline{v}_{kl}	m/s	Srednja brzina klipa
W	J	Rad
W_j	J	Rad zone <i>j</i>
x	m	Udaljenost od stijenke cilindra prema središtu
X _i	<u>kg</u> kg	Maseni udio kemijskog spoja i
X _{ij}	<u>kg</u> kg	Maseni udio kemijskog spoja <i>i</i> u zoni <i>j</i>
Y _{iv,izmj}	promjeniva	Vrijednost dobivena mjerenjem u točki iv
$Y_{iv,sim}$	promjeniva	Vrijednost izračunata simulacijskim modelom u točki iv

<u>Grčke oznake</u>

Simbol	Jedinica	Opis
α	0	Kut zakreta koljenastog vratila
Δα	0	Proračunski korak
α_W	$\frac{W}{m^2K}$	Koeficijent konvektivnog prijelaza topline
χ_i	_	Kemijski spoj <i>i</i>
$\delta_{ ext{PR1}}$	m	Debljina zone procjepa klip-cilindar
$\delta_{ m PR2}$	m	Debljina zone procjepa glava-cilindar
δ_{RZ}	m	Debljina zone uz glavu motora odnosno čelo klipa
$\delta_{ m stcil}$	m	Debljina zone uz stijenku cilindra
λ	_	Faktor pretička zraka
$ ho_{j}$	$\frac{\mathrm{kg}}{\mathrm{m}^3}$	Gustoća radne tvari u zoni j

Simbol	Jedinica	Opis
\mathcal{U}_i '	_	Stehiometrijski koeficijent reaktanta i
ν_i "	_	Stehiometrijski koeficijent produkta i
$\dot{\omega}_i$	$\frac{kmol}{m^3s}$	Brzina stvaranja kemijskog spoja i
$\dot{\omega}_{\scriptscriptstyle i,j}$	$\frac{kmol}{m^3s}$	Brzina stvaranja kemijskog spoja <i>i</i> u zoni <i>j</i>
$\omega_{ m R}$	$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3\text{s}}$	Brzina kemijske reakcije

Popis kratica

Oznaka ili kratica	Opis
1-D	Jednodimenzijski
3-D	Trodimenzijski
BEV	Potpuno električno vozilo (engl. Battery Electric Vehicle)
CFD	Računalna dinamika fluida (engl. Computational Fluid Dynamics)
DOC	Oksidacijski katalizator (engl. Diesel Oxidation Catalyst)
DPF	Filtar čestica (engl. Diesel Particulate Filtar)
EGR	Recirkulacija ispušnih plinova (engl. Exhaust Gas Recirculation)
GMT	Gornja mrtva točka
HCCI	Kompresijsko paljenje homogene smjese (engl. Homogenuos Charge Compression Ignition)
IVO	Trenutak otvaranja ispušnog ventila
IVZ	Trenutak zatvaranja ispušnog ventila
KV	Koljenasto vratilo
MSUI	Motor s unutarnjim izgaranjem
NASA	Američka svemirska agencija (engl. National Aeronautics and Space Administration)
NEDC	Novi europski vozni ciklus (engl. New European Driving Cycle)
PCCI	Kompresijsko paljenje predmiješane smjese (engl. Premixed Charge Compression Ignition)
PHEV	Utično hibridno vozilo (engl. Plug in Hybrid Vehicle)
PM	Krute čestice (engl. Particulate Matter)
PN	Broj krutih čestica (engl. Particle Number)
PRF	Referentno gorivo (engl. Primary Reference Fuel)
SCR	Katalizator za selektivnu redukciju NO_X (engl. Selective Catalyst Reduction)
SOF	Čestice organskog porijekla (engl. Soluble Organic Fraction)
UVO	Trenutak otvaranja usisnog ventila
UVZ	Trenutak zatvaranja usisnog ventila

1. Uvod

Suvremeno društvo i njegov opstanak gotovo su nezamislivi bez mobilnosti, odnosno transporta ljudi, roba i informacija. Mobilnost je preduvjet ekonomskog razvoja, ali i pouzdan pokazatelj ekonomske razvijenosti pojedine države ili regije. Razina mobilnosti nije jednaka u svim zemljama, a zemlje s većom razinom mobilnosti su i ekonomski razvijenije što je posljedica transformacije ekonomije iz ruralne u industrijsku, odnosno post-industrijsku ekonomiju. Paralelno s tom transformacijom dolazi i do promjena u mobilnosti ljudi s ne motoriziranog na motorizirani oblik transporta [1]. To omogućuje brže i jednostavnije, povezivanje ljudi, povećanje kvalitete života kroz olakšan pristup obrazovanju, zdravstvu, zaposlenju, kao i ostalim uslugama koje život čine ugodnijim. Isto tako, mobilnost roba i usluga omogućuje globalizaciju i pristup proizvodima i uslugama koje više nisu ograničene određenom geografskom lokacijom, što povećava konkurentnost i omogućuje daljnji ekonomski napredak. Zbog neosporne povezanosti razvoja društva i mobilnosti očekuje se daljnji porast potreba za transportom ljudi i roba, što je posebice značajno za zemlje u razvoju. Prema predviđanjima [2] osobna mobilnost izražena u prijeđenim putnikkilometrima trebala bi rasti prosječnom stopom od 1,6 % godišnje od 2000. do 2030. godine odnosno 1,7 % godišnje u razdoblju od 2000. do 2050. Slična su i predviđanja za transport roba gdje se u razdoblju od 2000. do 2030. godine očekuje porast od 2,5 % godišnje (slika 1.). Zbog toga se može očekivati i porast emisija ugljikovog dioksida (CO₂) kao izravne posljedice porasta transporta, odnosno utroška energije u transportu koji se danas gotovo u potpunosti bazira na motorima s unutarnjim izgaranjem (MSUI) i uporabi fosilnih goriva.



Slika 1. Predviđanja porasta mobilnosti ljudi i roba [2]

U 2012. godini udio transporta u ukupnoj emisiji stakleničkih plinova iznosio je oko 23 % [3], što ga uz energetski sektor svrstava u jednog od glavnih izvora emisija stakleničkih plinova. Te emisije većina znanstvenika smatra uzrokom globalnog zatopljenja. Da bi se smanjio utjecaj transporta na emisije stakleničkih plinova, prije svega CO₂, donesen je niz mjera. Na primjer Europska unija je donijela *Uredbu br. 443/2009 o utvrđivanju standardnih vrijednosti emisija za nove osobne automobile u okviru integriranog pristupa Zajednice smanjenju emisija CO*₂ *iz lakih vozila* [4] kojom se ograničava razina emisije CO₂ flote godišnje proizvedenih osobnih vozila, kao i ciljevi koje treba postići u budućnosti. Trenutno važeće i planirane vrijednosti emisija CO₂ u gramima po kilometru normalizirane na Novi europski vozni ciklus NEDC (engl. New European Driving Cycle) prikazane su slikom 2.



Slika 2. Smanjenje prosječne emisije CO_2 flote godišnje proizvedenih osobnih vozila [5]

Ovakvim ograničenjima koja se nameću proizvođačima vozila kroz zakonsku regulativu, posebno u zemljama Europske unije, nastoji se poticati prodaja vozila s nižom emisijom CO₂. Primjenom takvih mjera očekuje se da će na globalnoj razini prosječna potrošnja vozila opasti s 9,4 l/100 km u 2010. na 5,2 l/100 km u 2040. [6], [7], [8]. Pri tome će značajnu ulogu u smanjenju prosječne potrošnje goriva imati poboljšanja konvencionalnih motora s unutarnjim izgaranjem uvođenjem novih tehnologija kao što su potpuno varijabilni razvod ventila, napredni sustavi ubrizgavanja goriva, višestupanjsko prednabijanje ili električki pogonjeno prednabijanje. Dodatni napredak ostvariti će se primjenom hibridne tehnologije što će omogućiti oko 30 % nižu potrošnju goriva u odnosu na Ottove motore pa se procjenjuje da će

prodaja hibridnih osobnih vozila porasti s trenutnih 1 % na oko 50 % ukupno prodanih vozila u 2040. Utična hibridna vozila (engl. *Plug in Hybrid Vehicle – PHEV*) i potpuno električna vozila (engl. *Battery Electric Vehicle – BEV*) zbog visoke cijene tehnologije i ograničenja u dometu te zbog relativno dugog vremena punjenja električnih baterija vrlo teško će moći konkurirati konvencionalnim vozilima s motorima s unutarnjim izgaranjem odnosno s hibridnim pogonima pa se za njih predviđa vrlo skroman prodor na tržište s udjelom od samo 6-7 % ukupno prodanih vozila u 2040. [8].



Slika 3. Projekcije prodaje osobnih vozila ovisno o vrsti pogona [7]

Emisije stakleničkih plinova, odnosno emisije CO_2 , utječu dugoročno na globalne klimatske promjene. Međutim, znatno opasnije i štetnije po ljudsko zdravlje su lokalne emisije štetnih tvari iz MSUI koje djeluju na ograničenom području kao što su gradovi ili gusto naseljene regije s vrlo razvijenom prometnom infrastrukturom. Nepotpuno izgaranje goriva i/ili visoke temperature u cilindru motora uzrokuju emisije ugljik monoksida (CO), dušikovih oksida (NO_X), ugljikovodika (HC), krutih čestica (engl. *Particulate Matter – PM*) i čitav niz zasad zakonski neograničenih spojeva. Svakodnevna izloženost tim onečišćivačima povezana je s nizom akutnih oboljenja i kroničnih bolesti od kojih neke mogu uzrokovati preranu smrt. Da bi se zaštitilo zdravlje ljudi i održala odgovarajuća kvaliteta zraka, propisima su određene dopuštene razine emisija štetnih tvari iz motora s unutarnjim izgaranjem. Jedan od prvih takvih pravilnika donesen je šezdesetih godina prošlog stoljeća u Sjedinjenim Američkim Državama, dok se u Europi Direktivom 70/220/EEC iz 1970. godine po prvi puta propisuje dopuštena razina štetnih emisija CO i HC. Od 1992. godine pojedine razine dozvoljenih emisija štetnih tvari nose lako prepoznatljiv naziv *Euro*. Sve do 2006. godine tom direktivom i nizom amandmana propisana je razina emisije štetnih tvari za osobna i laka gospodarska vozila. Uvođenjem razine Euro 5 ova direktiva je zamijenjena *Uredbom br. 715/2007 o homologaciji tipa motornih vozila u odnosu na emisije iz lakih osobnih i gospodarskih vozila (Euro 5 i Euro 6) i pristupu podacima za popravke i održavanje vozila [9], koja je obvezujuća za sve zemlje članice Europske unije.*



Slika 4. Dopuštene razine emisije štetnih tvari iz motora s unutarnjim izgaranjem u Europskoj uniji za vozila kategorije M1 (putnički automobili) [10]

Dijagrami na slici 4. pokazuju da su od razdoblja prije 1992. godine do 2009. (Euro 5) emisije smanjene za preko 90 %. Euro 1 je stupio na snagu 1992. godine, a za oznaku maksimalno dozvoljene količine štetnih tvari prije stupanja na snagu Euro 1 norme u literaturi se obično primjenjuje oznaka *pred Euro* ili *Euro* 0. Razine Euro 0 dobivene su naknadnim ispitivanjem vozila i preračunavanjem na današnje standarde [10]. Ovim "Euro normama" ograničene su razine emisija CO, HC, NO_X, PM, a od uvođenja norme Euro 5b i broj krutih čestica (engl. *Particle Number – PN*), [#/km] izražen u broju čestica po prijeđenom putu. Premda je razina krutih čestica PM od uvođenja Euro normi bila ograničena samo na motore s kompresijskim paljenjem, od 2009. Ona se primjenjuje i na motore s vanjskim izvorom paljenja. Razlog tome bila je pojava Ottovih motora s izravnim ubrizgavanjem goriva i slojevitim punjenjem kod kojih, isto kao i kod Dieselovih motora s izravnim ubrizgavanjem, uslijed izgaranja goriva može doći do povećane emisije krutih čestica.

Uz takvu sve strožu zakonsku regulativu o emisijama štetnih tvari iz motora s unutarnjim izgaranjem i stalnu potrebu za povećanjem korisnosti i performansi motora, zahtjevi koji se postavljaju na suvremene motore teško će se moći zadovoljiti postojećim Ottovim i Dieselovim motorima. To je nagnalo istraživače da fokus svojih istraživanja usmjere na razvoj motora s takvim izgaranjem koje će u uporabi ponuditi efikasnost jednaku ili veću onoj Dieselova motora, ali uz niske ili niže emisije štetnih tvari od onih koje se postižu u Ottovim motorima. Spajanjem najboljih karakteristika Ottovog i Dieselovog motora razvijen je motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem – HCCI motor (engl. *HCCI – Homogenuos Charge Compression Ignition*). Za HCCI motor je karakteristično da je smjesa homogena kao kod Ottovog motora, a paljenje smjese je kompresijsko kao kod Dieselovog motora.

1.1. Pregled dosadašnjih istraživanja

Motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem, iako koncepcijski vrlo sličan postojećim motorima s unutarnjim izgaranjem, zbog potpuno različitog koncepta izgaranja omogućuje visoku korisnost motora u kombinaciji s niskim razinama emisija NO_X i krutih čestica. Detaljniji opis HCCI motora i njegovih karakteristika dan je u poglavlju 2. Prvi radovi o motorima s kontroliranim samozapaljenjem nastali su krajem 70-ih godina prošlog stoljeća u Japanu i od tada su HCCI motori zbog obećavajućih mogućnosti predmetom istraživanja mnogih istraživača diljem svijeta, što potvrđuje i znatan broj objavljenih radova, kako je pokazano u [11], [12], [13].

Uz eksperimentalna istraživanja, računalne simulacije i modeliranje procesa u motoru postali su nezaobilazni alat u razvoju motora s unutarnjim izgaranjem. One omogućuju razvoj motora u virtualnom okruženju, a to je posebno pogodno u fazi razvoja motora ili u istraživačkim aktivnostima. Validirani simulacijski model omogućuje analizu većeg broja parametara koji opisuju proces izgaranja, a koje ponekad eksperimentalno nije moguće ili je otežano odrediti. Isto tako, upotrebom simulacija uvelike se smanjuju potrebe za dugotrajnim laboratorijskim ispitivanjima što u konačnici dovodi do značajnog smanjenja troškova razvoja.

Ovisno o namjeni i vrsti simulacije za HCCI proces izgaranja koriste se numerički modeli različite razine složenosti, od bezdimenzijskih jednozonskih modela do računalno vrlo zahtjevnih trodimenzijskih modela računalne dinamike fluida tzv. 3-D CFD modela (engl. *Computational Fluid Dynamics – CFD*).

Najjednostavniji modeli su jednozonski bezdimenzijski kod kojih je u prostoru cilindra tj. prostoru izgaranja pretpostavljena jednolika raspodjela temperature, tlaka i sastava smjese [14]. Sva masa ima istu temperaturu, tlak i sastav. Kod jednozonskih modela [12], [15] cjelokupna masa u cilindru izgara istovremeno, zbog čega su simulacijom izračunati prirast tlaka, brzina oslobađanja topline i emisija NO_X veći nego stvarno izmjereni eksperimentom. Isto tako zbog takvog načina modeliranja uvjeta u cilindru jednozonskim bezdimenzijskim modelima ne mogu se dobro predvidjeti razine emisija CO i HC. Glavni razlozi za to su nepostojanje zone procjepa (engl. *crevice*), koja opisuje područje između klipa i cilindra iznad prvog klipnog prstena, za koje se smatra da je glavni izvor neizgorjelih ugljikovodika, te neuzimanje u obzir temperaturne raspodjele uz stijenke cilindra. To je potaklo razvoj modela koji bi mogli uključiti navedene pojave i realnije opisati stanje u cilindru – prostoru izgaranja.

Višezonski modeli, za razliku od jednozonskih, prostor izgaranja dijele na više zona kao što su zona procjepa i zona graničnog sloja, odnosno na zone u kojima je moguće zasebno definirati sastav i temperaturu. Time se može bolje opisati nehomogenost unutar cilindra kakva postoji u realnom motoru. Takvo realnije opisivanje stanja u cilindru omogućuje točnije predviđanje brzine oslobađanja topline, prirasta tlaka u cilindru, i razine emisija štetnih plinova. Glavni nedostaci višezonskih modela su povećanje vremena izračuna i određivanje početnih uvjeta u zonama modela. Vrijeme potrebno za izračun, odnosno zahtjev za većom računalnom snagom raste s povećanjem broja zona modela.

Određivanje početnih uvjeta je posebno bitno jer o njima ovisi kasniji tijek proračuna izgaranja u HCCI motoru. Za svaku zonu modela potrebno je odrediti početne uvjete kao što su temperatura, sastav, masa, udio recirkuliranih plinova, što predstavlja problem jer pogrešno definirani početni uvjeti mogu izazvati pogreške u daljnjem izračunu. Pregledom dostupne literature može se zaključiti da se za određivanje početnih uvjeta koriste tri pristupa: iskustveni, uporaba programskih paketa za simulaciju procesa u motoru i uporaba računalne dinamike fluida. Iskustvenim pristupom procjenjuju se uvjeti u pojedinoj zoni temeljem iskustvenih podataka i dostupnih eksperimentalnih rezultata. Takav pristup koristili su Easley et al. [15] i Komninos [16]. U drugom pristupu, upotrebom programskog paketa za simulaciju radnog ciklusa motora (engl. *engine full cycle simulation*), proračunom niskotlačnog dijela ciklusa tj. izmjene radne tvari, određuju se termodinamička svojstva i sastav smjese u trenutku zatvaranja usisnog ventila [17]. Slično tome u trećem pristupu se korištenjem CFD proračuna za simulaciju procesa izmjene radne tvari ili dijela kompresije mogu odrediti početni uvjeti koji se onda koriste u višezonskom modelu izgaranja [12].
Autori Easly et al. [15] su za proučavanje utjecaja određenih parametara na rad HCCI motora koristili jednozonske i višezonske modele. Proširivanjem jednozonskog modela razvijen je višezonski model s ciljem proučavanja utjecaja temperaturne slojevitosti i zone procjepa na izgaranje te emisije štetnih plinova HCCI motora. Prostor izgaranja je podijeljen na četiri različite vrste zona: zonu procjepa, zonu graničnog sloja (engl. Boundary Layer (BL) zone), zonu vanjskog sloja jezgre (engl. outer core zone) i zonu jezgre (engl. inner core zone) koja može biti podijeljena u više podzona. Iako je predloženi višezonski model zamišljen kao model s proizvoljnim brojem zona određenog sastava i temperature, zbog relativno dugog vremena izračuna, autori su koristili model sa 6 zona. Prva zona je zona procjepa koja je modelirana kao zona konstantne temperature, jednake temperaturi stijenke cilindra. Druga zona je zona graničnog sloja preko koje je modelirana izmjena topline sa stijenkom cilindra koristeći Woschnijev model [14] izmjene topline. Treća zona je zona vanjske jezgre, dok su preostale tri zone, zone unutarnje jezgre koje se smatraju adijabatskim jezgrama. Tri središnje adijabatske zone imaju konstantnu masu i ne mogu izmjenjivati masu s drugim zonama. Prilikom izgaranja te zone se šire i jedina interakcija s ostalim zonama je preko rada ekspanzije. U ostale tri zone moguća je izmjena mase između zona s time da masa uvijek mora proći kroz zonu graničnog sloja.

Komninos et al. [16], [18] razvili su višezonski model s tri vrste zona: središnjom, vanjskom i zonom procjepa. Uz zonu procjepa koja je određena kao udio u radnom volumenu, cilindar je podijeljen na proizvoljan broj vanjskih zona koje u obliku koncentričnih ljuski jednake debljine okružuju središnju zonu cilindričnog oblika. Zbog tako određene geometrije debljina vanjskih zona je konstantna tijekom ciklusa, a volumen zona se izračunava ovisno o debljini zone i položaju klipa, odnosno zakretu koljenastog vratila. Osim što zone međusobno mogu izmjenjivati masu, između zona je modelirana i izmjena topline slična kondukciji. Izmjena topline između rubne vanjske koncentrične ljuske i stijenke cilindra modelirana je Annandovim modelom [19]. Kasnijim poboljšavanjem cjelokupnog simulacijskog modela [20], Annandov model prijelaza topline na stijenku cilindra zamijenjen je novim modelom kako bi se smanjio broj kalibracijskih konstanti i poboljšalo podudaranje s eksperimentalnim rezultatima. U zoni procjepa izmjena topline sa stijenkom cilindra modelirana je tako da temperatura zone procjepa bude jednaka temperaturi stijenke cilindra. Takav način modeliranja zone procjepa onemogućava izgaranje u toj zoni, pa je promjena sastava unutar zone posljedica izmjene mase sa susjednom zonom. Izgaranje opisano kemijskim reakcijama za izooktan rješavano je korištenjem programskog paketa za kemijsku kinetiku CHEMKIN.

Model iste strukture kao i Easley et al. koristili su i Ogink i Golovitchev [21]. On se uz manje modifikacije mogao integrirati s kodom za kemijsku kinetiku SENKIN [22]. Kako bi odredili početne uvjete koji vladaju u cilindru prilikom zatvaranja usisnih ventila, višezonski model Oginka i Golovitcheva implementiran je u program za proračun radnog ciklusa motora AVL BOOST. Implementacija je izvedena na način da se AVL BOOST koristi za proces izmjene radne tvari, dok se u visokotlačnom dijelu procesa koristi kod SENKIN. Model Oginka i Golovitcheva za razliku od Easley et al. ima 9 zona. Zona procjepa modelirana je kao zona konstantnog volumena i konstantne temperature koja je jednaka temperaturi stijenke cilindra. Druga zona je zona graničnog sloja nazvana "quench layer" koja se nalazi uz stijenku cilindra i preko nje se izmjenjuje toplina između stijenki i radne tvari. Za prijelaz topline korišten je modificirani Woschnijev model, jer je istraživanje Fivelanda i Assanisa [23] pokazalo da u motorima sa siromašnom smjesom izvorni Woschnijev model predviđa prevelik prijelaz topline. Zona vanjskog sloja jezgre može izmjenjivati masu sa zonom graničnog sloja, dok ostalih šest zona jezgre imaju stalnu masu. Za izračunavanje stanja u zonama korišten je razdvojeni rješavač (engl. segregated solver) zbog znatno kraćeg vremena izračuna nego u slučaju istovremenog izračunavanja svih zona, ali je zbog toga nakon svakog vremenskog koraka potrebno provesti postupak izjednačavanja tlaka u svim zonama kako bi se dobio jedinstveni tlak u cilindru.

Višezonski model izgaranja u HCCI motoru integriran u programski paket AVL BOOST izradio je i Kozarac [24]. Njegov model izračunava visokotlačni dio procesa, a niskotlačni dio procesa – izmjena radne tvari – izračunava se programom AVL BOOST. Prostor izgaranja podijeljen je na šest geometrijski definiranih zona. Prva zona je zona procjepa i njen volumen je korisnički određen i konstantan tijekom izračuna. Sljedeće tri zone su zone graničnog sloja. Za razliku od većine modela koji prostor uz stijenku cilindra, glavu motora i čelo klipa modeliraju jednom rubnom zonom, ovaj model to čini zasebnim zonama. Posebnom rubnom zonom modelira se zona uz stijenku cilindra, a posebnim zonama u rubnoj zoni uz čelo klipa i glavu motora. Preostali volumen cilindra podijeljen je u dvije središnje zone jednakog volumena. Da bi se zadržala takva geometrija i jednak tlak u svim zonama, zone međusobno mogu izmjenjivati masu tijekom proračuna. Interakcija između zona modelirana je na način da zone međusobno osim mase, mogu izmjenjivati i toplinu i rad. U rubnim zonama prijelaz topline na stijenke cilindra izračunava se izrazom za konvektivni prijelaz topline pri čemu se koeficijent prijelaza topline može odrediti pomoću jednog od modela za osrednjeni koeficijent prijelaza topline (Woschni, Hohenberg, Chang) [14], [25], [26], [27]. Za izračun stanja u

zonama korištena je kemijska kinetika, a stanja u svim zonama izračunavaju se istovremeno. Takvim pristupom održava se relativno visoka razina točnosti tijekom proračuna, ali na račun dužeg trajanja proračuna.

Za razliku od modela Oginka i Golovitcheva te Kozarca koji su za simulaciju procesa u cijelom motoru koristili programski paket AVL BOOST, Xu et al. [28], [29] su višezonski model izgaranja u HCCI motoru integrirali u komercijalni paket za proračun radnog ciklusa motora Ricardo WAVE, dok je za proračun kemijske kinetike korišten programski paket CHEMKIN. Xu et al. višezonski model pretpostavljaju konstantnu masu u svim zonama, dakle nema izmjene mase između zona, kao ni izmjene topline, pa je jedina interakcija između zona izmjena rada. Izmjena topline sa stijenkom cilindra opisana je Woschnijevim modelom.

Princip određivanja početnih uvjeta korištenjem računalne dinamike fluida među prvima su primijenili Aceves et al. [30], [31], [32]. Njihov model za izračun procesa izgaranja nastao je spajanjem programa za računalnu dinamiku fluida KIVA 3V i višezonskog kvazidimenzijskog koda za kemijsku kinetiku. Pomoću CFD programskog paketa KIVA 3V proveden je proračun visokotlačnog dijela ciklusa bez izgaranja kako bi se odredila raspodjela temperature unutar cilindra. Tako dobivena temperaturna raspodjela koristi se u višezonskom modelu za kemijsku kinetiku. Korišten je model s 10 zona pri čemu je udio mase u pojedinoj zoni korisnički odabran prilikom postavljanja početnih uvjeta, a svakoj zoni dodijeljena je temperatura određena proračunom pomoću CFD KIVA 3V. Takav način izračuna temperature zona provodi se sve dok se ne postigne zapaljenje smjese, odnosno dođe do oslobađanja određene količine topline uslijed kemijskih reakcija. Nakon toga se temperatura pojedine zone izračunava programom za proračun kemijske kinetike. U svakoj zoni se provodi proračun izgaranja, a jedina interakcija među zonama je izmjena rada uslijed promjene volumena. Izmjena mase između zona kao i izmjena topline su zanemareni zbog relativno brzog izgaranja. Prijelaz topline na stijenku cilindra izračunava se Woschnijevim modelom. U kasnijim istraživanjima, za analizu utjecaja zone procjepa na izgaranje i formiranje emisije štetnih plinova iz HCCI motora, a s ciljem točnijeg izračuna emisije ugljikovog monoksida, 10-zonski model proširen je na model s 40 zona [33].

Prije opisan Komninosov model uz određene prilagodbe koristili su i Jia, Xie i Peng [34]. Njihov model definira zone kao Komninos et al., ali se prijelaz topline na stijenke cilindra modelira uporabom Changovog modela [27] za izmjenu topline, koji je prilagođen HCCI motoru. Za razliku od Komninosa, Jia, Xie i Peng za određivanje početnih uvjeta pojedine zone u trenutku zatvaranja usisnih ventila koriste prije spomenutu Acevesovu metodu računalne dinamike fluida. Takvim pristupom je model u kojem je određivanje početnih uvjeta u zonama bilo empirijsko povezan s računalnom dinamikom fluida.

1.2. Motivacija

Motivacija svakog znanstvenika za znanstveno istraživački rad zasigurno je stvaranje nečeg novog, inovativnog ili poboljšavanje nekog postojećeg rješenja. Motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem sam po sebi nije nov niti revolucionaran, ali je i dalje zanimljiv istraživačkoj zajednici kao potencijalni nasljednik postojećih Ottovih i Dieselovih motora.

Motivacija za ovo istraživanje proizlazi iz vlastitog interesa za istraživanja u području motora s unutarnjim izgaranjem, kao i dosadašnjeg rada i istraživanja provedenih na Katedri za motore i vozila, Fakulteta strojarstva i brodogradnje, Sveučilišta u Zagrebu. Znanstveno istraživački rad Katedre za motore i vozila usmjeren je na razvoj simulacijskih alata kako za motore s unutarnjim izgaranjem, tako i za cestovna motorna vozila. Znatan uspjeh polučen je u području simulacija motora s unutarnjim izgaranjem, razvojem nekoliko simulacijskih modela implementiranih u programski paket AVL BOOST. Jedan od njih je i šestzonski model izgaranja u HCCI motoru razvijen 2008. godine [35]. Kontinuiranom uporabom tog modela spoznala su se njegova ograničenja, ali i mogućnosti poboljšanja daljnjim razvojem.

Pregledom literature i analizom dostupnih istraživanja može se zaključiti da se postojeći funkcionalni modeli za simulaciju izgaranja u HCCI motoru razlikuju po: broju zona i načinu podjele prostora izgaranja na zone, međusobnoj interakciji između zona, modelima izmjene topline sa stijenkama i načinu izračuna stanja u zonama. Općeniti bi zaključak bio da je za kvalitetniji proračun procesa izgaranja i formiranja štetnih tvari u HCCI motoru nužno povećati broj zona modela. Nažalost, s povećanjem broja zona rastu i zahtjevi za računalnim resursima, kao i samo vrijeme izračuna. Ukoliko je vrijeme izračuna predugačko, tada model postaje neuporabljiv za parametarska ispitivanja odnosno intenzivna istraživanja. Kao jedno od rješenja nameće se uporaba razdvojenog rješavača stanja u zonama. Postojeći modeli koji koriste razdvojene rješavače zanemaruju u potpunosti izmjenu mase ili je ograničavaju na samo određene zone. Isto tako, izmjena topline između zona je zanemarena u većini modela. S druge strane, postoje modeli sa zajedničkim rješavačem stanja u zonama, koji uključuju interakciju između zona (izmjena mase, topline i rada), ali je zbog takvog zajedničkog rješavanja stanja u zonama broj zona u pravilu relativno malen.

Zbog toga bi daljnji razvoj modela HCCI motora bio usmjeren prema simulacijskom modelu HCCI motora koji će koristiti razdvojeno rješavanje stanja u zonama, ali će omogućiti potpunu interakciju između zona modela, broj zona će biti proizvoljan, a skratiti će se također vrijeme izračuna, što i jest cilj ovog istraživanja.

	Easly et al.	Komninos et al.	Ogink i Golovitchev	Kozarac	Xu	Jia, Xie, Peng	PREDLOŽENI MODEL
Broj zona modela	6	16	9	6	9	9	N zona
Izmjena mase između zona	Djelomično	DA	Djelomično	DA	NE	DA	DA
Izmjena topline između zona	Djelomično	DA	Djelomično	DA	NE	DA	DA
Izmjena topline sa stjenkama	Woschni	Annand	Woschni	Woschni, Hohenberg, Chang	Woschni	Chang	Woschni, Hohenberg, Chang
Zadavanje početnih uvjeta	Empirijsko	Empirijsko	Proračun radnog ciklusa	Proračun radnog ciklusa	Proračun radnog ciklusa	CFD	Proračun radnog ciklusa
Rješavač	Istovremeni	Istovremeni	Razdvojeni	Istovremeni	Istovremeni	Istovremeni	Razdvojeni

Tablica 1. Usporedba postojećih i predloženog višezonskih modela

1.3. Cilj i hipoteza istraživanja

Cilj istraživanja je daljnji razvoj i unapređenje višezonskog simulacijskog modela HCCI motora s integriranom kemijskom kinetikom.

Poboljšanja simulacijskog modela HCCI motora omogućit će se:

- razdvojenim rješavanjem stanja u zonama,
- povećanjem broja zona modela,
- dodavanjem zona koje nisu bile uključene u dosada razvijene modele, kao što je npr.
 zona procjepa u području brtve glave motora.

Uporabom razdvojenog rješavača stanja u zonama i povećanjem broja zona višezonskog simulacijskog modela HCCI motora s integriranom kemijskom kinetikom moguće je ostvariti brži i točniji izračun procesa izgaranja i formiranja štetnih tvari u HCCI motoru.

1.4. Metodologija i plan istraživanja

Za provjeru postavljene hipoteze izrađen je plan i metodologija istraživanja, a samo istraživanje podijeljeno je u nekoliko faza.

U **prvoj fazi** istraživanja detaljno će se proučiti rad motora s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem, trenutno stanje tehnike, specifičnosti procesa izgaranja te veličine koje utječu na proces izgaranja u HCCI motoru. Proširit će se znanje o fizikalnim i kemijskim

procesima koji se javljaju tijekom izgaranja u cilindru motora i kinetici kemijskih reakcija koja se primjenjuje u modeliranju procesa izgaranja motora s unutarnjim izgaranjem. Napravit će se pregled i usporedba dostupnih do sada korištenih višezonskih modela. Tijekom prve faze istraživanja potrebno je razmotriti mogućnosti podjele prostora izgaranja tj. cilindra motora na zone modela, odnosno treba razmotriti mogućnosti definiranja njihove geometrije, broja i vrsta zona. Poboljšanim modeliranjem zona može se postići točnije predviđanje stvaranja štetnih tvari tijekom procesa izgaranja. Obzirom da u cilindar ulazi homogena smjesa, a da je u simulacijskom modelu on podijeljen na određeni broj zona, potrebno je razmotriti način zadavanja odnosno definiranja početnih uvjeta u zonama modela kako bi se postigla određena nehomogenost sastava i temperature smjese unutar cilindra. Dobro definirani početni uvjeti preduvjet su daljnjeg pravilnog proračuna procesa izgaranja. Osim samog geometrijskog definiranja višezonskog modela, potrebno je istražiti i interakciju između zona modela. Prije svega misli se na izmjenu mase i energije između pojedinih zona, te mogućnosti njihovog modeliranja. Model izmjene mase i energije između zona znatno utječe na pravilno predviđanje emisije štetnih tvari posebice emisije ugljikovog monoksida. Pored analize izmjene topline između zona, važno je analizirati i modele prijelaza topline s radne tvari na stijenke cilindra.

Temeljem analiza provedenih u prvoj fazi istraživanja te korištenjem do sada stečenog znanja utvrdit će se utjecajni parametri na proces izgaranja HCCI motora iz čega će biti napravljene smjernice za unapređenje simulacijskog modela HCCI motora.

U **drugoj fazi** istraživanja temeljem smjernica određenih u prvoj fazi, izraditi će se numerički model za simulaciju procesa izgaranja u HCCI motoru.

Model će biti izrađen tako da zadovoljava sljedeće zahtjeve:

Proračun procesa izgaranja bit će modeliran uporabom kemijske kinetike s ciljem pravilnog predviđanja procesa izgaranja i emisija štetnih tvari u HCCI motoru, jer na proces izgaranja u HCCI motoru dominantan utjecaj imaju kemijske reakcije i brzina njihova odvijanja. Isto tako, za rješavanje stanja u zonama modela koristit će se razdvojeni rješavač. Razdvojeno rješavanje stanja u zonama znači da se proračun procesa izgaranja rješava zasebno za svaku zonu. Time se ubrzava vrijeme izračuna, što omogućuje povećanje broja zona modela ali uzrokuje pojavu nejednolikosti tlaka u zonama modela koji će nakon svakog koraka proračuna izgaranja trebati izjednačiti na jedinstveni tlak u cilindru motora. Zbog korištenja razdvojenog rješavača, kao i točnijeg predviđanja emisije štetnih tvari, model će omogućavati

izmjenu mase i energije između pojedinih zona modela. Prijelaz topline na stijenke cilindra bit će modeliran jednom od korelacija za modeliranje prijelaza topline u HCCI motorima. Zadavanje broja zona modela bit će proizvoljno, s time da će u model biti dodane zone koje nisu bile uključene u dosada razvijene modele, kao što je zona procjepa u području brtve glave motora. Tako izrađenim simulacijskim modelom i integracijom u programski paket AVL BOOST omogućit će se simulacija čitavog radnog ciklusa HCCI motora. (engl. *engine full cycle simulation*).

U **trećoj fazi** istraživanja provest će se validacija simulacijskog modela. Zbog kompleksnosti čitavog modela, tijekom izrade pojedini dijelovi modela kao što su izmjena mase i energije između zona modela, definiranje broja zona i zadavanje početnih uvjeta bit će zasebno validirani. Nakon provedene validacije pojedinih dijelova, validacija cijelog simulacijskog modela provest će se usporedbom rezultata proračuna s dostupnim rezultatima eksperimentalnih ispitivanja.

Četvrta faza istraživanja bit će podijeljena u dva dijela. U prvom dijelu ispitat će se primjenjivost razvijenog modela na novom konceptu motora, dok će se u drugom dijelu analizirati utjecaj broja zona na rezultate simulacija i potrebne računalne resurse. Sinteza tih rezultata omogućit će kritičko vrednovanje broja zona te odabir odgovarajućeg broja zona višezonskog modela za određenu točnost modela.

1.5. Struktura doktorskoga rada

Doktorski rad podijeljen je u sedam poglavlja.

U prvom poglavlju je, uz uvodni dio, naveden pregled dosadašnjih istraživanja u području simulacijskih modela HCCI motora. Opisana je motivacija i metodologija istraživanja, te ciljevi i hipoteza rada.

Drugim poglavljem opisan je motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem i karakteristike izgaranja u HCCI motoru. Navedene su prednosti i nedostaci HCCI motora, te je napravljena usporedba s postojećim Ottovim i Dieselovim motorima.

U sklopu trećeg poglavlja, opisana je primjena računalnih simulacija u razvoju suvremenih motora s unutarnjim izgaranjem te pregled modela koji se koriste za simulacije motora s unutarnjim izgaranjem s posebnim osvrtom na modele za HCCI motore. Izveden je opći jednozonski termodinamički model MSUI koji je osnova za izradu svih ostalih termodinamičkih modela.

Ukratko su navedeni modeli kemijske kinetike te termodinamička svojstva kemijskih spojeva. Kao zadnja cjelina trećeg poglavlja opisana je usporedba zajedničkog i razdvojenog rješavača sustava diferencijalnih jednadžbi stanja u zonama modela.

U četvrtom poglavlju opisan je model HCCI motora s razdvojenim rješavačem, kao i svi podmodeli potrebni za njegovo ispravno funkcioniranje. Opisan je podmodel za podjelu prostora izgaranja na zone. Izveden je i opisan podmodel za određivanje početnih uvjeta višezonskog modela. Opisan je podmodel za izmjenu topline sa stijenkama prostora izgaranja kao i izmjenu topline između zona modela. Da bi se mogao koristiti razdvojeni rješavač diferencijalnih jednadžbi stanja u zonama, razvijen je model za izjednačavanje tlaka u zonama na jedinstveni tlak cilindra, koji je detaljno opisan u sklopu četvrtog poglavlja.

Peto poglavlje sadrži verifikaciju modela u sklopu koje je razmotren utjecaj proračunskog koraka, utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona, utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke cilindra te utjecaj temperature i tlaka na ponašanje modela

U šestom poglavlju je pokazana validacija modela za različit broj zona i analizirani su rezultati izračunati simulacijskim modelom.

Sedmo poglavlje sadrži zaključak s opisom glavnih postignuća rada. Naveden je izvorni znanstveni doprinos i osvrt na mogući smjer daljnjih istraživanja.

2. HCCI motor – motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem

2.1. Povijesni pregled

Kao i mnoga velika otkrića, tako je i motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem nastao sasvim slučajno. Proučavajući stabilnost rada dvotaktnog Ottovog motora Onishi et al. [36] 1979. otkrili su da se kontroliranim samozapaljenjem može povećati stabilnost rada dvotaktnog motora. Zaključili su da je moguće kontrolirati zapaljenje siromašne smjese bez vanjskog izvora (svjećice) pri djelomičnom opterećenju motora uz istovremeno povećanje stabilnosti rada, smanjenje potrošnje goriva, buke i vibracija motora. Iste godine, Noguchi et al. [37] spektralnom analizom izgaranja u dvotaktnom motoru dokazuju da se zapaljenje smjese istovremeno događa na više mjesta u cilindru i da ne postoji fronta plamena kao kod motora s vanjskim izvorom paljenja. Kao jedan od prvih radova o četverotaktnim HCCI motorima spominje se rad Najta i Fostera [38] iz 1983. godine. Koristeći referentno gorivo (engl. Primary Reference Fuel) i zagrijavanje svježe radne smjese istraživali su uvjete samozapaljenja smjese u laboratorijskom motoru CFR (engl. Cooperative Fuels Research), pri čemu potvrđuju da i kod četverotaktnih HCCI motora izgaranje ovisi o kemijskoj kinetici. Kao svojevrsni nastavak na njihova istraživanja Thring [39] ispituje mogućnosti rada četverotaktnog HCCI motora pogonjenog benzinom u širem radnom području. Nakon niza provedenih ispitivanja u kojima su mijenjani parametri brzine vrtnje motora, temperature usisa, omjera goriva i zraka i količine recirkuliranih plinova, Thring zaključuje da se stabilan rad motora može postići samo u području djelomičnog opterećenja i nižih brzina vrtnje. U tim uvjetima izmjerena je specifična indicirana potrošnja goriva između 180 i 200 g/kWh, što je na razini Dieselovog motora s izravnim ubrizgavanjem goriva. Prvo ispitivanje HCCI izgaranja na višecilindarskom motoru napravili su Stockinger et al. 1992. godine. Preradom serijskog Volkswagenovog motora zapremnine 1,6 litara izradili su HCCI motor koji je stabilno radio u vrlo ograničenom području opterećenja i brzine vrtnje. Pri srednjem efektivnom tlaku od 5 bar, izmjerena je efektivna korisnost od 35 % [40]. Navedeni radovi okarakterizirali su izgaranje u HCCI motoru kao izgaranje koje istovremeno omogućuje postizanje visoke korisnosti uz zadržavanje niske emisije štetnih tvari čime su privukli pažnju istraživačke zajednice diljem svijeta te ih potakli da istraživanja u području motora usmjere upravo na motore s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem.

2.2. Izgaranje u HCCI motoru

Izgaranje u HCCI motoru značajno se razlikuje i od izgaranja u Ottovom i od izgaranja u Dieselovom motoru. U HCCI motoru homogena smjesa goriva, zraka i eventualno produkata izgaranja se komprimira sve dok ne dođe do pojave samozapaljenja koje se istovremeno javlja na više mjesta u cilindru, nakon čega smjesa u cilindru izgara kroz kontrolirane kemijske reakcije. Opis izgaranja u HCCI motoru prvi je predstavio Onishi et al. [36] uspoređujući idealizirani proces izgaranja u HCCI motoru s idealiziranim izgaranjem u Ottovom motoru, dok je Zhao u [11] prikazao usporedbu s Dieselovim motorom.



Slika 5. Prikaz oslobađanja topline Ottovog, HCCI i Dieselovog motora [11], [36]

Oslobađanje topline kod motora s vanjskim izvorom paljenja odvija se u fronti plamena (prikazana sivom bojom na slici 5.) koja se može predstaviti kao tanka reakcijska zona u kojoj se odvija izgaranje. Tijekom širenja kroz cilindar, od izvora zapaljenja, fronta plamena troši gorivo i dijeli smjesu u cilindru na izgorjelu i neizgorjelu.

Ukupna oslobođena toplina jednaka je energiji nastaloj napredovanjem fronte plamena od njenog iniciranja do njenog gašenja što se može izraziti kao:

$$Q = \int_0^N q \cdot \mathrm{d}m_\mathrm{i} \tag{2.1}$$

pri čemu je:

q – ogrjevna vrijednost smjese po jedinici mase, kJ/kg,

 dm_i – masa goriva koje izgori u fronti plamena, kg

N – broj reakcijskih zona.

U idealiziranom procesu izgaranja u motoru s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem reakcije izgaranja odvijaju se istovremeno u cilindru i tijekom izgaranja sva smjesa

u cilindru sudjeluje u procesu oslobađanju topline. Zbog toga je ukupna oslobođena toplina jednaka zbroju toplina dq_i oslobođenih uslijed svih reakcija izgaranja, smjese mase m u cilindru:

$$Q = \int_{1}^{K} m \cdot \mathrm{d}q_{\mathrm{i}} \tag{2.2}$$

pri čemu je:

m – masa smjese u cilindru, kg

 dq_i – toplina oslobođena uslijed i-te reakcije, kJ/kg,

K – ukupan broj reakcija oslobađanja topline.

Kod idealiziranog izgaranja u HCCI motoru oslobađanje topline se odvija jednoliko kroz cijelu smjesu, ali u realnom motoru zbog nehomogenosti sastava smjese ili nejednolike temperaturne distribucije to se ne može postići, pa proces oslobađanja topline neće biti jednolik, što je prikazano isprekidanom linijom na srednjoj slici 5.

U motoru s kompresijskim paljenjem i izravnim ubrizgavanjem goriva (desna slika 5.), oslobađanje topline može se podijeliti na dvije glavne faze. Odmah nakon ubrizgavanja goriva u cilindar i miješanja sa zrakom, uslijed kompresije dolazi do zapaljenja male količine smjese i nekontroliranog izgaranja. Većina topline oslobodi se tijekom drugog dijela izgaranja odnosno kontroliranog difuzijskog izgaranja.

Ukupna oslobođena toplina jednaka je:

$$Q = \int_{1}^{K} m_{\rm p} \cdot \mathrm{d}q_{i} + \int_{1}^{N} m_{j} \cdot \mathrm{d}q_{j}$$
(2.3)

pri čemu je:

 $m_{\rm p}$ – masa predmiješane smjese u cilindru, kg,

 dq_i – toplina oslobođena uslijed i-te reakcije, kJ/kg,

K – ukupan broj reakcija oslobađanja topline,

 m_j – masa smjese u cilindru koja izgara difuzijski, kg,

 dq_j – ogrjevna vrijednost smjese po jedinici mase, kJ/kg.

Prvi član u izrazu 2.3 predstavlja toplinu oslobođenu u fazi nekontroliranog izgaranja predmiješane smjese, a drugi izraz predstavlja toplinu oslobođenu kontroliranim difuzijskim izgaranjem tijekom kojeg udio oslobođene topline ovisi o lokalnom faktoru zraka.

2.3. Usporedba Ottovog, Dieselovog i HCCI motora

Osim po načinu izgaranja u kojem se bitno razlikuje od postojećih Ottovih i Dieselovih motora, motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem konstrukcijski je sličan postojećim Ottovim i Dieselovim motorima, ali da bi se moglo ostvariti izgaranje homogene smjese kompresijskim paljenjem postoje određene razlike. Istaknute karakteristike Ottovog, Diselovog i HCCI motora ilustrativno su prikazane slikom 6.



Dieselov motor Brizgaljka **HCCI** motor

Svjećica



Vruće područje plamena NO_X

Homogena smjesa



Izgaranje u fronti plamena





Vruće područje plamena NO_X i čestice čađe

Nehomogena smjesa



Difuzijsko izgaranje





Nisko temperaturno izgaranje: Niska emisija NO_X (< 1900 K)

Homogena smjesa



Istovremeno zapaljenje



Slika 6. Karakteristike pripreme smjese i izgaranja u Dieselovom, Ottovom i HCCI motoru

Suvremeni Ottov, Dieselov motor s izravnim ubrizgavanjem i HCCI motor s gledišta prednosti i nedostaka opisani su u nastavku teksta.

Ottov motor

Kod Ottovih motora smjesa goriva i zraka je predmiješana, a ovisno o načinu pripreme može biti homogena ili heterogena. Da bi se smjesa zapalila koristi se vanjski izvor - svjećica - pa se i početak izgaranja kontrolira trenutkom preskakanja iskre na svjećici. Tijekom izgaranja nastali produkti izgaranja ekspandiraju i komprimiraju još neizgorjelu smjesu, kojoj pri tome raste temperatura. Porastom temperature neizgorjele smjese povećava se vjerojatnost pojave njenog samozapaljenja i formiranja detonantnog izgaranja koje može uzrokovati značajna mehanička oštećenja motora. Da bi se spriječila mogućnost pojave detonacije, ograničava se kompresijski omjer ottovog motora ($\varepsilon_{\text{Otto}} = 8 \div 12$), čime je izravno ograničena i termička korisnost motora. Ottovi motori uglavnom rade s homogenom smjesom čijim izgaranjem nastaje zanemariva količina krutih čestica, ali zbog visoke temperature u području fronte plamena razina emisije NO_X je relativno visoka. Tijekom kompresije dio smjese ulazi u prostor procjepa zbog čega ne sudjeluje u izgaranju, a tijekom ekspanzije izlazi iz prostora procjepa uzrokujući pri tome povećane emisije HC i CO. Korištenjem trokompomenetnog katalizatora značajno se smanjuju razine emisija štetnih tvari iz Ottovih motora. Da bi katalizator mogao istovremeno oksidirati HC i CO te reducirati NO_x smjesa goriva i zraka mora biti stehiometrijska. Opterećenjem motora upravlja se promjenom količine svježe smjese u cilindru prigušivanjem usisavane struje zraka zaklopkom snage u usisnoj cijevi. Time se kod smanjivanja opterećenja povećava rad potreban za izmjenu radnog medija te se smanjuje korisnost u području djelomičnog i niskog opterećenja, što je i glavni nedostatak Ottovih motora.

Dieselov motor

Za razliku od Ottovog, kod Dieselovog motora s izravnim ubrizgavanjem smjesa nije predmiješana nego se formira tijekom procesa izgaranja. Dieselov motor usisava i komprimira zrak, a gorivo se pod visokim tlakom ubrizgava u cilindar na kraju takta kompresije. To omogućuje uporabu većih kompresijskih omjera ($\varepsilon_{\text{Diesel}} = 12 \div 18$) što povećava termičku korisnost motora. Izgaranje u Dieselovom motoru započinje neposredno nakon ubrizgavanja, uslijed samozapaljenja goriva, pri čemu se početkom izgaranja upravlja promjenom trenutka ubrizgavanja goriva u cilindar. Prilagođavanje motora opterećenju vrše se promjenom količine ubrizgavanoga goriva. Zbog vrlo kratkog vremena raspoloživog za formiranje smjese, smjesa u Dieselovom motoru uvijek je izrazito heterogena.

Izgaranje započinje u mlazu goriva gdje se vrući zrak u određenoj mjeri izmiješao s već isparenim gorivom čineći zapaljivu bogatu smjesu te dolazi do naglog oslobađanja topline i porasta tlaka. Nakon toga slijedi difuzijsko izgaranje, u kojem je brzina izgaranja kontrolirana difuzijom para goriva u okolni vrući zrak, a ne laminarnom brzinom izgaranja. Zbog izrazito nehomogenog sastava smjese u cilindru se javljaju područja difuzijskog plamena u kojemu vlada skoro stehiometrijski omjer goriva i zraka te područja oko jezgre ubrizganog mlaza goriva s izrazito bogatom smjesom. U području bogate smjese, zbog nedostatka kisika formiraju se krute čestice, dok uslijed visokih temperatura izgaranja od oko 2700 K [41] u području difuzijskog plamena dolazi do formiranja značajnih količina NO_X. Zbog takvog načina izgaranja Dieselov motor istovremeno ima izrazito visoku emisiju krutih čestica i NO_x što zahtijeva kompliciranu i relativno skupu naknadnu obradu ispušnih plinova kako bi se zadovoljili zahtjevi u pogledu dozvoljenih emisija štetnih tvari. Naknada obrada ispušnih plinova najčešće se sastoji od oksidacijskog katalizatora (engl. Diesel Oxidation Catalyst -DOC) za reduciranje štetne emisije CO, HC i čestica organskog porijekla (engl. Soluble Organic Fraction – SOF), katalizatora za selektivnu redukciju NO_X (engl. Selective Catalyst Reduction - SCR) i filtara čestica (engl. Diesel Particulate Filtar - DPF) za smanjenje emisije krutih čestica.



Slika 7. Područja emisija štetnih tvari i područja rada Ottovog, Dieselovog i HCCI motora [42]

Motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem

Motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem kombinira prednosti motora s vanjskim izvorom paljenja i motora s kompresijskim paljenjem. Izgaranje u HCCI motoru započinje samozapaljenjem predmiješane, u pravilu siromašne smjese goriva i zraka. Kao i kod motora s vanjskim paljenjem, smjesa je dobro izmiješana pa je razina krutih čestica relativno niska, a obzirom da je paljenje smjese kompresijsko, zadržava se visoka korisnost motora. Paljenje i izgaranje relativno siromašne smjese se kod HCCI motora istovremeno odvija na više mjesta unutar cilindra i nema klasične fronte plamena, što za posljedicu ima niže temperature izgaranja, a to uvelike smanjuje formiranje dušikovih oksida (NO_X). Do pojave samozapaljenja dolazi kada se u cilindru stvore povoljni termodinamički uvjeti tlaka, temperature i sastava smjese. Prema svim dosadašnjim istraživanjima takvo izgaranje određeno je kemijskim reakcijama, odnosno kemijskom kinetikom, što uvelike otežava kontroliranje početka izgaranja, a time i upravljanje radom motora. Tablicom 2. prikazana je usporedba Ottovog, Dieselovog i HCCI motora obzirom na najvažnije karakteristike, dok će u sljedećem potpoglavlju biti detaljno objašnjene prednosti HCCI motora u odnosu na postojeće Ottove i Dieselove motore.

Motor	Ottov	Dieselov s izravnim ubrizgavanjem goriva	HCCI	
Gorivo	Benzini	Dizelska gorivo	Fleksibilno	
Faktor zraka	≈ 1	$1,2 \div 2,2$	> 1,0	
Kompresijski omjer	8 ÷ 12	12 ÷ 18	14 ÷ 22	
Priprema smjese	vanjska ili unutarnja	unutarnja	unutarnja, vanjska, unutarnja+vanjska	
Zapaljenje smjese	vanjski izvor	kompresijsko	kompresijsko	
Oblik izgaranja	predmiješano	difuzijsko	kemijska kinetika	
Ograničenje brzine izgaranja	brzina rasprostiranja plamena	brzina miješanja	istovremeno ili spontano samozapaljenje	
Fronta plamena	postoji	postoji	ne postoji	
Temperatura izgaranja	visoka	djelomično visoka	relativno niska	
Korisnost	niska	visoka	visoka	
Glavne emisije štetnih tvari	NO _X , HC, CO	NO _X , PM	CO, HC	

Tablica 2. Karakteristike pojedinog tipa motora s unutarnjim izgaranjem

2.3.1. Prednosti HCCI motora

U usporedbi s postojećim Ottovim motorima, HCCI motori imaju veći stupanj korisnosti što je posljedica nekoliko različitih karakteristika. Kao prvo, kod motora s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem opterećenje se mijenja promjenom količine (mase) goriva. Oni dakle ne koriste zaklopku snage pa nema ni gubitaka uslijed prigušivanja usisa što je najveća prepreka u postizanju visoke korisnosti Ottovog motora pri radu s niskim opterećenjem. Postizanju visoke korisnosti pridonosi i primjena višeg kompresijskog omjera koji ima dominantan utjecaj na termičku korisnost motora, a čija je primjena kod Ottovog motora ograničena pojavom detonantnog izgaranja. Ukupnoj korisnosti pridonosi i niža temperatura izgaranja koja je posljedica rada sa siromašnom, razrijeđenom smjesom zbog čega su manji i toplinski gubici uslijed prijelaza topline na stijenke cilindra. Izgaranje u HCCI motoru je gotovo trenutno, pa se HCCI izgaranje približava idealnom Ottovom procesu, odnosno izgaranju pri konstantnom volumenu. To također doprinosi povećanju ukupne korisnosti HCCI motora. Istovremeno samozapaljenje smjese na više mjesta u cilindru motora omogućuje rad sa siromašnom smjesom što znači da nema karakteristične fronte plamena kao kod klasičnih Ottovih motora pa je razina emisija NO_x manja.

Kao što je već spomenuto Dieselov motor ispunjava zahtjev za visokom korisnošću motora, ali je ispunjenje zahtijevanih razina štetne emisije postalo vrlo kompleksno i skupo, jer zahtijeva dodatne sustave za naknadnu obradu ispušnih plinova. Nasuprot tome, motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem to ne zahtijeva, a istovremeno može postići korisnost sličnu ili jednaku Dieselovim motorima. Iz slike 7. može se zaključiti da je u procesu izgaranja Dieselovih motora gotovo nemoguće postići istovremeno niske emisije čestica i NO_X. Kod HCCI motora ne postoje lokalne zone s bogatom smjesom kao kod Dieselovog motora, već je smjesa homogena i siromašna. To omogućuje potpuno izgaranje goriva, pa je razina krutih čestica vrlo niska. Iako je paljenje smjese kompresijsko kao i kod Dieselovog motora, vršne temperature izgaranja su niže nego kod Dieselovog motora što omogućuje nisku emisiju NO_X. U odnosu na Diselove motore HCCI motori ne zahtijevaju relativno skupe sustave za naknadnu obradu ispušnih plinova kao što su DOC, DPF i SCR.

Dodatna prednost HCCI motora je i mogućnost pogona različitim gorivima. Zbog specifičnog načina izgaranja HCCI motor može biti pogonjen praktički svim klasičnim ili alternativnim gorivima pri čemu se uvjeti za potpuno izgaranje sa svim prednostima HCCI motora moraju omogućiti pravilnim upravljačkim strategijama ovisno o fizikalnim i kemijskim svojstvima goriva. Osim eksperimentalnih ispitivanja HCCI izgaranja s benzinskim i dizelskim gorivom,

proveden je i niz ispitivanja s alternativnim gorivima kao što su vodik, biodizel, etanol, dimetil eter ili njihovim mješavinama [43], [44], [45], [46]. Uz tekuća goriva, intenzivno je testirana i uporaba prirodnog plina [47] i bioplina [48] za koji se smatra da bi mogao biti posebno pogodan za proizvodnju električne energije.

Ako se HCCI motor promotri u svjetlu potencijala za smanjenje negativnog utjecaja motora s unutarnjim izgaranjem na globalno zatopljenje i emisiju CO₂, te se on usporedi s alternativnim pogonskim sustavima kao što su električni, hibridni ili sustav s gorivnim ćelijama, može se konstatirati da HCCI motor ne zahtijeva gotovo nikakve prilagodbe i može se primjenjivati u postojećim vozilima. Kako se u osnovi bitno ne razlikuje od postojećih motora, ovaj motor omogućuje korištenje istih ili sličnih komponenata koje se već primjenjuju, omogućuje zadržavanje relativno niskih troškova proizvodnje i jednostavnu implementaciju u postojeća vozila. Za razliku od električnog pogona koji zahtijeva punionice električnom energijom, ili gorivnih ćelija koje zahtijevaju spremnike vodika, HCCI motori koriste postojeću infrastrukturu za pohranu i transport energije što olakšava i omogućuje brz i jeftin prijelaz na novu tehnologiju.

2.3.2. Nedostaci HCCI motora

Uz sve navedene prednosti postoje i nedostaci HCCI motora koji usporavaju njegovu daljnju komercijalizaciju i implementaciju u vozila i druge strojeve.

Jednim od glavnih nedostataka smatra se nemogućnost izravne kontrole početka i duljine trajanja izgaranja. Za razliku od motora s vanjskim izvorom paljenja kod kojih se trenutkom početka izgaranja upravlja preskakanjem iskre na svjećici, ili motora s kompresijskim paljenjem kod kojih se trenutkom početka izgaranja upravlja trenutkom ubrizgavanja goriva u cilindar, kod HCCI motora izravna kontrola nažalost ne postoji. Početak izgaranja ovisi o samozapaljenju smjese, odnosno o uvjetima u cilindru koji to samozapaljenje omogućuju.

Samozapaljenje smjese goriva i zraka ovisi o fizikalno kemijskim svojstvima goriva i temperaturnoj povijesti kojoj je smjesa bila izložena. Zbog toga na početak i trajanje izgaranja utječu: sklonost goriva samozapaljenju, omjer goriva i zraka, homogenost smjese, udio zaostalih produkata izgaranja i njihova reaktivnost, kompresijski omjer, temperatura usisane smjese, latentna toplina isparavanja goriva, temperatura motora, izmjena topline odnosno toplinski gubici motora, brzina vrtnje.

Visoka emisija neizgorjelih ugljikovodika i ugljik monoksida posljedica je bježanja homogene smjese tijekom takta kompresije u prostor procjepa – prostor između klipa i stijenke cilindra iznad prve klipne karike. Temperatura u prostoru procjepa je preniska da bi došlo do samozapaljenja pa smjesa koja se nađe u tom prostoru ne sudjeluje u izgaranju. Tijekom takta ekspanzije ta neizgorjela smjesa vraća se iz procjepa u cilindar, ali zbog preniske temperature izgorjele smjese u cilindru, gorivo ne može oksidirati što dovodi do stvaranja visokih emisija HC i CO. Također, kod niskog opterećenja temperatura izgorjele smjese dodatno opada i onemogućuje potpunu oksidaciju CO u CO₂, što strmoglavo pogoršava koeficijent iskorištenja topline pri izgaranju.

Uz otežanu kontrolu procesa izgaranja bitna prepreka primjeni HCCI motora u vozilima su ograničeno radno područje motora i varijacije procesa izgaranja između cilindara kod motora s više cilindara [49]. Većina do sada ispitivanih eksperimentalnih motora radila je u području djelomičnog opterećenja motora. Proširenje radnog područja na visoko opterećenje otežano je jer izgaranje postaje vrlo intenzivno i s naglim oslobađanjem topline te samozapaljenjem smjese u različitim dijelovima cilindra istovremeno. To dovodi do velike brzine prirasta tlaka u cilindru popraćene visokofrekventnom bukom i eventualno neprihvatljivom razinom emisije NO_X. Takvo izgaranje može prijeći u nekontrolirano detonantno izgaranje i može izazvati mehanička oštećenja motora. S druge strane u području vrlo niskog opterećenja i praznog hoda uslijed niske energetske razine smjese u cilindru ne može doći do samozapaljenja, odnosno dolazi do pojave izostanka izgaranja, što u kombinaciji s niskim iskorištenjem topline pri izgaranju i povećanim emisijama štetnih tvari ograničava uporabljivost HCCI motora u području niskog opterećenja i praznog hoda. Isti problem niske energetske razine smjese dodatno je naglašen prilikom hladnog starta motora, koji je otežan ili gotovo onemogućen. Osim što je temperatura smjese preniska da bi došlo do samozapaljenja, uslijed hladnih stijenki cilindra rastu toplinski gubici, a to još više smanjuje temperaturu smjese i mogućnost njenog zapaljenja.

Da bi se u potpunosti mogle iskoristi prednosti HCCI motora upotrebom različitih goriva potrebno je omogućiti kvalitetnu pripremu homogene smjese goriva i zraka. Nedovoljno izmiješana smjesa ili ukapljivanje goriva u usisnoj cijevi ili na stijenkama cilindra onemogućuju potpuno iskorištenje goriva tj. smanjuju korisnost motora, povećavaju emisije neizgorjelih ugljikovodika i krutih čestica, a uzrokuju i razrjeđivanje motornog ulja. Homogenu smjesu posebno je teško postići s gorivima koja su slabo isparljiva (hlapljiva) kao što je dizelsko gorivo.

Nakon pregleda prednosti i nedostataka HCCI motora zaključuje se da mogućnosti koje pruža kroz nisku emisiju NO_x i krutih čestica uz istovremeno zadržavanje visoke korisnosti motora opravdavaju napore da se riješe nedostaci koji sprečavaju potpunu implementaciju i robusnost kakvu pružaju postojeći Ottovi i Dieselovi motori. Neke od nedostataka, poput visokih razina emisija HC i CO, već sad je moguće riješiti uporabom postojećih rješenja kao npr. oksidacijskih katalizatora. Za većinu ostalih nedostataka smatra se da će biti riješeni primjenom naprednih tehnologija poput potpuno varijabilnog razvodnog sustava, električki pogonjenog prednabijanja i naprednih upravljačkih jedinica koje će omogućiti upravljanje radom motora iz ciklusa u ciklus (engl. *model-based cycle-to-cycle combustion control*). Osim navedenih tehnologija, otklanjanju nedostataka može pridonijet i razvoj naprednih simulacijskih alata koji omogućuju razvoj motora u virtualnom okruženju.

3. Simulacijski modeli motora s unutarnjim izgaranjem

Uz eksperimentalna istraživanja, razvojem računalne tehnologije, numeričke simulacije i modeliranje procesa u motoru postaju nezaobilazan alat u razvoju, konstrukciji i optimiranju motora s unutarnjim izgaranjem. One omogućuju razvoj motora u virtualnom okruženju, što je posebno pogodno u ranoj fazi razvoja ili istraživačkim aktivnostima. Simulacijski modeli omogućuju analizu većeg broja parametara koji opisuju proces izgaranja, a koje ponekad eksperimentalno nije moguće ili je otežano odrediti. Upotreba simulacija omogućuje izoliranje i ispitivanje samo jednog određenog parametra, bez da se izravno ili neizravno utječe na druge. U eksperimentalnim istraživanjima to najčešće nije moguće, jer promjena jednog parametra najčešće utječe i na druge. Isto tako, vrlo je teško postići ili održavati ponovljivost mjerenja. Simulacijama se može skratiti (ubrzati) vrijeme razvoja, a smanjuju se i troškovi dugotrajnih ispitivanja motora na ispitnom stolu.



Slika 8. Shematski prikaz uporabe simulacija u procesu razvoja suvremenih motora s unutarnjim izgaranjem [50]

Slikom 8. prikazane su faze razvoja motora s unutarnjim izgaranjem. Sam proces razvoja može se podijeliti na tri glavne faze: inicijalni razvoj, konceptualni razvoj te glavni razvoj i validacija [50].

U prvoj inicijalnoj fazi razvoja definiraju se tehničke karakteristike koje MSUI mora zadovoljiti. U toj je fazi uporaba simulacija neophodna da bi se u kasnijim fazama razvoja i nakon proizvodnje prototipa mogli zadovoljiti traženi zahtjevi u pogledu zadovoljavanja razina emisija štetnih tvari i općenitih performansi kao što su potrošnja goriva i snaga motora, a da se pri tome zadrže određeni konstrukcijski zahtjevi poput radnog volumena motora, načina pripreme smjese, korištenja prednabijanja ili prikladnog sustava za naknadnu obradu ispušnih plinova, ili pak tehnološki i ekonomski zahtjevi. Već u konceptualnoj fazi razvoja, simulacijama motora i svih njegovih podsustava te modela vozila koje taj motor pogoni, može se analizirati cjelokupno ponašanje sklopa motor-vozilo. Na taj se način u određenom ispitnom ciklusu može procijeniti utjecaj različitih konfiguracija motora na cjelokupni sustav.

Tijekom druge faze (konceptualni razvoj), prvo se dimenzioniraju sustavi za izmjenu radne tvari. Za to se obično koriste jednostavni modeli izrađeni u inicijalnoj fazi u kojima se ključne komponente za izmjenu radnog medija dodatno proračunavaju i po potrebi detaljnije modeliraju. Rezultat simulacija jesu definirane dužine, presjeci i volumeni usisnog i ispušnog sustava te protoci kroz usisne i ispušne ventile. U drugoj se fazi isto tako simulacijskim modelima provjerava rad sustava za obradu ispušnih plinova, sustava za hlađenje ili podmazivanje. Poboljšani i u ovoj fazi dodatno razvijeni modeli mogu se već koristiti kao osnova za razvojna ispitivanja elektroničkih upravljačkih sklopova motora.

U zadnjoj fazi razvoja (glavni razvoj i validacija), iz podataka dobivenih u prethodnim fazama, definira se geometrija cjelokupnog motora i pojedinih kompomenata, usisnog i ispušnog sustava, prostora izgaranja. Tako definirana geometrija podloga je za 3-D CFD simulacijske modele koji se zajedno sa simulacijskim modelima radnog ciklusa motora (engl. *engine full cycle simulation*) koriste za optimiranje rada motora, izračune strujanja unutar cilindra ili pripremu smjese. Rubni uvjeti potrebni za 3-D CFD simulacijske modele, tlakovi na usisu i ispuhu, temperature na ulazu u cilindar ili temperature stijenki cilindra, dobivaju se iz simulacijskih modela proračuna izmjene radne tvari.

U sklopu te završne faze razvoja provode se i ispitivanja motora na ispitnom stolu. Sinergija simulacijskih modela i eksperimentalnih istraživanja skraćuje vrijeme ispitivanja jer se dio parametara za ispitne cikluse može preuzeti iz simulacija. Isto tako rezultati ispitivanja koriste

se u simulacijskim modelima za validaciju i dodatno poboljšavanje simulacijskih modela. Na taj način se relativno brzim simulacijama određuju novi parametri rada motora koji se opet mogu ispitati mjerenjima na motoru. Takvim zatvorenim ciklusom razmjene podataka između simulacija i eksperimentalnih istraživanja postiže se to da tzv. "virtualni motor" u obliku simulacijskog modela na kraju razvojnih istraživanja odgovara realnom motoru na kojem se provode mjerenja.

Prema Heywoodu [51] numeričke simulacije i modeliranje procesa u motorima omogućuju :

- a. *uvid u fizikalne i kemijske procese* koji se javljaju tijekom rada motora.
 - Uvid u kemijske procese tijekom izgaranja posebno je važan za proučavanje izgaranja u HCCI motorima kod kojih je to dominantna pojava, a koju često nije moguće istražiti eksperimentalno.
- b. analizu utjecaja radnih parametara motora (engl. engine operating parameters) na proces izgaranja, kao što su npr. zakašnjenje paljenja, trajanje izgaranja, formiranje emisija štetnih tvari.
- c. *analizu utjecaja procesa izgaranja na radne parametre motora* srednji indicirani tlak, specifična potrošnja goriva, temperatura ispuha, brzina turbopunjača, itd.
- d. *predviđanje osjetljivosti rada motora na različite upravljačke strategije*, što omogućuje optimiranje rada cijelog motora, ali i samo pojedinih komponenata
- e. u ubrzanom razvojnom ciklusu, koji od proizvođača motora ili komponenata zahtijeva održavanje trenda i stalnu inovativnost, simulacije omogućuju *ispitivanja novih ideja i konstrukcija* bez eksperimentalnih ispitivanja odnosno *bez da je potrebno fizički izraditi motor*.

Simulacijski modeli razvijeni za motore s unutarnjim izgaranjem prema [52], ovisno o fizikalnoj osnovi kojom se model opisuje, dijele se na termodinamičke modele i modele računalne dinamike fluida odnosno višedimenzijske CFD modele.

Osnova termodinamičkih modela je prvi glavni stavak termodinamike pri čemu se kod jednozonskih modela prostor izgaranja opisuje samo jednim kontrolnim volumenom, dok je kod višezonskih modela prostor izgaranja podijeljen na više kontrolnih volumena od kojih svaki ima jedinstvena termodinamička svojstva. Obzirom da termodinamički modeli uopće ne razmatraju strujanje radne tvari, nazivaju se još i bezdimenzijskim (engl. *zero-dimensional*) simulacijskim modelima.

CFD simulacijski modeli koriste se za analize kompleksnih problema koji zahtijevaju detaljnu prostornu diskretizaciju, kao što su strujanje radne tvari kroz ventile, ubrizgavanje goriva,

strujanje radne tvari unutar cilindra i stvaranje turbulencija. Jednodimenzijski (1-D) CFD modeli prvenstveno se koriste za izračun strujanja u usisnim i ispušnim cijevima, dok se kompleksniji sustavi najčešće opisuju trodimenzijskim (3-D) CFD modelima.

3.1. Simulacijski modeli za HCCI motore

Intenzivna istraživanja i znatan napredak u razumijevanju kemijskih procesa izgaranja rezultirali su razvojem naprednih modela kemijske kinetike i kemijskih mehanizama koji opisuju kemijske reakcije izgaranja goriva i stvaranja produkata izgaranja. Spajanjem tako razvijenih modela s već dokazanim simulacijskim modelima motora s unutarnjim izgaranjem stvara se simulacijski alat kojim se izgaranje u MSUI predviđa s visokom razinom točnosti i detalja [53]. Takve modele zahtijeva i izgaranje u HCCI motoru zbog dominantnog utjecaja kemijske kinetike, koja u HCCI motoru utječe na početak i daljnji tijek procesa izgaranja, brzinu oslobađanja topline i formiranje emisije štetnih tvari.

Spajanje, odnosno integracija modela kemijske kinetike u simulacijske modele MSUI, provodi se na način da se u simulacijskom modelu MSUI provode svi proračuni vezani uz simulaciju radnog ciklusa MSUI, dok se proračunima kemijske kinetike izračunavaju svi procesi vezani uz izgaranje kao što su promjena sastava ili energija oslobođena izgaranjem tj. kemijskim reakcijama.



Slika 9. Razine kompleksnosti simulacijskih modela u ovisnosti o proračunskom vremenu [54]

Utjecaj razine kompleksnosti simulacijskog modela na proračunsko vrijeme simulacije za jedan radni ciklus prikazan je slikom 9. 3-D CFD modeli omogućuju modeliranje s najvišom razinom detalja, ali isto tako zahtijevaju veliku računalnu snagu i dugačko vrijeme izračuna. U 0-D/1-D simulacijskim modelima razina kompleksnosti je nešto niža, ali je vrijeme izračuna bitno kraće pa oni za intenzivna istraživanja koja zahtijevaju velik broj simulacija mogu biti bitno prihvatljiviji nego kompleksni 3-D CFD modeli. 0-D/1-D simulacijski modeli s integriranom kemijskom kinetikom opisuju radni ciklus MSUI tako da se niskotlačni dio ciklusa modelira uporabom 1-D CFD modela za izračun strujanja u usisnim i ispušnim cijevima, dok se visokotlačni dio procesa modelira termodinamičkim 0-D modelom u kojem se za proračun izgaranja koristi kemijska kinetika. Ovisno o načinu podjele prostora izgaranja termodinamički model može biti jednozonski ili višezonski.

U nastavku teksta ukratko će biti opisani modeli koji se koriste za simulacije izgaranja u HCCI motoru.

Jednozonski simulacijski model

Jednozonski simulacijski modeli su termodinamički modeli koji se baziraju na zakonu održanja mase i zakonu održanja energije koji je opisan prvim glavnim stavkom termodinamike. Cilindar, odnosno prostor izgaranja, razmatra se kao jedan kontrolni volumen u kojem su sva termodinamička svojstva radnog medija homogena, odnosno sva masa unutar kontrolnog volumena ima istu temperaturu i isti sastav. Matematički opis jednozonskog termodinamičkog modela bazira se na sustavu običnih diferencijalnih jednadžbi u kojima je vrijeme ili kut zakreta koljenastog vratila jedina neovisna varijabla.

Ovi modeli su računalno najmanje zahtjevni pa se najčešće primjenjuju za predviđanje performansi motora u cijelom radnom području, kao i za ispitivanje utjecaja različitih upravljačkih strategija na rad motora. Jednozonski simulacijski modeli s dovoljnom točnošću mogu odrediti početak izgaranja, ali ne i duljinu trajanja izgaranja obzirom da cjelokupna masa radne tvari u cilindru izgara istovremeno. Iz istog razloga će i prirast tlaka, brzina oslobađanja topline i emisija NO_x dobiveni simulacijskim modelom biti nešto veći nego stvarno izmjereni eksperimentom. Razine emisija HC i CO značajno odstupaju od eksperimentalnih rezultata jer ovi modeli mogu obuhvatiti samo emisije HC i CO nastale uslijed nepotpunog izgaranja goriva, ali ne i one nastale uslijed različitih temperatura u pojedinim dijelovima cilindra.

Višezonski simulacijski model

Neki od navedenih nedostataka jednozonskih modela rješavaju se uporabom višezonskih modela, koji prostor izgaranja dijele u više zona odnosno kontrolnih volumena. Svaka od tih zona unutar svojih granica ima jedinstvena termodinamička svojstva, a zone se međusobno mogu razlikovati u nekom od termodinamičkih svojstava. Prvi glavni stavak termodinamike primjenjuje se na svaku od zona, a ovisno o kompleksnosti modela, interakcija između susjednih zona može uključivati međusobnu izmjenu topline, rada i mase.

Primjenom višezonskog modela i odgovarajućom podjelom prostora izgaranja na zone različitih temperatura, masa i različitih sastava realnije opisuje termodinamičko stanje kakvo vlada u cilindru motora. Na taj način se u proračun procesa izgaranja uključuje i utjecaj temperaturne slojevitosti i nejednolikosti sastava smjese što omogućuje kvalitetnije procjenjivanje duljine trajanja izgaranja, brzine oslobađanja topline, prirasta tlaka i emisije štetnih tvari. S povećanjem broja zona modela obično rastu i zahtjevi za računalnom snagom i vrijeme potrebno za izračun pa se optimalan broj zona može odrediti analizom osjetljivosti utjecaja broja zona na konvergenciju rješenja [46], [52].

Usporedni rezultati promjene tlaka u cilindru i brzine oslobađanja topline (engl. *Rate Of Heat Release – ROHR*) u ovisnosti o zakretu koljenastog vratila dobiveni jednozonskim modelom, višezonskim modelom i eksperimentalnim istraživanjima pokazani su slikom 10. Može se zaključiti da je primjenom višezonskog modela podudaranje rezultata simulacije s eksperimentalnim rezultatima bolje i s bitno manjim odstupanjima, posebno u slučaju brzine oslobađanja topline.



Slika 10. Usporedba rezultata jednozonskog i višezonskog simulacijskog modela s eksperimentalnim rezultatima [55]

Simulacijski model računalne dinamike fluida

Višedimenzijski modeli računalne dinamike fluida s integriranom kemijskom kinetikom predstavljaju najnaprednije simulacijske modele koji omogućuju detaljno opisivanje izgaranja u HCCI motoru. Prostor izgaranja diskretizira se razmjerno velikim brojem kontrolnih volumena (ćelija) koji čine mrežu modela. Na temelju matematičkog modela zasnovanog na Navier-Stokesovim jednadžbama i zadovoljavanjem zakona očuvanja energije, mase, količine gibanja i sastava na nivou pojedinačnog kontrolnog volumena i na nivou cijelog modela, može se izračunati profil turbulentnog strujanja radnog medija te modelirati izgaranje i formiranje emisija štetnih tvari. U svakom od kontrolnih volumena, osim strujanja radnog medija, CFD modelom izračunava se i temperaturna raspodjela dok se modelom kemijske kinetike izračunava promjena sastava i kemijskim procesima oslobođena energija. Takvom potpunom integracijom CFD modela i modela kemijske kinetike uz odgovarajuću prostornu diskretizaciju i detaljne kemijske mehanizme teoretski bi bilo moguće riješiti bilo koji problem izgaranja u motorima s unutarnjim izgaranjem.

U praktičnoj primjeni uporaba CFD modela s integriranom kemijskom kinetikom ograničena je zahtijevanom računalnom snagom i proračunskim vremenom, koje se nelinearno povećava s povećanjem broja kontrolnih volumena, kemijskih spojeva i reakcija. U radu [56] za analizu utjecaja trenutka ubrizgavanja i geometrije klipa na izgaranje u motoru s predmiješanom smjesom i kompresijskim paljenjem (engl. *Premixed Charge Compression Ignition – PCCI*) korišten je CFD model s integriranom kemijskom kinetikom. Mreža proračunskog modela sastoji se od 30.000 kontrolnih volumena, a za proračun izgaranja korišten je mehanizam za n-heptan sa 157 kemijskih spojeva i 1552 kemijske reakcije. Simuliran je samo visokotlačni dio procesa od zatvaranja usisnih ventila do otvaranja ispušnih ventila. Proračunsko vrijeme samo jednog ciklusa na računalu s procesorom brzine 3,0 GHz iznosilo je 25 dana. Tako dugačka proračunska vremena model čine praktički neupotrebljivim za intenzivna istraživanja ili parametarska ispitivanja pa opravdanost uporabe takvih modela može biti upitna. Kako se CFD modeli u simulacijama procesa izgaranja koriste uglavnom da bi se u simulacijski model mogao uključiti utjecaj turbulencije, u sljedećem poglavlju biti će opisano kako ona utječe na izgaranje u HCCI motoru.

3.1.1. Utjecaj turbulencije na HCCI izgaranje

Turbulencija ima značajan utjecaj na izgaranje u Ottovom i Dieselovom motoru, jer utječe na pripremu smjese i propagaciju plamena. Ispitivanje utjecaja turbulencije na izgaranje u HCCI motoru proveli su Aceves et al. [57] analizom rezultata eksperimentalnih istraživanja utjecaja geometrije prostora izgaranja na rad HCCI motora. U eksperimentalnim istraživanjima su za postizanje različite razine turbulencije u cilindru motora korišteni su klipovi različite geometrije: klip s kvadratnim udubljenjem u čelu klipa za visoku razinu turbulencije, klip s ravnim čelom za nisku razinu turbulencije. Za ispitivanje utjecaja turbulencije primijenjen je višezonski termodinamički simulacijski model s 40 zona koji se koristio u kombinaciji s CFD simulacijskim modelom. CFD model koristio se za određivanje temperaturne raspodjele unutar cilindra sve do trenutka pojave samozapaljenja, nakon čega se za proračun izgaranja koristio višezonski termodinamički simulacijski model. Primjenom takvog simulacijskog modela od trenutka kada započne izgaranje, turbulencija više nema utjecaja na izgaranje. Dobiveni simulacijski rezultati dovoljno dobro su se podudarali s eksperimentalnim rezultatima iz čega je zaključeno da jednom kad izgaranje započne, utjecaj turbulencije je praktički zanemariv.

Proučavanjem utjecaja turbulencije na izgaranje u HCCI motoru bavili su se i Kong et al. [58], [59]. U njihovoj analizi korišten je CFD simulacijski model s integriranom kemijskom kinetikom. Na taj način su se u simulaciju procesa izgaranja u HCCI motoru mogli uključiti i kemijska kinetika i turbulentno miješanje istovremeno. Uz analizu turbulencije promjenom oblika klipa napravljena je i analiza utjecaja turbulencije na izgaranje ovisno o načinu pripreme smjese i vrsti korištenog goriva. Zaključuju da je izravni utjecaj turbulencije na izgaranje uslijed turbulentnog miješanja manji što je smjesa bliže homogenoj, odnosno da je u homogenoj smjesi on bitno manji te da se dovoljno dobro predviđanje izgaranja može predvidjeti i korištenjem samo kemijske kinetike. U radu [59] isto kao i Aceves et al. pokazuju da turbulencija utječe na izmjenu topline sa stijenkama, a time i na temperaturnu raspodjelu unutar cilindra. U motoru s većom razinom turbulencije, veći je toplinski tok izmjene topline sa stijenkama, što uz jednak početak izgaranja produljuje trajanje izgaranja. Produljenje trajanja izgaranja uslijed veće turbulencije razmatrali su u analizi utjecaja turbulencije i vanjskog EGR-a na izgaranje u HCCI motoru i emisiju ispušnih plinova i Jimenez-Espadafor et al. [60]. Oni predlažu turbulenciju kao efikasan i relativno jeftin način kojim se može utjecati na oblik izgaranja u HCCI motoru.

Iz navedenih istraživanja može se zaključiti da kod HCCI motora uslijed vrlo brzog izgaranja u većini slučajeva turbulencija ima tek indirektan utjecaj na izgaranje. To se prije svega očituje kroz utjecaj turbulencije na izmjenu topline i temperaturnu raspodjelu unutar cilindra, što može utjecati na početak i duljinu trajanja izgaranja, ali jednom kad izgaranje započne utjecaj turbulencije iščezava.

3.2. Opći jednozonski bezdimenzijski simulacijski model MSUI

Opći jednozonski bezdimenzijski model predstavlja osnovu za izradu svih termodinamičkih simulacijskih modela radnog ciklusa motora s unutarnjim izgaranjem. Cilindar motora opisuje se kao nestacionarni otvoreni termodinamički sustav, kod kojeg prostor izgaranja (stijenke cilindra, glava i klip motora) predstavljaju granice sustava. Tijekom radnog ciklusa motora odvija se niz procesa uslijed kojih termodinamički sustav kroz svoje granice s okolišem može izmjenjivati masu i energiju. Izmjena mase obuhvaća masu koja u sustav ulazi kroz usisne ventile, masu koja izlazi kroz ispušne ventile, masu koja izlazi uslijed propuhivanja radne tvari uz klipne prstene, a kod motora s unutarnjom pripremom smjese, koji usisavaju zrak obuhvaća i masu goriva koja u sustav ulazi ubrizgavanjem. Energija koja prolazi kroz granicu sustava sastoji se od topline koja se oslobodi izgaranjem goriva, topline i rada koju radna tvar izmjenjuje s okolišem te entalpije koja zajedno s masom prelazi granicu sustava. Navedeni procesi utječu na promjenu stanja unutar granica sustava, kroz promjenu unutarnje energije odnosno mase.



Slika 11. Opći jednozonski simulacijski model motora s unutarnjim izgaranjem

Primjenom i kombiniranjem zakona održanja mase, zakona održanja energije i jednadžbe stanja idealnog plina opći jednozonski simulacijski model motora može se matematički opisati sustavom diferencijalnih jednadžbi s vremenom kao nezavisnom varijablom.

Zakon održanja mase primijenjen na model MSUI prema slici 11. može se zapisati kao:

$$\frac{\mathrm{d}m_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}m_{\mathrm{in}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}m_{\mathrm{out}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}m_{\mathrm{bb}}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}m_{\mathrm{f}}}{\mathrm{d}t}$$
(3.1)

gdje su:

$$\frac{dm_{c}}{dt} - vremenska promjena mase u cilindru,$$

$$\frac{dm_{in}}{dt} - maseni protok koji ulazi kroz granice sustava, usisne ventile,$$

$$\frac{dm_{out}}{dt} - maseni protok koji izlazi kroz granice sustava, ispušne ventile,$$

$$\frac{dm_{bb}}{dt} - maseni protok uslijed propuhivanja,$$

$$\frac{dm_{f}}{dt} - maseni protok goriva koje ulazi kroz granice sustava.$$

Promjena mase radnog medija unutar granica sustava u većem dijelu odvija se kroz izmjenu radnog medija tijekom niskotlačnog dijela procesa. Za vrijeme visokotlačnog dijela procesa ventili su zatvoreni, ali do izmjene mase može doći uslijed propuhivanja radne tvari uz klipne prstene. Izraz za maseni protok goriva koje ulazi kroz granice sustava $\frac{dm_f}{dt}$, opisuje promjenu mase goriva uslijed ubrizgavanja goriva u cilindar, a primjenjuje se samo kod motora s unutarnjom pripremom smjese. Kod motora s vanjskom pripremom smjese taj član izostaje, jer je masa goriva uključena u masu smjese koja ulazi u sustav.

Primjenom 1. glavnog stavka termodinamike na otvoreni nestacionarni sustav MSUI slijedi izraz koji opisuje promjenu energije sustava u ovisnosti o vremenu:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = -\frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}Q_{\mathrm{f}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}Q_{\mathrm{w}}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}m_{\mathrm{in}}}{\mathrm{d}t} \cdot h_{\mathrm{in}} - \frac{\mathrm{d}m_{\mathrm{out}}}{\mathrm{d}t} \cdot h_{\mathrm{out}} - \frac{\mathrm{d}m_{\mathrm{bb}}}{\mathrm{d}t} \cdot h_{\mathrm{out}}$$
(3.2)

gdje pojedini članovi predstavljaju vremensku promjenu:

 $\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t}$ – unutarnje energije u cilindru,

Uz navedene izraze zakona očuvanja mase i zakona očuvanja energije primjenjuje se i jednadžba stanja idealnog plina kojom je opisano stanje radne tvari u cilindru motora:

$$p_{\rm c} \cdot V_{\rm c} = m_{\rm c} \cdot R \cdot T_{\rm c} \tag{3.3}$$

gdje su:

 $p_{\rm c}$ – tlak u cilindru, Pa,

$$V_{\rm c}$$
 – volumen cilindra, m³,

$$R$$
 – individualna plinska konstanta, $\frac{J}{kg K}$

 $T_{\rm c}$ – temperatura u cilindru, K.

Diferenciranjem po vremenu slijedi:

$$p_{\rm c} \cdot \frac{\mathrm{d}V_{\rm c}}{\mathrm{d}t} + V_{\rm c} \cdot \frac{\mathrm{d}p_{\rm c}}{\mathrm{d}t} = m_{\rm c} \cdot R \cdot \frac{\mathrm{d}T_{\rm c}}{\mathrm{d}t} + m_{\rm c} \cdot T_{\rm c} \cdot \frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}t} + R \cdot T_{\rm c} \cdot \frac{\mathrm{d}m_{\rm c}}{\mathrm{d}t}$$
(3.4)

Navedene jednadžbe vrijede općenito za opis bilo kojeg dijela radnog ciklusa motora neovisno da li se radi o izmjeni radne tvari ili izgaranju. Ovisno o procesu koji se želi modelirati pojedini članovi sustava diferencijalnih jednadžbi jednaki su nuli. Broj nepoznanica sustava mnogo je veći od broja dostupnih jednadžbi pa da bi se sustav mogao riješiti potrebno je poznavati termodinamička svojstva tvari i izraze (podmodele) koji opisuju i izračunavaju pojedinu pojavu u MSUI: prijelaz topline na stijenke cilindra, toplinu oslobođenu izgaranjem goriva, gubitke uslijed propuhivanja. Primjenom tih podmodela i

definiranih rubnih uvjeta može se odrediti tlak odnosno temperatura na kraju svakog vremenskog perioda. Rezultati simulacije općeg termodinamičkog modela jesu profil tlaka i temperature u ovisnosti o vremenu, što se uz određenu brzinu vrtnje može izraziti i ovisno o zakretu koljenastog vratila. Tako dobiveni rezultati omogućuju analizu svih relevantnih termodinamičkih značajki motora kao što su rad dobiven gibanjem klipa, promjene unutarnje energije, toplina oslobođena izgaranjem goriva ili toplina izmijenjena sa stijenkama cilindra. U ovom radu opći termodinamički model bit će osnova za izradu simulacijskog modela izgaranja u HCCI motoru.

3.3. Termodinamička svojstva kemijskih spojeva

Da bi se mogle riješiti jednadžbe zakona održanja energije potrebno je poznavati termodinamička svojstva radne tvari kao što su specifični toplinski kapacitet ili entalpija. Za modeliranje izgaranja najčešće se koriste termodinamička svojstva zapisana u obliku NASA polinoma. Razvili su ih Zeleznik i Gordon 1962. godine u sklopu američke svemirske agencije NASA (engl. *National Aeronautics and Space Administration*) po kojoj su i nazvani. Do tada su se termodinamička svojstva uobičajeno zapisivala u tabličnom zapisu, a da bi se olakšalo izračunavanje termodinamičkih svojstava pomoću računala razvijen je zapis u obliku polinoma. Termodinamička svojstva nekog kemijskog spoja zapisana su u obliku polinoma 7. reda koji je primjenjiv za temperature do 6000 K, pri čemu je proračunska pogreška tako izračunatog termodinamička svojstva manja od 1 % pri najvišoj temperaturi [61]. Ovisno o temperaturi, za svaki kemijski spoj postoje dva seta koeficijenata polinoma (slika 12.). Prvi set koeficijenata koristi se za temperature od 1000 K do 6000 K, dok se drugi set koristi za temperature manje od 1000 K. Koeficijenti polinoma prilagođeni su tako da kod temperature od 1000 K i jedan i drugi set daju jednake vrijednosti određenog termodinamičkog svojstva.

Standardni molarni toplinski kapacitet C_{mp}^0 , $\frac{J}{\text{kmol K}}$ pri konstantnom tlaku jednak je:

$$\frac{C_{mp}^{0}}{R_{m}} = a_{1} + a_{2} \cdot T + a_{3} \cdot T^{2} + a_{4} \cdot T^{3} + a_{5} \cdot T^{4}$$
(3.5)

Standardna molarna entalpija H_m^0 , $\frac{\mathbf{J}}{\mathbf{k}\mathbf{mol}}$:

$$\frac{H_m^0}{R_m \cdot T} = a_1 + \frac{a_2 \cdot T}{2} + \frac{a_3 \cdot T^2}{3} + \frac{a_4 \cdot T^3}{4} + \frac{a_5 \cdot T^4}{5} + \frac{a_6}{T}$$
(3.6)

Standardna molarna entropija S_m^0 , $\frac{J}{\text{kmol K}}$:

$$\frac{S_m^0}{R_m} = a_1 \cdot \ln T + a_2 \cdot T + \frac{a_3 \cdot T^2}{2} + \frac{a_4 \cdot T^3}{3} + \frac{a_5 \cdot T^4}{4} + a_7$$
(3.7)

Standardna molarna Gibbsova slobodna energija G_m^0 , $\frac{J}{\text{kmol}}$:

$$\frac{G_m^0}{R_m \cdot T} = \frac{H_m^0}{R_m \cdot T} - \frac{S_m^0}{R_m} = a_1 \cdot (1 - \ln T) - \frac{a_2 \cdot T}{2} - \frac{a_3 \cdot T^2}{6} - \frac{a_4 \cdot T^3}{12} - \frac{a_5 \cdot T^4}{20} + \frac{a_6}{T} - a_7$$
(3.8)

U izrazima (3.5) do (3.8) pojedini članovi predstavljaju:

$$R_m$$
 – opća plinska konstanta, $\frac{J}{\text{kmol K}}$,

 $a_1 \div a_7$ – vrijednosti koeficijenata NASA polinoma,

Vrijednost ovako izračunate standardne molarne entalpije sadrži i standardnu entalpiju stvaranja razmatranog spoja.

$$H_m^0 = \Delta H_{f,29815}^0 + \int_{29815}^T C_{mp}^0 \cdot dT$$
(3.9)

Standardna entalpija stvaranja $\Delta H_{f,29815}^0$, $\frac{J}{kmol}$ definira se kao entalpija reakcije u kojoj

neka tvar nastaje od elemenata u standardnom stanju i pri standardnim uvjetima. Standardno stanje definirano je tlakom od 101.325 Pa, dok temperatura nije standardizirana, ali se najčešće računa s vrijednošću od 298,15 K (25 °C). Standardna entalpija stvaranja je za kemijske elemente dogovorno jednaka nuli. Poznavanjem podataka o entalpiji stvaranja reaktanata i entalpiji stvaranja produkata može se izračunati promjena entalpija bilo koje kemijske reakcije [62]. Tijekom izračuna procesa izgaranja često postoji potreba za izračunavanjem temperature radne tvari odnosno smjese iz poznate entalpije. Primjenom

NASA polinoma i neke od numeričkih metoda relativno jednostavno se iz poznate entalpije izračunava temperatura.

Slikom 12. prikazan je zapis koeficijenata NASA polinoma za CO₂ te promjena molarnog toplinskog kapaciteta pri konstantnom tlaku izračunata korištenjem NASA polinoma. Vrijednosti koeficijenata polinoma preuzeti su od *The Combustion Laboratory at the University of California, Berkeley* [63]. Plavom bojom označeni su koeficijenti koji se koriste za vrijednosti temperature manje od 1000 K, a zelenom bojom vrijednosti za temperature veće od 1000 K.



Slika 12. Promjena molarnog toplinskog kapaciteta CO₂ ovisno o temperaturi izračunata primjenom NASA polinomom

3.4. Kemijska kinetika

Procesom izgaranja u motoru s unutarnjim izgaranjem, kemijske reakcije goriva i zraka mijenjaju sastav smjese u prostoru izgaranja od reaktanata prije izgaranja do produkata nakon izgaranja. Da bi se ti kemijski procesi mogli simulirati računalima, koriste se modeli kemijske kinetike i kemijski mehanizmi koji opisuju kemijske reakcije izgaranja goriva i stvaranja

produkata izgaranja. Svaka reakcija u mehanizmu izgaranja opisuje pretvorbu jednog ili više reaktanata u jednog ili više produkata [64]. Takav zapis koristi se u modelima kemijske kinetike kojima se izračunavaju svi procesi vezani uz kemijske reakcije kao što su energija oslobođena izgaranjem ili promjena sastava smjese.

Za svaku kemijsku reakciju pa tako i reakciju oksidacije goriva može se napisati jednadžba kemijske ravnoteže. Primjerice reakcija ravnoteže u kojoj iz dva reaktanta nastaju dva produkta zapisuje se u obliku:

$$a \cdot A + b \cdot B \to c \cdot C + d \cdot D \tag{3.10}$$

gdje su:

a, *b*, *c*, *d* – stehiometrijski koeficijenti,

A, B, C, D – kemijski spojevi.

Iz jednadžbe ravnoteže neke kemijske reakcije može se zaključiti koliko je produkata ($C ext{ i } D$) nastalo iz reaktanata ($A ext{ i } B$), ali ne i kojom brzinom se ta reakcija dogodila. Brzinom odvijanja kemijskih reakcija i mehanizmima kojima se reakcije odvijaju bavi se kemijska kinetika [14], [35], [64], [65]. Brzinom reakcije opisuje se napredovanje kemijske reakcije s vremenom.

Brzina elementarne reakcije, u kojoj se pretvorba iz reaktanata u produkte odvija u jednom koraku, jednaka je promjeni koncentracije produkata ili reaktanata u jedinici vremena:

$$\omega_{\rm R} = -\frac{1}{a} \cdot \frac{\mathrm{d}c_{\rm A}}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{b} \cdot \frac{\mathrm{d}c_{\rm B}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{c} \cdot \frac{\mathrm{d}c_{\rm C}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{d} \cdot \frac{\mathrm{d}c_{\rm D}}{\mathrm{d}t}$$
(3.11)

gdje su:

$$\omega_{\rm R}$$
 - brzina kemijske reakcije, $\frac{\rm kmol}{\rm m^3 s}$,
 c_i - koncentracija kemijskog spoja *i*, $\frac{\rm kmol}{\rm m^3}$.

Kemijske reakcije obično se odvijaju u oba smjera odnosno istovremeno dolazi do pretvorbe reaktanata u produkte i obrnuto iz produkata natrag u reaktante. U tom slučaju izraz (3.11) prelazi u oblik:

$$a \cdot A + b \cdot B \leftrightarrow c \cdot C + d \cdot D \tag{3.12}$$

U takvim reakcijama kemijska ravnoteža predstavlja poseban slučaj u kojem se reakcije stvaranja produkata iz reaktanata i reakcije povratnog stvaranja reaktanata iz produkata odvijaju jednako brzo. U tom slučaju na makroskopskoj razini nema nikakvih promjena, ali se na molekularnoj razini reakcije cijelo vrijeme odvijaju u oba smjera.

Jednadžbu bilo koje kemijske reakcije možemo zapisati u općem obliku:

$$\sum_{i=1}^{N_{sp}} \nu_i' \cdot \chi_i \leftrightarrow \sum_{i=1}^{N_{sp}} \nu_i'' \cdot \chi_i$$
(3.13)

gdje su:

 v_i ' – stehiometrijski koeficijent reaktanta *i*,

 χ_i – kemijski spoj *i*,

 v_i " – stehiometrijski koeficijent produkta *i*.

Obzirom da se u takvim složenijim reakcijama, promjene odvijaju u oba smjera, brzina kemijske reakcije jednaka je:

$$\omega_{R} = k_{f} \cdot \prod_{i=1}^{N_{sp}} c_{i}^{\nu_{i}'} - k_{r} \cdot \prod_{i=1}^{N_{sp}} c_{i}^{\nu_{i}''}$$
(3.14)

gdje su:

 $k_{\rm f}$ – konstanta brzine kemijske reakcije prema naprijed (reaktanti \rightarrow produkti),

 $k_{\rm r}$ – konstanta brzine kemijske reakcije prema nazad (produkti \rightarrow reaktanti).

Konstanta brzine kemijske reakcije naziva se i specifična brzina kemijske reakcije, ovisi o temperaturi i izračunava se primjenom Arrheniusova izraza:

$$k = A \cdot T^b \cdot e^{\frac{-E_A}{R_m \cdot T}}$$
(3.15)

gdje su:

A – faktor učestalosti (faktor frekvencije),

b – temperaturni koeficijent,

$$E_{\rm A}$$
 – energija aktivacije, $\frac{\rm J}{\rm kmol}$.

Arrheniusov izraz povezuje konstantu brzine reakcije s temperaturom i pokazuje da konstanta brzine reakcije raste eksponencijalno s temperaturom što je dokazano mnogim eksperimentalnim istraživanjima. Prema tom izrazu molekule moraju dostići kritičnu vrijednost energije (E_A) prije nego li uopće mogu reagirati, a eksponencijalni faktor predstavlja udio molekula koje su postigle tu potrebnu energiju. Energija aktivacije predstavlja energetsku barijeru koju je potrebno savladati da se postigne aktivno (prijelazno) stanje odnosno da se reaktanti mogu pretvoriti u produkte.

Ukoliko su poznate vrijednosti energije aktivacije, faktora učestalosti za oba smjera reakcije, primjenom izraza (3.15) mogu se izračunati konstante brzine kemijske reakcije prema naprijed i prema nazad. Ako je poznata samo jedna konstanta brzine kemijske reakcije ili prema naprijed ili prema nazad, druga vrijednost konstante brzine reakcije može se izračunati primjenom konstante ravnoteže K_c koja je jednaka omjeru konstante brzine prema naprijed i konstante brzine prema nazad.

Poznavanjem brzina svih kemijskih reakcija nekog mehanizma, koji se sastoji od ukupno N_{reak} reakcija, može se izračunati brzina stvaranja pojedinog kemijskog spoja, koja se koristi za izračunavanje promjene sastava radne tvari i stanja u cilindru:

$$\dot{\omega}_{i} = \sum_{r=1}^{N_{\text{reak}}} (\upsilon_{i}^{"}{}_{r} - \upsilon_{i}^{'}{}_{r}) \cdot \omega_{\text{R},r}$$
(3.16)

gdje su:

$$\dot{\omega}_i$$
 – brzina stvaranja kemijskog spoja *i*, $\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3\text{s}}$

- v_i ", stehiometrijski koeficijent produkta *i* u reakciji *r*,
- $v_i'_r$ stehiometrijski koeficijent reaktanta *i* u reakciji *r*,

$$\omega_{\mathrm{R},r}$$
 – brzina kemijske reakcije r , $\frac{\mathrm{kmol}}{\mathrm{m}^3\mathrm{s}}$

Da bi se modeli kemijske kinetike mogli primijeniti u simulacijama izgaranja u HCCI motoru, moraju na odgovarajući način opisati kinetiku povezanu s pojavom samozapaljenja, izgaranjem i formiranjem emisija štetnih tvari u cijelom radnom području motora odnosno u cijelom spektru različitih tlakova, temperatura i sastava smjese koji se mogu pojaviti u radu HCCI motora. Prema Zheng et al. [66] ovisno o broju kemijskih spojeva i reakcija kojima je
mehanizam opisan, modeli se mogu podijeliti na: detaljne, koncentrirane, reducirane, skeletni i globalne.

Detaljni (engl. *detailed*) modeli kemijske kinetike za neki mehanizma teoretski bi trebali obuhvatiti sve moguće kemijske spojeve, zajedno sa svim mogućim elementarnim reakcijama koje se mogu javiti između spojeva mehanizma. Praktično se detaljnim mehanizmima obuhvaćaju sve one reakcije čija je brzina takva da ima utjecaj na ponašanje modela koji se mehanizmom opisuje. Glavna prednost detaljnih mehanizama je mogućnost primjene pri raznim veličinama tlakova, temperatura i sastava smjese, što omogućuje opisivanje svih pojava izgaranja samo jednim mehanizmom bez obzira da li se radi o niskotemperaturnom ili visokotemperaturnom izgaranju. Detaljnim modelima opisani su i međuspojevi koji se javljaju tijekom kemijskih reakcijama pa oni omogućuju modeliranje i izračun emisija štetnih tvari. Glavni nedostatak detaljnih modela je njihova kompleksnost i veliki zahtjevi u pogledu računalnih resursa i proračunskog vremena, što im ograničava uporabu, posebno ako se koriste u kombinaciji sa isto tako računalno zahtjevnim 3-D CFD modelima.

Koncentrirani (engl. *lumped*) modeli izvode se iz detaljnih modela spajanjem sličnih kemijskih spojeva u skupine koja se zamjenjuje jednim zajedničkim spojem za određenu skupinu. Takva metoda često se primjenjuje na molekule ugljikovodika dugačkih lanaca, jer tijekom njihove oksidacije nastaje velik broj međuspojeva koji imaju istu molarnu masu i sličnu strukturu koja se razlikuje samo u poziciji slobodnih radikala ili OH skupine. Obzirom na slična kemijska svojstva takvih međuspojeva može ih se zamijeniti odgovarajućim zajedničkim spojem. Na taj način se za primarne reakcije propagacije i primarne međuspojeve koriste pojednostavljeni opisi, dok manji spojevi opisuju svim elementarnim reakcijama kao i kod detaljnih modela. Takvim modelom obuhvaća se manje međusopjeva u odnosu na detaljne modele, ali se smanjuje i veličina modela što zahtijeva i manje računalne resurse.

Reducirani (engl. *reduced*) modeli isto tako su izvedenica detaljnih. Za razliku od detaljnih modela, sadrže samo najvažnije kemijske spojeve i s njima povezane kemijske reakcije, dok se drugi nevažni spojevi i reakcije zanemaruju. Uz zanemarivanje određenih spojeva, reducirani modeli često se izvode i na način da se u određenom mehanizmu detaljne kemijske kinetike međuspojevi zanemare. Reduciranje mehanizma na taj način može se primijeniti ako se pretpostavi da je brzina nastajanja nekog međuspoja gotovo jednaka brzini trošenja tog istog međuspoja pa je njegovo stvaranje jednako nuli. Reducirani mehanizmi razvijaju se posebno za određenu primjenu. Što je veća redukcija mehanizma, to je njegova primjena više ograničena.

Skeletni (engl. *skeletal*) modeli su jedni od najjednostavnijih modela, a sastoje se od nekoliko općih reakcija kojima se opisuje mehanizam izgaranja. Izvedeni su na način da se kemijski spojevi sličnih svojstava grupiraju i zamjenjuju općim (generičkim) kemijskim spojem. Reakcije između tih općih kemijskih spojeva izvedene su matematički, sustavom jednadžbi kojima se opisuje pojedina faza izgaranja goriva.

Najpoznatiji skeletni model, Shellov model opisuje izgaranje pomoću 8 reakcija između 5 općih spojeva. Skeletni model mora se za točno određenu namjenu podesiti prema eksperimentalnim rezultatima.

Globalni (engl. *global*) model za opisivanje mehanizma koristi samo nekoliko najbitnijih reaktanata i produkata u jednoj ili nekoliko glavnih reakcija. Na taj način sve elementarne reakcije opisane detaljnim modelima su svedene u jednu do dvije glavne reakcije, čije se brzine određuju eksperimentalno.



Slika 13. Vrste modela kemijske kinetike prikazane brojem kemijskih spojeva i kemijskih reakcija kojima se opisuje određeni mehanizam

Slikom 13. pokazana je podjela modela kemijske kinetike ovisno o broju kemijskih spojeva i reakcija kojima je određeni mehanizma opisan. Detaljni modeli zbog opsežnog opisa i obuhvaćanja što većeg broja kemijskih spojeva i reakcija obično sadrže na stotinjak kemijskih spojeva i na tisuće kemijskih reakcija. Koncentrirani modeli, iako reduciraju broj spojeva i reakcija kroz tehniku spajanja sličnih spojeva u jedan spoj, također mogu sadržavati preko

stotinjak spojeva i na tisuće kemijskih reakcija. Reducirani modeli nastaju redukcijom iz detaljnih modela i obično sadrže desetke kemijskih spojeva i stotinjak reakcija. Skeletni modeli obično opisuju mehanizam sa desetak spojeva i reakcija, dok globalni modeli sadrže manje od deset spojeva i reakcija, a često su opisani samo jednom glavnom reakcijom izgaranja.

Globalni i skeletni modeli dovoljni su za predviđanje trenutka početka izgaranja, ali za točniji opis kemijskih procesa i predviđanje emisija štetnih tvari nužno je koristiti detaljne ili na odgovarajući način reducirane mehanizme.

3.5. Zajednički i razdvojeni rješavač

Poznato je da se s povećanjem broja zona simulacijskog modela, uz istovremeno korištenje detaljne kemijske kinetike, značajno produžuje proračunsko vrijeme simulacije. Jedna od mogućnosti za ubrzanje proračuna je korištenje razdvojenog rješavača stanja u zonama.

Ako se izvod općeg jednozonskog bezdimenzijskog modela primjeni na višezonski model HCCI motora, primjenom zakona održanja mase, kemijskog sastava i energije, općenito se višezonski model može opisati sustavom običnih diferencijalnih jednadžbi [67]:

$$\frac{\mathrm{d}m_j}{\mathrm{d}t} = F_j^{(\mathrm{m})} \tag{3.17}$$

$$\frac{\mathrm{d}x_{i,j}}{\mathrm{d}t} = \frac{M_i \cdot \dot{\omega}_{i,j}}{\rho_j} + F_j^{(\mathrm{x})}$$
(3.18)

$$\frac{\mathrm{d}T_j}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\rho_j \cdot \bar{c}_{\mathrm{p},j}} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}p_\mathrm{c}}{\mathrm{d}t} - \sum_{i=1}^{N_\mathrm{sp}} \left(M_i \cdot \dot{\omega}_{i,j} \cdot h_{i,j}\right) - Q_{\mathrm{w},j}\right) + F_j^{(\mathrm{T})}$$
(3.19)

gdje pojedini članovi predstavljaju:

- m_j masa radne tvari u zoni j, kg,
- $x_{i,j}$ maseni udio kemijskog spoja *i* u zoni *j*,

$$M_i$$
 – molarna masa kemijskog spoja *i*, $\frac{\text{kg}}{\text{kmol}}$,

 $\dot{\omega}_{i,j}$ – brzina stvaranja kemijskog spoja *i* u zoni *j*, $\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3\text{s}}$,

$$\rho_j - \text{gustoća radne tvari u zoni } j, \frac{\text{kg}}{\text{m}^3},$$

 $\bar{c}_{p,j}$ – specifični toplinski kap. mješavine plinova pri konstantnom tlaku zone j, $\frac{J}{kgK}$,

$$h_{i,j}$$
 – specifična entalpija kemijskog spoja *i* u zoni *j*, $\frac{J}{kg}$,

 $Q_{w,j}$ – toplina izmijenjena između zone j i stijenki cilindra, J.

Izraz $F_j^{(x)}$ ovisno o jednadžbi u kojoj se koristi predstavlja transportni član odnosno veličinu izmjene mase, sastava ili energije između zone *j* i ostalih susjednih zona.

Tlak u svim zonama modela je jednak je jedinstvenom tlaku cilindra. Da bi se održala pretpostavka jednakosti tlaka primjenom jednadžbe stanja idealnog plina, nakon sređivanja, član koji opisuje promjenu tlaka s vremenom u izrazu 3.19 može se zapisati u obliku:

$$\frac{\mathrm{d}p_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}t} = \frac{R_{\mathrm{m}}}{V_{\mathrm{c}}} \cdot \left(\sum_{j=1}^{N_{z}} m_{j} \cdot T_{j} \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} \left(\frac{1}{M_{i}} \cdot \frac{\mathrm{d}x_{i,j}}{\mathrm{d}t} \right) + \sum_{j=1}^{N_{z}} m_{j} \cdot \frac{\mathrm{d}T_{j}}{\mathrm{d}t} \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{x_{i,j}}{M_{i}} \right) + \sum_{j=1}^{N_{z}} \frac{\mathrm{d}m_{j}}{\mathrm{d}t} \cdot T_{j} \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{x_{i,j}}{M_{i}} - \frac{1}{V_{\mathrm{c}}} \cdot \frac{\mathrm{d}V_{\mathrm{c}}}{\mathrm{d}t} \cdot \sum_{i=1}^{N_{sp}} \frac{x_{i,j}}{M_{i}} \right)$$
(3.20)

Upravo zbog te pretpostavke održanja jedinstvenog tlaka u zonama modela, zone su međusobno povezane. Čak i ako se zanemari interakcija između zona (izmjena mase ili topline), One ostaju međusobno povezane pa se prilikom izračuna stanja u zonama višezonskog modela korištenjem zajedničkog rješavača za potrebe izračuna kreira globalna matrica problema, koja se rješava za svaki proračunski korak. Globalna matrica sadrži sve nepoznanice svih zona modela pa red matrice raste s povećanjem broja zona modela u odnosu na red matrice jednozonskog modela [30]. Grafički prikaz procesa izračuna pokazan je slikom 14. lijevo. Ovakav način izračuna primjenjuje se za sve modele u kojima postoji intenzivna interakcija između zona i za koje je bitno da ta interakcija bude modelom opisana, kao što npr. je modeliranje turbulentnog izgaranja ili modeliranje propagacije fronte plamena. Zbog intenzivnog izgaranja u HCCI motorima, jednom kad izgaranje započne, turbulencija ima bitno manji utjecaj na izgaranje u odnosu na kemijsku kinetiku čiji je utjecaj dominantan. To znači da u proračun izgaranja u HCCI motoru, točnije u diferencijalne jednadžbe stanja u zonama može koristiti razdvojeni rješavač stanja u zonama.

Da bi se mogao primijeniti razdvojeni rješavač, zone višezonskog modela moraju biti razdvojene odnosno između zona ne smije postojati nikakva interakcija. Matematički se sustav diferencijalnih jednadžbi višezonskog modela može zapisati u obliku [67]:

$$\frac{\mathrm{d}m_j}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{3.21}$$

$$\frac{\mathrm{d}x_{i,j}}{\mathrm{d}t} = \frac{M_i \cdot \dot{\omega}_{i,j}}{\rho_j} \tag{3.22}$$

$$\frac{\mathrm{d}T_{j}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\rho_{j} \cdot \bar{c}_{\mathrm{p},j}} \cdot \left(p_{\mathrm{c}} \cdot \frac{\mathrm{d}V_{j}}{\mathrm{d}t} - \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sp}}} \left(M_{i} \cdot \dot{\omega}_{i,j} \cdot h_{i,j} \right) - Q_{\mathrm{w},j} \right)$$
(3.23)

Uporabom razdvojenog rješavača, stanje u svakoj od zona rješava se zasebno, neovisno o ostalim zonama. Takvim izračunom i izostankom interakcija između zona tijekom izračunavanja stanja u zonama za određeni vremenski korak, izračunati tlakovi u zonama nisu jednaki globalnom tlaku koji bi trebao vladati u cilindru motora. Zbog toga je nužno prije novog proračunskog koraka rezultate svih zona prilagoditi tj. preračunati tako da tlak svih zona bude jednak globalnom tlaku cilindra, što je grafički pokazano slikom 14. desno.



Slika 14. Usporedni prikaz računskih koraka zajedničkog i razdvojenog rješavača [30]

Iako na prvi pogled korištenje razdvojenog rješavača izgleda dugotrajnije jer se sustav diferencijalnih jednadžbi rješava za svaku zonu posebno i još je nakon toga potrebno provesti izjednačavanje tlaka, zbog jednostavnijih numeričkih operacija potrebnih za rješavanje takvog sustava to je ipak brže rješenje nego istovremeno rješavanje stanja svih zona.

Sustavi diferencijalnih jednadžbi koji opisuju višezonske modele rješavaju se nekim od brojnih numeričkih rješavača odnosno algoritama za rješavanje običnih diferencijalnih jednadžbi (engl. *Ordinary Differential Equation Solver*) koji za rješavanje sustava koriste Jakobijevu matricu. Veličina Jakobijeve matrice $[M_J \times M_J]$ jednaka je broju nepoznanica problema koji se rješava, a utrošak računalnog vremena odnosno broj matematičkih operacija potrebnih za faktorizaciju matrice proporcionalan je M_J^3 [68]. Tablicom 3. prikazana je usporedba zajedničkog i razdvojenog rješavača. Radi lakše usporedbe zajedničkog i razdvojenog rješavača izmjena mase između zona nije uključena ni u model koji koristi zajednički rješavač. To znači da je izraz (3.17) jednak nuli pa se broj nepoznanica modela sa zajedničkim rješavačem sa $N_z \times (N_{sp}+2)$ nepoznanica smanjuje na $N_z \times (N_{sp}+1)$. Korištenjem razdvojenog rješavača broj potrebnih operacija manji je za N_z^2 puta. Osim što je broj operacija manji, kod korištenja razdvojenog rješavača, Jakobijeva matrica je čisto pojasna matrica s elementima raspoređenim oko dijagonale matrice, dok kod modela koji koriste zajednički rješavač i kod kojeg su zone međusobno povezane zbog uniformnosti tlaka Jakobijeva matrica sadrži i ostale elemente, što može produžiti vrijeme izračuna matrice.

Rješavač	Zajednički	Razdvojeni
Broj diferencijalnih jednadžbi	$N_{\rm z} \times (N_{\rm sp}+1)$	$N_{\rm z} \times (N_{\rm sp} + 1)$
Jakobijeva matrica [M×M]	$M_{\rm J} = N_{\rm z} \times (N_{\rm sp} + 1)$	$M_{\rm J} = (N_{\rm sp} + 1)$
Trošak računalnog učina (engl. <i>Computational cost</i>) M ³	$M_{\rm J}^{3} = (N_{\rm z} \times (N_{\rm sp} + 1))^{3}$	$M_{\rm J}^{3} = N_{\rm z} \times (N_{\rm sp} + 1)^{3}$

Tablica 3. Usporedba zajedničkog i razdvojenog rješavača

Razdvojeni rješavač za HCCI model izgaranja među prvima su upotrijebili Aceves et al. [30]. U radu su usporedili rješavače na primjeru 10 zonskog modela i usporedili ih s jednozonskim modelom. Kada su koristili razdvojeni rješavač vrijeme proračuna bilo je 10 puta duže od jednozonskog modela, ali kada su primijenili zajednički rješavač vrijeme izračuna 10 zonskog modela bilo je 100 puta duže od jednozonskog modela, pa zaključuju da je primjenom razdvojenog rješavača vrijeme smanjeno 10 puta. Osim analize ubrzanja izračuna, Aceves et al. predlažu korištenje paralelnog računanja na više računala istovremeno. Razdvojeni rješavač to omogućuje jer se svaka zona izračunava zasebno, a teoretski bi to omogućilo brzine rješavanja jednake jednozonskom modelu ukoliko bi na raspolaganju imali broj procesora jednak broju zona. Razdvojeni rješavač za izračun izgaranja u HCCI motoru koristio je i Viskahamoorthy [69]. U svom radu prikazo je usporedbu vremena izračuna izgaranja u HCCI motoru primjenom zajedničkog i razdvojenog rješavača. Korišten je 10 zonski model u kojem je interakcija između zona uključivala izmjenu topline i rada, ali ne i izmjenu mase. U analizi su primijenjena 3 različita goriva s odgovarajućim mehanizmima kemijske kinetike, a svi proračun provedeni su na računalu s procesorom Intel i7 s 4 jezgre. Ovisno o korištenom mehanizmu ubrzanje izračuna bilo je između 1,9 i 2,5 puta, a vremena izračuna i korišteni mehanizmi prikazani su slikom 15.

Značajnija ušteda vremena korištenjem razdvojenog rješavača pokazao je Kongsereeparp u [70]. U njegovom radu je korišten višezonski model s razdvojenim rješavačem. Izmjena mase između zona nije modelirana, ali zone mogu izmjenjivati rad i toplinu. Utjecaj na brzinu izračuna ispitivan je za dva različita goriva, prirodni plin i n-heptan. Rezultati su pokazani slikom 16., a ubrzanje u odnosu na zajednički rješavač je između 4,6 i 6,7 puta.



Slika 15. Usporedba brzine izračuna razdvojenog i zajedničkog rješavača Viskahamoorthy, [48]



Slika 16. Usporedba brzine izračuna razdvojenog i zajedničkog rješavača, Kongsereeparp, [70]

Iz sva tri primjera primjene razdvojenog rješavača teško se može egzaktno zaključiti kolika je ušteda u proračunskom vremenu zbog primjene razdvojenog rješavača, ali je ona evidentna i značajna. Za točniju ocjenu bi trebalo detaljnije analizirati svaki od modela. Osim o računalu i procesorskoj snazi, vremena izračuna sigurno ovise i o korištenim modelima kemijske kinetike, korištenom višezonskom modelu, kao i rješavaču sustava diferencijalnih jednadžbi. Općenito se može zaključiti da je primjena razdvojenog rješavača opravdana pa se on koristi i u ovom istraživanju odnosno disertaciji. Osim primjene razdvojenog rješavača značajne uštede u vremenu izračuna postižu se korištenjem naprednih integracijskih strategija prilagođenih rješavanju problema kemijske kinetike [71], [72] ali zahtijevaju izmjene i prilagodbu rješavača sustava diferencijalnih jednadžbi.

4. Višezonski simulacijski model HCCI motora

Cilj razvoja svakog simulacijskog modela motora s unutarnjim izgaranjem je omogućiti što vjernije opisivanje svih procesa koji se odvijaju u stvarnom motoru. Tako razvijeni simulacijski modeli postaju nezaobilazan alat u cjelokupnom razvoju motora, od konceptualnog dizajna i ranih faza razvoja pa sve do detaljnih istraživanja i razvojne podrške serijskim motorima.

Da bi se omogućio uvid u fizikalne i kemijske procese koji se odvijaju tijekom izgaranja u HCCI motoru, simulacijski model mora omogućiti što vjernije opisivanje procesa koji se u motoru odvijaju, a ne samo procesa izgaranja. Na sam proces izgaranja, koji je dio visokotlačnog dijela ciklusa, utječu uvjeti koji vladaju u cilindru u trenutku zatvaranja usisnih ventila, a definirani su veličinama kao što su tlak i srednja temperatura smjese u cilindru, sastav smjese i udio zaostalih produkata izgaranja. Na te uvjete utječe i niskotlačni dio procesa odnosno izmjena radne tvari. To posebno dolazi do izražaja kod višecilindričnih motora kod kojih u dinamici plinova u pojedinim usisnim i ispušnim cijevima postoji interakcija koja značajno utječe na proces izmjene radne tvari pojedinog cilindra. Kako je tema ovog istraživanja primarno usmjerena na proces izgaranja u HCCI motoru, koji se odvija tijekom visokotlačnog dijela ciklusa, višezonski simulacijski model HCCI motora integriran je u programski paket za simulaciju radnog ciklusa motora s unutarnjim izgaranjem AVL BOOST, koji kombinacijom 1-D i 0-D proračuna omogućuje izračunavanje procesa koji se odvijaju u radnom ciklusu MSUI. Niskotlačni dio procesa, odnosno izmjena radne tvari izračunava se 1-D proračunima strujanja u usisnim i ispušnim cijevima, dok se 0-D proračunima izračunava visokotlačni dio procesa.

Slikom 17. shematski je pokazana integracija višezonskog simulacijskog modela HCCI motora i pripadajućih podmodela u programski paket AVL BOOST. Višezonski simulacijski model HCCI motora, osim modela izgaranja, sastoji se još od nekoliko podmodela kojima se opisuju pojedine pojave u simulacijskom modelu. Podmodelom za podjelu prostora izgaranja, ovisno o korisnički odabranom broju zona, određuje se raspodjela prostora izgaranja na zone modela te se izračunavaju volumeni zona ovisno o zakretu KV. Nakon što je prostor izgaranja podijeljen na određen broj zona podmodelom za određivanje početnih uvjeta zadaju se početni uvjeti u svakoj od zona modela na temelju vrijednosti tlaka, temperature, sastava smjese u trenutku zatvaranja usisnih ventila, izračunatih tijekom niskotlačnog dijela procesa.

Primjenom podmodela za izmjenu topline izračunava se izmjena topline između zona modela te izmjena topline između plinova u prostoru izgaranja i stijenki cilindra. Zbog primjene razdvojenog rješavača diferencijalnih jednadžbi stanja u zonama, nakon svakog proračunskog koraka potrebno je izjednačiti tlak u zonama modela na jedinstveni tlak u cilindru za što se koristi podmodel za izjednačavanje tlaka u zonama.



Slika 17. Shematski prikaz integracije višezonskog modela HCCI motora u programski paket AVL BOOST

Slikom 18. pokazan je profil tlaka u cilindru tijekom proračuna HCCI motora korištenjem programskog paketa AVL BOOST. Proračun se sastoji od 10 radnih ciklusa, od kojih se prvih sedam izračunava jednozonskim modelom, dok se zadnja tri ciklusa izračunavaju primjenom višezonskog modela. Broj radnih ciklusa potrebnih za proračun modela mora biti takav da osigura pouzdanu konvergenciju rješenja. U ovom slučaju sedam jednozonskih ciklusa je dovoljno da se osigura konvergencija rješenja niskotlačnog dijela te tri ciklusa višezonskog modela za konvergenciju rješenja visokotlačnog dijela procesa. Obzirom da proračun u programskom paketu AVL BOOST započinje otvaranjem ispušnih ventila [73] u prvom ciklusu sve do otvaranja ispušnih ventila tlak je jednak zadanoj inicijalnoj vrijednosti tlaka, što se na slici 18. vidi kao konstantna vrijednost tlaka jednaka 0,4 MPa. Nakon što započne proračun, niskotlačni dio procesa izračunava se 1-D proračunom strujanja radne tvari u usisnom i ispušnom sustavu. Rješenja proračuna niskotlačnog dijela procesa između ostalog su tlak, temperatura, sastav smjese te udio zaostalih produkata izgaranja u trenutku zatvaranja usisnih ventila, koji se koriste kao početni uvjeti za daljnji proračun višezonskim modelom.

Kako se on provodi samo tijekom visokotlačnog dijela ciklusa, on započinje u trenutku zatvaranja usisnih ventila i traje sve do otvaranja ispušnih ventila. Nakon što se postigne konvergencija rješenja u svim elementima simulacijskog modela, zadnji radni ciklus smatra se rješenjem simulacijskog modela.

U nastavku poglavlja bit će opisan jednozonski model HCCI motora koji se koristi tijekom izračuna niskotlačnog dijela procesa, kao i detaljni svakog od podmodela korištenih u višezonskom simulacijskom modelu.



Slika 18. Profil tlaka u cilindru tijekom 10 ciklusa proračuna višezonskog modela HCCI motora

4.1. Jednozonski model HCCI motora

Primjenom općeg jednozonskog modela (pokazan lijevo na slici 19.) opisanog u poglavlju 3.2. izvodi se formulacija jednozonskog modela izgaranja u HCCI motoru (desno na slici 19.), a koji se koristi tijekom izračuna visokotlačnog dijela ciklusa jednozonskim modelom.

Predloženi model implementiran je u programski paket AVL BOOST pomoću kojeg se izračunava niskotlačni dio procesa i početni uvjeti stanja u cilindru za višezonski model. Tijekom tih izračuna jednozonskim HCCI modelom opisan je visokotlačni dio procesa radnog ciklusa motora. Obzirom da izgaranje u HCCI motoru traje vrlo kratko može se zanemariti utjecaj propuhivanja pa se otvoreni termodinamički sustav može zamijeniti zatvorenim.



Slika 19. Jednozonski simulacijski model HCCI motora

Ako se opći jednozonski model primjeni samo na visoko tlačni dio procesa dakle od trenutka zatvaranja usisnih ventila do otvaranja ispušnih ventila i ako se zanemari utjecaj propuhivanja izraz (3.2) prelazi u oblik:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}Q_{\mathrm{W}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} \tag{4.1}$$

Unutarnja energija mješavine idealnih plinova ovisi samo o sastavu i temperaturi [74] pa se može zapisati kao zbroj unutarnjih energija pojedinog sudionika:

$$U = m \cdot u = m \cdot \left(\sum_{i=1}^{n_{\rm sp}} x_i \cdot c_{v,i}\right) \cdot T$$
(4.2)

gdje su:

$$u$$
 – specifična unutarnja energija, $\frac{J}{kg}$

$$c_{v,i}$$
 – specifični toplinski kapacitet pri konst. volumenu *i*-tog kemijskog spoja, $\frac{J}{kg K}$

Derivacijom po vremenu izraza 4.2 slijedi da je brzina promjene unutarnje energije jednaka:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = m \cdot \left(\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sp}}} \left(\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} \cdot c_{\mathrm{v},i} \right) \cdot T + \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sp}}} \left(x_i \cdot c_{\mathrm{v},i} \right) \cdot \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} \right)$$
(4.3)

Brzina promjene masenog udjela pojedinog kemijskog spoja izračunava se primjenom kemijske kinetike, jer je maseni udio u izravnoj vezi s molarnom koncentracijom:

$$x_i = \frac{m_i}{m} = \frac{n_i \cdot M_i}{m} = \frac{c_i \cdot V \cdot M_i}{m} = c_i \cdot v \cdot M_i$$
(4.4)

gdje su:

$$v$$
 – specifični volumen smjese, $\frac{m^3}{kg}$,

 c_i – molarna koncentracija kemijskog spoja *i*, $\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$.

Brzina promjene masenog udjela nekog kemijskog spoja proporcionalna je brzini stvaranja tog kemijskog spoja $\dot{\omega}_i$:

$$\frac{\mathrm{d}x_i}{\mathrm{d}t} = v \cdot M_i \cdot \frac{\mathrm{d}c_i}{\mathrm{d}t} = v \cdot M_i \cdot \dot{\omega}_i \tag{4.5}$$

Prema tome slijedi da je brzina promjene unutarnje energije:

$$\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = m \cdot \left(\sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sp}}} \left(v \cdot M_i \cdot \dot{\omega}_i \cdot c_{\mathrm{v},i} \right) \cdot T + \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sp}}} \left(x_i \cdot c_{\mathrm{v},i} \right) \cdot \frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} \right)$$
(4.6)

Uvrštavanjem izraza 4.6 u izraz 4.1 i sređivanjem slijedi izraz za brzinu promjene temperature:

$$\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\overline{c}_{\mathrm{v}}} \cdot \left(\frac{1}{m} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}Q_{\mathrm{w}}}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}W}{\mathrm{d}t} \right) - v \cdot \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sp}}} \left(M_i \cdot \dot{\omega}_i \cdot u_i \right) \right)$$
(4.7)

gdje je:

$$\bar{c}_v$$
 – specifični topl. kapacitet mješavine pri konstantnom volumenu, $\frac{J}{\text{kg K}}$.

Obzirom da se za izračunavanje stanja u zonama koristi razdvojeni rješavač, izraz 4.7 koji se koristi se u proračunu jednozonskog modela, može se uz određene korekcije koristiti i za proračun svake od zona višezonskog modela iz čega slijedi izraz za brzinu promjene temperature u zoni *j*. Sve veličine s indeksom *j* odnose se na vrijednost te veličine u zoni j:

$$\frac{\mathrm{d}T_j}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\bar{c}_{\mathrm{v},j}} \cdot \left(\frac{1}{m_j} \cdot \left(\frac{\mathrm{d}Q_j}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}W_j}{\mathrm{d}t} \right) - v_j \cdot \sum_{i=1}^{N_{\mathrm{sp}}} \left(M_i \cdot \dot{\omega}_{i,j} \cdot u_{i,j} \right) \right)$$
(4.8)

4.2. Podmodel za podjelu prostora izgaranja na zone modela

Prednosti u boljem opisivanju procesa izgaranja višezonskih modela u odnosu na jednozonske su očite. Međutim, da bi se one mogle u potpunosti iskoristiti vrlo je bitno da podjela prostora izgaranja u zone modela bude takva da omogućuje modeliranje svih pojava koje o toj raspodjeli ovise. Tu se prije svega misli na što realnije opisivanje stanja u cilindru motora, nehomogenosti smjese i temperaturne raspodjele. U višezonskom modelu to se postiže modeliranjem dovoljnog broja zona u kojima je moguće zasebno definirati temperaturu i sastav smjese.



Slika 20. Mehanizmi nastajanja emisija štetnih tvari u HCCI motoru, [75]

O temperaturnoj raspodjeli u cilindru motora, osim samog početka i daljnjeg tijeka izgaranja, ovise i pojave vezane uz formiranje emisija štetnih tvari. Zadovoljavanje strogih zahtjeva dopuštenih razina emisija štetnih tvari iz MSUI postaje jednim od glavnih zadataka u razvoju MSUI pa je i njihovo predviđanje simulacijskim alatima sve važnije. Slikom 20. prikazani su glavni mehanizmi nastajanja emisija štetnih tvari u HCCI motoru koji su potvrđeni brojnim eksperimentalnim istraživanjima i numeričkim simulacijama [33], [75], [76]. Upravo ti mehanizmi utjecali su u većoj mjeri na podjelu prostora izgaranja na zone i u ovom radu.

Glavnina emisija HC i CO nastaje u prostoru procjepa i u rubnoj zoni uz stijenku cilindra koja se naziva zona graničnog sloja (engl. *boundary layer*). U zoni graničnog sloja, ukoliko je

temperatura preniska, onemogućena je potpuna oksidacija CO u CO₂. Iako se visoke emisije HC i CO uvijek povezivalo s Ottovim motorima s vanjskom pripremom smjese, kod HCCI motora problem emisija HC i CO ne ovisi o načinu pripreme smjese. Naime, kod unutarnje pripreme gorivo se ubrizgava dovoljno rano te se stigne izmiješati s plinovima u cilindru HCCI motora u homogenu smjesu. Prilikom kompresije, smjesa se uslijed porasta tlaka raspoređuje po čitavom volumenu cilindra pa tako ulazi i u procjep. To je prostor između stijenki cilindra i klipa iznad prve klipne karike koji je uvjetovan konstrukcijom motora i ne može se izbjeći. Zbog svog vrlo malog volumena i relativno velike površine u odnosu na volumen, prostor procjepa se intenzivno hladi pa je zbog toga temperatura smjese u procjepu gotovo jednaka temperaturama stijenki cilindra i klipa s kojima je smjesa u procjepu u dodiru. U trenutku kad u cilindru započne izgaranje, zbog preniske temperature u prostoru procjepa u smjesi koja se tamo nalazi ne može se inicirati samozapaljenje niti dolazi do potpunog izgaranja. Kasnije, tijekom ekspanzije iz prostora procjepa, izlaze neizgorjeli HC i CO. Nadalje, uslijed niske temperature u cilindru motora ne može doći do potpune oksidacije, pa HC koji izlazi iz prostora procjepa oksidira samo djelomično, u CO, te tako povisuje razinu emisija CO. Drugi izvor emisija HC i CO može biti preniska temperatura u prostoru izgaranja. To, opet ima za posljedicu visoku emisiju ovih štetnih tvari, a može se javiti kod djelomičnog, ili češće kod niskog opterećenja motora.

Iako je zbog velikog faktora zraka za HCCI motore karakteristična relativno niska emisija NO_X , ona se može značajno povisiti ako se lokalno u cilindru stvore za to pogodni uvjeti. Naime, razlog povećanih emisija NO_X su oni dijelovi prostora u cilindru koji tijekom izgaranja imaju temperaturu višu od 1800 K [43], [75] i u kojima se sastav smjese približava stehiometrijskom. Vjerojatnost nastanka takvih područja veća je ako se u HCCI motoru koristi unutarnja priprema smjese i ako nema dovoljno vremena za kvalitetno miješanje ubrizganog goriva i plinova u cilindru motora pa se u smjesi koja je po svom prosječnom sastavu siromašna javljaju područja stehiometrijske smjese.

Na osnovu navedenog zaključuje se da ukoliko se simulacijskim modelom žele obuhvatiti efekti nastajanja emisija HC i CO, simulacijski model obavezno mora sadržavati zonu procjepa. Osim zone procjepa za navedene emisije bitna je i zona graničnog sloja. Ona se u različitim modelima opisuje na različite načine. Većina postojećih modela prostor izgaranja opisuje tzv. ljuskastim modelom (prikazan je slikom 21.), a zona graničnog sloja opisuje se jednom rubnom zonom koja okružuje sve plohe prostora izgaranja. Na taj način je stijenkama cilindra, glave i klipa dodijeljena ista temperatura, premda one u stvarnosti imaju različita

temperaturna polja. U ovom modelu je svaka zona modelirana zasebno, da bi se omogućilo realističnije opisivanje rubne zone prostora izgaranja. Na taj način se granični sloj uz stijenku cilindra opisuje jednom zonom, granični sloj uz glavu motora drugom, a granični sloj uz čelo klipa trećom zonom. U svakoj od tih zona temperatura je posebno definirana.



Slika 21. Izgled često korištenih podjela prostora izgaranja u višezonskim modelima, [77], [78]



Slika 22. Temperaturna raspodjela unutar cilindra motora Ricardo E6 – CFD simulacija [79]



Slika 23. Temperaturna raspodjela unutar cilindra motora Cummins B - CFD simulacija [33]

Pregledom literature [33], [79], u kojoj je HCCI motor analiziran CFD modelima, zaključuje se da, osim zone procjepa iznad klipne karike, u zoni kontakta glave i cilindra motora postoji područje u kojem je temperatura niža nego uz stijenku odnosno glavu motora (crveno zaokruženo područje na slikama 22. i 23.). Obzirom da je u tom području temperatura bliska temperaturi zone procjepa pretpostavlja se da i ta zona ima bitnu ulogu u stvaranju emisija CO i HC. To područje u drugim analiziranim modelima nije bilo posebno modelirano, a u ovom modelu definirano je kao zona procjepa u području brtve glave motora.

Slikom 24. pokazana je podjela prostora izgaranja na zone predloženog modela koja odgovara traženim zahtjevima. Zona 1 predstavlja zonu procjepa između klipa i stijenke cilindra iznad prvog klipnog prstena, a zona 2 zonu procjepa u području brtve glave motora. Zona 3 je rubna zona uz stijenku cilindra. Rubna zona uz glavu motora je zona 4, a zona 5 je rubna zona uz čelo klipa.



Slika 24. Podjela prostora izgaranja u zone modela

Preostali volumen raspoređuje se na središnje zone. Prva središanja zona je zona 6, a zadnja zona je zona N_z , pri čemu je N_z ukupan broj zona modela. U ovom modelu središnje zone modelirane su kao međuprostori omeđeni koncentričnim valjcima, smještenim jedan oko drugog, čija se uzdužna os poklapa s uzdužnom osi cilindra i koji se šire od jezgre prema vanjskim zonama (slika 24.).

Broj takvih središnjih zona, ovisi o ukupnom broju zona modela, koji, kao što je u uvodnom dijelu naznačeno treba biti proizvoljan, odnosno bira ga korisnik modela. Iako većina do sada korištenih simulacijskih modela HCCI motora radi s unaprijed programiranim određenim brojem zona koji se ne može mijenjati, u ovom modelu broj zona je proizvoljan, a najmanji broj zona jednak je sedam. Model sa sedam zona sastoji se od dvije zone procijepa, tri rubne zone uz stijenke cilindra i dvije središnje zone.

Zone procjepa uz klip i procjepa uz brtvu glave motora te zone uz čelo klipa su zone konstantnog volumena, koji se mogu izračunati iz geometrijskih dimenzija ili zadati kao udjeli kompresijskog volumena. Ostale zone mijenjaju volumen ovisno o položaju klipa, odnosno o zakretu koljenastog vratila (KV).

Za predloženi raspored zona, volumeni zona izračunavaju se prema izrazima:

Volumen zone procjepa uz klip V_1 jednak je:

$$V_1 = (D_c \cdot \delta_{PR1} - \delta_{PR1}^2) \cdot \pi \cdot h_{PR1}$$

$$\tag{4.9}$$

Volumen zone procjepa uz brtvu glave motora V_2 jednak je:

$$V_2 = (D_c \cdot \delta_{PR2} + \delta_{PR2}^2) \cdot \pi \cdot h_{PR2}$$

$$(4.10)$$

Volumen zone uz stijenku cilindra V_3 jednak je:

$$V_3 = (D_{\rm c} \cdot \delta_{\rm STCIL} - \delta_{\rm STCIL}^2) \cdot \pi \cdot h_{\rm STCIL}$$

$$\tag{4.11}$$

Volumen zone uz glavu motora V_4 jednak je:

$$V_4 = (A_{GL} - (D_c \cdot \delta_{\text{STCIL}} - \delta_{\text{STCIL}}^2) \cdot \pi) \cdot \delta_{\text{RZ}}$$
(4.12)

Volumen zone uz čelo klipa V₅ jednak je:

$$V_{5} = (A_{KL} - (D_{c} \cdot \delta_{\text{STCIL}} - \delta_{\text{STCIL}}^{2}) \cdot \pi) \cdot \delta_{\text{RZ}}$$

$$(4.13)$$

Volumen ostalih zona V_j od V_6 do V_{Nz} jednak je:

$$V_{j} = \frac{(V_{\rm UK} - V_{\rm 1} - V_{\rm 2} - V_{\rm 3} - V_{\rm 4} - V_{\rm 5})}{N_{\rm z} - 5} \tag{4.14}$$

U izrazima za izračunavanje volumena zona (4.9) do (4.14) pojedini članovi predstavljaju geometrijske veličine kojima je opisan prostor izgaranja odnosno pojedina zona modela. Geometrija modela s karakterističnim veličinama kojima su definirani volumeni zona pokazani su slikom 26. Uz sliku navedeni su i opisi pojedinih članova.

Da bi se definirala podjela cilindra u zone većinu varijabli mora unijeti korisnik, dok neke od veličina proizlaze iz određenih geometrijskih odnosa.

Visina zone uz stijenku cilindra izračunava se prema:

$$h_{\text{STCIL}} = h_0 + h \tag{4.15}$$

gdje su

 h_0 – visina cilindra kada se klip nalazi u GMT, m

h – pomak klipa u ovisnosti o zakretu KV, m

Debljina zone uz glavu motora i čelo klipa δ_{RZ} zadaje se kao korisnički određena varijabla, ali se isto tako i izračunava ovisno o broju zona. Ukoliko je izračunata debljina veća nego korisnički određena, u daljnjem proračunu se koristi korisnički određena debljina. Ukoliko je izračunata debljina manja, tada se ona koristi u daljnjim proračunima. Razlog tome je mogućnost modela da radi s korisnički odabranim brojem zona pa bi se moglo dogoditi da u trenutku kada je klip u GMT debljina zona bude veća od visine h_0 . Iz toga slijedi da je debljina zone uz glavu motora i čelo klipa δ_{RZ} jednaka:

$$\delta_{\rm RZ} = \frac{h_0}{2 \cdot (N_z - 4)} \tag{4.16}$$

Volumeni zona uz glavu i čelo klipa izračunavaju se tako da se iz 3-D CAD (engl. *Computer Aided Design*) modela glave i klipa dobiju podaci o površinama plohe glave A_{GL} i čela klipa A_{KL} te se pomnože debljinom rubne zone δ_{RZ} . Na taj način izračunat volumen zone vrlo malo odstupa od stvarnog volumena koji bi se dobio 3-D CAD modeliranjem same rubne zone. Time je omogućeno modeliranje rubnih zona kod nepravilnih neravnih ploha glave i čela klipa. Neki od nepravilnih oblika prostora izgaranja pokazani su slikom 25.



Slika 25. Različiti oblici glave cilindra i čela klipa [73]



Slika 26. Geometrijske značajke kojima se izračunavaju volumeni pojedinih zona modela

Oznake na slici predstavljaju geometrijske veličine kojima se opisuje prostor izgaranja i pojedina zona, a koriste se za izračun volumena zona:

- $D_{\rm c}$ promjer cilindra, m
- δ_{PR1} debljina zone procjepa klip-cilindar, m
- h_{PR1} visina zone procjepa klip-cilindar, m
- $\delta_{_{\mathrm{PR2}}}$ debljina zone procjepa glava-cilindar, m
- h_{PR2} visina zone procjepa klip-cilindar, m
- $\delta_{\rm stcil}~$ debljina zone uz stijenku cilindra, m
- h_{STCIL} visina zone uz stijenku cilindra, m
- $A_{\rm GL}$ površina glave motora, m²
- $A_{\rm KL}$ površina čela klipa, m²
- $\delta_{\rm \scriptscriptstyle RZ} ~-$ debljina zone uz glavu motora odnosno čelo klipa, m

4.3. Podmodel za određivanje početnih uvjeta

Nakon što je prostor izgaranja podijeljen na zone, u njima je potrebno odrediti početne uvjete potrebne za daljnji tijek proračuna. Integriranjem višezonskog simulacijskog modela u 1-D/0-D simulacijski model, unutar programskog paketa AVL BOOST, omogućena je simulacija čitavog radnog ciklusa HCCI motora. Niskotlačni dio procesa izračunava se korištenjem 1-D modela strujanja u usisnim i ispušnim cijevima, a visokotlačni dio procesa višezonskim modelom. Proračun procesa u višezonskom modelu započinje u trenutku zatvaranja usisnih ventila (UVZ) i traje do otvaranja ispušnih ventila (IVO). Da bi proračun višezonskim modelom uopće mogao započeti, potrebno je poznavati termodinamičko stanje u svakoj od zona višezonskog modela.

Tijekom izračuna niskotlačnog dijela ciklusa, da bi se uštedjelo na proračunskom vremenu, za proračun se koristi jednozonski model zbog čega je stanje smjese u cilindru u trenutku UVZ određeno tlakom p_c , temperaturom T_c i sastavom smjese x_i . Iz takvog poznatog termodinamičkog stanja smjese u cilindru potrebno je izračunati termodinamička stanja u svakoj zoni modela. Za izračunavanje stanja u zonama iskoristit će se pojava miješanja idealnih plinova pri konstantnom volumenu, koje se već koristi da bi se iz termodinamičkog stanja u zonama $(p_j, T_j, m_j, x_{i,j})$ izračunalo termodinamičko stanje u cijelom cilindru. Tijek procesa određivanja početnih uvjeta višezonskog modela pokazan je slikom 27.



Slika 27. Tijek procesa izračuna početnih uvjeta višezonskog modela

Iako zone prije miješanja imaju isti tlak, nakon miješanja pri konstantom volumenu tlak mješavine nužno ne mora odgovarati tlaku prije miješanja. Isto tako, prilikom izračunavanja početnih uvjeta, tlak u zonama nakon izračuna početnih uvjeta ne mora odgovarati tlaku cilindra p_c iz jednozonskog modela.

Tlak u zonama prilikom izračuna početnih uvjeta izračunava se iteracijskim postupkom koji započinje pretpostavkom da je tlak u pojedinoj zoni jednak jedinstvenom tlaku u cilindru:

$$p_{\rm z} = p_{\rm c} \tag{4.17}$$

gdje je:

 p_z – tlak u zonama nakon podjele prostora izgaranja u zone, Pa.

Rubne zone koje su u kontaktu sa stijenkama prostora izgaranja moraju imati temperaturu blisku temperaturi stijenke, što znači da se temperatura u tim zonama mora izračunati na temelju poznate temperature stijenke. Za izračunavanje temperatura u rubnim zonama korišten je model koji je razvijen u [35]. Predloženi model izračunava temperaturu zone uz stijenku primjenom izraza kojim je opisan profil temperature uz stijenku i pretpostavke da se on može matematički zapisati kao funkcija u obliku:

$$T(x) = a \cdot (x+b)^{-c} + d \tag{4.18}$$

gdje je:

x – udaljenost od stijenke cilindra prema središtu, m,

a, b, c, d – parametri matematičke funkcije.

Parametri *a*, *b*, *c*, *d* izračunavaju se iz ograničenja koja se postavljaju na pretpostavljeni profil temperature, kao što je uvjet da je temperatura u rubnoj zoni uz samu stijenku jednaka temperaturi stijenke: $T(x = 0) = T_W$, ili uvjet da je na dovoljnoj udaljenosti *x*, temperatura jednaka srednjoj temperaturi cilindra: $T(x) = T_c$. Primjenom izraza (4.18) izračunava se srednja temperatura za svaku od rubnih zona (uz čelo klipa, uz glavu i uz stijenku cilindra). Zone procjepa ne izračunavaju se na taj način, već je zoni procijepa uz glavu motora pridodana temperatura glave motora. Zoni procjepa uz klip temperatura se može posebno zadati zbog relativno visoke razlike u temperaturama stijenki koju zonu procijepa okružuju. Naime, s jedne strane zone procijepa je vrući klip, a s druge znatno hladnija stijenka cilindra.

Nakon što se izračunaju temperature rubnih zona uz poznate volumene i pretpostavku da je tlak u zonama jednak tlaku cilindra, za te zone može se primjenom jednadžbe stanja izračunati masa smjese u zonama (j – redni broj zone; za rubne zone: j = 1 do 5):

$$m_j = \frac{p_z \cdot V_j}{R_j \cdot T_j}, \quad j = 1:5$$

$$(4.19)$$

Granični sloj predstavlja zonu koja se sastoji se od rubnih zona uz stijenke prostora izgaranja, odnosno sačinjavaju ga zone 3, 4, 5 i dobiven je miješanjem tih zona pri konstantnom volumenu (4.21).

Temperatura graničnog sloja T_{BL} izračunata je iz unutarnje energije graničnog sloja, a predstavlja srednju vrijednost temperatura rubnih zona, što će se kasnije iskoristiti za izračunavanje temperature prve središnje zone (zona 6):

$$m_{\rm BL} = m_3 + m_4 + m_5 \tag{4.20}$$

$$U_{\rm BL} = U_3 + U_4 + U_5 \tag{4.21}$$

$$T_{\rm BL} = \frac{U_{\rm BL}}{\bar{c}_{\rm v}(T_{\rm BL}) \cdot m_{\rm BL}} \tag{4.22}$$

gdje su:

 $m_{\rm BL}$ – masa radne tvari u graničnom sloju, kg,

 $U_{\rm BL}$ – unutarnja energija u graničnom sloju, J,

 $T_{\rm BL}$ – temperatura graničnog sloja, K.

Na taj način definirano je termodinamičko stanje rubnih zona i zona procijepa te još preostaje odrediti stanje u središnjim zonama. Obzirom da se volumeni središnjih zona izračunavaju izrazom (4.14) slijedi da sve središnje zone imaju jednake volumene. To uz jedinstven tlak u svim zonama znači da ukoliko se masa središnjih zona razdijeli na jednake dijelove da će svi ti dijelovi (koji imaju jednaki tlak) imati i jednaku temperaturu:

$$T_{\rm core} = \frac{p_z \cdot V_{\rm core}}{R_{\rm core} \cdot m_{\rm core}}$$
(4.23)

gdje je:

 T_{core} – temperatura središnjih zona uz jednaku raspodjelu mase središnjih zona, T.

Ako se žele postići različite temperature u središnjim zonama, uz isti sastav u zonama, iste tlakove i volumene, masa se ne smije razdijeliti na jednake dijelove u tim zonama jer se raspodjelom mase djeluje na raspodjelu temperatura središnjih zona. Zbog toga raspodjela mase mora biti takva da raspodjela temperature, koja iz te raspodjele proizlazi, zadovoljava određene uvjete.

Prije svega, raspodjela temperature mora biti takva da srednja vrijednost temperatura odgovara temperaturi koja bi se dobila da sve zone imaju jednake mase. Isto tako, raspodjela mora biti kontinuirana. To znači da temperatura od rubnih zona prema središtu mora ili kontinuirano rasti ili kontinuirano padati, ovisno o tome je li središnji dio topliji ili hladniji od dogoditi rubnih dijelova, ali se ne smije diskontinuitet kao da je npr. $T_{j-1} > T_j < T_{j+1}$.

U ovom modelu za raspodjelu mase središnjih zona korišten je izraz za aritmetički niz [80]:

$$a_k = a_{k-1} + d = a_{k-2} + 2 \cdot d = \dots = a_1 + d \cdot (k-1)$$
(4.24)

gdje su:

 a_k – član aritmetičkog niza k,

d – razlika aritmetičkog niza,

k – ukupan broj članova aritmetičkog niza.

U aritmetičkom nizu razlika između svakog člana i njegova prethodnika, osim prvoga, jednaka je vrijednosti d, koja se naziva razlika aritmetičkog niza. Suma prvih k članova niza jednaka je umnošku broja članova i srednje vrijednosti prvog i zadnjeg člana niza:

$$S_{k} = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (a_{1} + a_{k}) = \frac{1}{2} \cdot k \cdot (2 \cdot a_{1} + d \cdot (k - 1))$$
(4.25)

Da bi se raspodjela mase, a time i temperature središnjih zona mogla odrediti primjenom aritmetičkog niza, potrebno je poznavati masu prve središnje zone m_6 ili masu zadnje središnje zone m_{Nz} . Masa zone m_6 određena je tako da temperatura zone 6 bude za određeni iznos ΔT_{BL-6} različita od temperature graničnog sloja:

$$\Delta T_{\rm BL-6} = \frac{T_{\rm core} - T_{\rm BL}}{(N_{\rm z} - 5)} \tag{4.26}$$

Slijedi da je temperatura zone 6 jednaka:

$$T_6 = T_{\rm BL} + \Delta T_{\rm BL-6} \tag{4.27}$$

Primjenom jednadžbe stanja idealnog plina izračunata je masa zone 6:

$$m_6 = \frac{p_z \cdot V_6}{R_6 \cdot T_6}$$
(4.28)

Iz poznate mase zone 6, primjenom izraza za sumu aritmetičkog niza (4.25) i sređivanjem, slijedi da je razlika mase središnjih zona jednaka:

$$\Delta m = \frac{2 \cdot (m_{\text{core}} - m_6 \cdot (N_z - 5))}{(N_z - 6) \cdot (N_z - 5)}$$
(4.29)

Primjenom gornjeg izraza izračunava se masa središnjih zona, od zone 7 do zone predzadnje zone N_{z-1} :

$$m_j = m_6 + (j-6) \cdot \Delta m, \text{ za } j = 7: N_{z-1}$$
 (4.30)

Masa u zadnjoj zoni izračunava se iz zakona održanja mase, kako bi se zadovoljio uvjet da je masa radne tvari u cilindru konstantna:

$$m_{N_z} = m_c - \sum_{j=1}^{N_{z-1}} m_j \tag{4.31}$$

Primjenom jednadžbe stanja idealnog plina izračunavaju se temperature u zonama od prve središnje zone 7 do zone predzadnje zone N_{z-1} :

$$T_{j} = \frac{p_{z} \cdot V_{j}}{R_{j} \cdot m_{j}} \text{ za } j = 7 : N_{z-1}$$
(4.32)

Temperatura zadnje zone izračunava se iz zakona održanja energije:

$$T_{N_{z}} = \frac{U_{c} - \sum_{j=1}^{N_{z-1}} U_{j}}{\overline{c}_{v}(T_{N_{z}}) \cdot m_{N_{z}}}$$
(4.33)

Iz tako izračunatih termodinamičkih stanja svih zona postavljanjem jednadžbe zakona održanja mase, tj. uvjeta da je ukupna masa u cilindru m_c jednaka zbroju masa m_j svih zona, sređivanjem slijedi izraz za izračunavanje tlaka u svakoj pojedinoj zoni:

$$p_{z} = \frac{m_{c}}{\sum_{1}^{N_{z}} (\frac{V_{j}}{R_{j} \cdot T_{j}})}$$
(4.34)

Tako izračunat tlak uspoređuje se s prije izračunati tlakom razdvojenih zona i ukoliko je razlika veća od zadane tolerancije postupak iterativnog određivanja početnih uvjeta u zonama se ponavlja. Dijagram toka pokazan je slikom 29. Nakon postignute zadovoljavajuće točnosti, zadnje izračunato stanje u zonama uzima se kao početno stanje na početku višezonskog proračuna.

Slikom 28. pokazana je raspodjela temperatura u zonama modela nakon određivanja početnih uvjeta. Model s 12 zona, pokazan plavim stupićima u dijagramu, a model s 24 zone pokazan narančastim stupićima u dijagramu. Prvih pet zona čine zone uz stijenke prostora izgaranja. Temperatura tih zona određena je iz temperatura stijenki prostora izgaranja, dok je za središenje zone, od zone 6 do 12 odnosno 24 temperatura određena primjenom aritmetičkog niza i izraza sa sumu aritmetičkog niza. Temperatura T_{BL} je temperatura graničnog sloja koja je jednaka temperaturi rubne zone koja se sastoji od zona tri, četiri i pet, odnosno od zona koje okružuju stijeneke prostora izgaranja bez zona procijepa. Iz temperature T_{BL} određena je masa zone 6, iz koje je dalje određena masa ostalih središnjih zona. Temperatura T_{core} je temperatura koju bi imale središnje zone kada bi one imale jednaku masu. Oko temperature T_{core} , kao srednje temperature središnjih zona raspodijeljena je temperatura u ostalim zonama na način da se temperature u zonama međusobno razlikuju za određeni iznos ΔT . U ovom primjeru, temperatura T_{core} gotovo je jednaka temperaturi cilindra T_c .



Slika 28. Raspodjela temperatura u zonama modela s 12 i 24 zone izračunata podmodelom za određivanje početnih uvjeta



Slika 29. Dijagram toka izračuna početnih uvjeta višezonskog modela

4.4. Podmodel za izmjenu topline zone

Modeliranje izmjene topline u simulacijskim modelima MSUI vrlo je bitno jer se značajan dio energije unesene gorivom gubi upravo na izmjeni topline s okolišem. Kod HCCI motora to je dodatno naglašeno jer utječe na temperaturnu raspodjelu unutar cilindra, a time i na sam proces izgaranja. Vršna temperatura cilindra utječe na trenutak pojave samozapaljenja smjese i obično se pojavljuje u središtu prostora izgaranja. Oblik temperaturne raspodjele u cilindru motora utječe na duljinu trajanja izgaranja, brzinu oslobađanja topline i oblik profila tlaka u cilindru, potrošnju goriva, stupanj djelovanja, a ima i utjecaj na stvaranje emisija štetnih tvari. Izmjena topline posebno utječe na razine emisija HC i CO koje ovise o temperaturi graničnog sloja uz stijenke prostora izgaranja.

Prema [52] prijelaz topline s radne tvari na stijenke cilindra sastoji se od konvekcije Q_{α} i zračenja Q_{ε} pa se općenito za MSUI prijelaz topline može zapisati u obliku:

$$\frac{\mathrm{d}Q_{\mathrm{w}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}Q_{\alpha}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}Q_{\varepsilon}}{\mathrm{d}t}$$
(4.35)

gdje pojedini članovi predstavljaju vremensku promjenu:

$$\frac{dQ_{\alpha}}{dt} - \text{topline koja se izmijeni sa stijenkama konvekcijom,}$$
$$\frac{dQ_{\varepsilon}}{dt} - \text{topline koja se izmijeni sa stijenkama zračenjem.}$$

Zbog nepostojanja izražene fronte plamena i vrlo niske emisije čestica, radijacija se u HCCI motoru može zanemariti [81], [82] pa izraz 4.35 prelazi u oblik:

$$\frac{\mathrm{d}Q_{\mathrm{W}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}Q_{\mathrm{a}}}{\mathrm{d}t} = \alpha_{\mathrm{W}} \cdot A_{\mathrm{W}} \cdot (T_{\mathrm{W}} - T_{\mathrm{c}}) \tag{4.36}$$

gdje su:

$$\alpha_{\rm W}$$
 - koeficijent konvektivnog prijelaza topline, $\frac{\rm W}{\rm m^2 K}$,

 $A_{\rm W}$ – površina preko koje se izmjenjuje toplina, m²,

 $T_{\rm W}$ – temperatura stijenke s kojom se izmjenjuje toplina, K.

Gornji izraz pogodan je za jednozonske modele, jer se u izrazu koristi srednja temperatura plinova u cilindru, međutim kod višezonskog modela svaka zona ima svoju temperaturu, koja je različita od srednje temperature. Uz to, ovisno o podjeli prostora izgaranja sve zone ne moraju nužno biti u kontaktu s stijenkama, već su određene zone u kontaktu s drugim zonama pa u takvim modelima treba, osim izmjene sa stijenkama, u izmjenu topline uključiti i izmjenu topline između zona.

Prema Komninosu i Kosmadakisu [82] u većini višezonskih simulacijskih modela koriste se dva općenita načina za izračun, kojima se dobivaju dva toplinska toka, globalni i lokalni.

U prvom načinu izračunava se ukupni toplinski tok iz srednje temperature plinova u cilindru i temperaturi stijenki, kao da se radi o jednozonskom modelu. Na taj način izračunat je ukupni

ili tzv. globalni toplinski tok koji se u određenom omjeru može ili raspodijeliti između zona modela ili dodijeliti samo rubnim zonama. Takav način izračuna smatra se pouzdanim što se tiče samog prijelaza topline, jer se korelacije za koeficijent prijelaza topline validiraju prema srednjoj temperaturi cilindra. Međutim, prilikom raspodjele globalnog toplinskog toka na zone mogu se pojaviti određene nelogičnosti. Obzirom da izmijenjena toplina ne ovisi o temperaturi zone T_j , kojoj se određeni udio globalnog toplinskog toka dodjeljuje, moguća je situacija u kojoj je $T_c > T_w > T_j$, što bi značilo da je iz te zone toplina prešla na stijenku iako je njena temperatura niža od temeprature stijenke, a to je u suprotnosti sa zakonima termodinamike. Takav pristup modeliranja izmjene topline korišten je u [83], [84], [85]. U radu [85] pokazano je da se pravilnom raspodjelom ukupnog toplinskog toka na zone modela može postići bolje podudaranje rezultata simulacija i eksperimentalnih istraživanja te da bi se to moglo koristiti za kalibraciju simulacijskog modela, ali zahtijeva parametarsku analizu utjecaja raspodjele ukupnog toplinskog toka na zone modela.

Drugi način, kojim se izbjegava eventualna pojava nelogičnosti temperature je korištenje "lokalne" vrijednosti temperature plinova zone za izračun toplinskog toka, a ne srednje temperature plinova u cilindru. Na taj način se primjenom izraza (4.36) izračunava lokalni toplinski tok za svaku zonu koja je u dodiru sa stijenkama, s temperaturom koja odgovara temperaturi te zone. Nedostatak ovakvog načina izračuna je što točno izračunavanje toplinskog toka zahtijeva prilagođavanje koeficijenta konvektivnog prijelaza topline, obzirom da su korelacije za prijelaze topline izvedene iz osrednjenih vrijednosti stanja u cilindru motora, a u ovom slučaju se primjenjuju na lokalnoj razini. Ovakav način izračuna koristi se u mnogim modelima HCCI motora, a primijenjen je i u ovom radu.

Izmjena topline zone *j*, prikaza na slici 30., sastoji se od izmjene topline te zone sa stijenkama prostora izgaranja i izmjene topline te zone sa svakom od susjednih zona odnosno sa zonama s kojima je zona *j* u kontaktu što se može zapisati kao:

$$\frac{\mathrm{d}Q_{j}}{\mathrm{d}t} = \sum_{x=1}^{N_{x}} \frac{\mathrm{d}Q_{jW,x}}{\mathrm{d}t} + \sum_{\substack{k=1\\k\neq j}}^{N_{z}} \frac{\mathrm{d}Q_{j-k}}{\mathrm{d}t}$$
(4.37)

pri tome su:

 $Q_{jW,x}$ – toplina koju zona *j* izmijeni sa stijenkom W,x, J,

 $Q_{j,k}$ – toplina koju zona *j* izmijeni sa zonom *k*, J.



Slika 30. Primjer modeliranja izmjene topline zone modela prikazan na primjeru zone 3

Izmjena topline sa stijenkama prostora izgaranja

Izmjena topline pojedine zone sa stijenkama prostora izgaranja dobivena je prilagodbom izraza (4.36) pri čemu se za koeficijent prijelaza topline koriste korelacije za izračunavanje trenutnog prostornog osrednjenog koeficijenta prijelaza topline, a umjesto srednje temperature cilindra T_c , koristi se temperatura zone T_j :

$$\frac{\mathrm{d}Q_{j\mathrm{W},x}}{\mathrm{d}t} = \alpha_{\mathrm{w}} \cdot A_{x,j} \cdot (T_{\mathrm{W},x} - T_j) \tag{4.38}$$

Najpoznatija korelacija za izračunavanje trenutnog prostorno osrednjenog koeficijenta prijelaza topline je Woschnijeva korelacija [25] prvotno razvijena za motore s kompresijskim paljenjem:

$$\alpha_{\rm w} = 130 \cdot D_{\rm c}^{0.2} \cdot p_{\rm c}^{0.8} \cdot T_{\rm c}^{-0.55} \cdot v_{\rm karakt}^{0.8} \tag{4.39}$$

Trenutna karakteristična brzina v_{karakt} izračunava se izrazom:

$$v_{\text{karakt}} = C_1 \cdot \overline{v}_{\text{kl}} + C_2 \cdot \frac{V_{\text{H}} \cdot T_{\text{c}}^{\text{UVZ}}}{p_{\text{c}}^{\text{UVZ}} \cdot V_{\text{c}}^{\text{UVZ}}} \cdot (p_{\text{c}} - p_{\text{c,gon}})$$
(4.40)

Pojedini članovi u izrazu (4.40) predstavljaju:

$$C_1 = 2,28 + 0,308 \cdot \frac{v_0}{\overline{v}_{k1}},$$

 \overline{v}_{kl} – srednja brzina klipa, m/s,

$$v_0$$
 – obodna brzina smjese u cilindru, m/s,

$$C_2 = 0,00324,$$

 $p_{c.gon}$ – tlak u cilindru gonjenog motora, Pa,

 p_{c}^{UVZ} , V_{c}^{UVZ} , T_{c}^{UVZ} – tlak, volumen, temperatura u trenutku UVZ.

Uz Woschnijevu korelaciju za HCCI motore često se još koriste Changova [27], Hohenbergova [26] i Annandova [19] korelacija. Eksperimentalnim istraživanjem izmjene topline u HCCI motoru, modificiranjem Woschnijeve korelacije, dobivena je Changova korelacija prilagođena HCCI motorima. U odnosu na originalnu Woschnijevu korelaciju u kojoj je za karakterističnu duljinu korišten promjer cilindra, kod Changove korelacije je to trenutna visina prostora izgaranja. Isto tako, temperaturni eksponent promijenjen je od vrijednosti -0,55 na vrijednost -0,73 dok je koeficijent C_2 karakteristične brzine smanjen na šestinu izvorne vrijednosti:

$$\alpha_{\rm w} = 129.8 \cdot H_{\rm uk}^{\cdot 0.2} \cdot p_{\rm c}^{0.8} \cdot T_{\rm c}^{\cdot 0.73} \cdot v_{\rm c}^{0.8} \tag{4.41}$$

gdje je:

 H_{uk} – trenutna visina prostora izgaranja, m.

Karakteristična (trenutna) brzina v_{karakt} izračunava se izrazom:

$$v_{\text{karakt}} = C_1 \cdot \overline{v}_{\text{kl}} + \frac{C_2}{6} \cdot \frac{V_{\text{H}} \cdot T_{\text{c}}^{\text{UVZ}}}{p_{\text{c}}^{\text{UVZ}} \cdot V_{\text{c}}^{\text{UVZ}}} \cdot (p_{\text{c}} - p_{\text{c,gon}})$$
(4.42)

U Hohenbergovoj korelaciji, također nastaloj modificiranjem Woschnijeve, izraz za karakterističnu trenutnu brzinu je značajno pojednostavljen pa je vrijednost karakteristične trenutne brzine konstantna tijekom ciklusa. Uz to, za karakterističnu duljinu koristi se trenutni volumen, a temperaturni eksponent je promijenjen na vrijednost -0,4:

$$\alpha_{\rm w} = 130 \cdot V_{\rm c}^{-0.06} \cdot p_{\rm c}^{0.8} \cdot T_{\rm c}^{-0.4} \cdot (\bar{v}_{\rm kl} + 1.4)^{0.8}$$
(4.43)

Primjena sve tri korelacije, Woschnijeve, Changove i Hohenbergove za modeliranje prijelaza topline u HCCI motoru analizirana je u radu [86]. Usporedbom s eksperimentalnim podacima zaključeno je da Woschnijeva korelacija, iako često korištena, nije najprikladnija za HCCI motore zbog prevelike izmjene topline u procesima izgaranja i ekspanzije. Primjenom Changove korelacije izmjena topline je manja u cijelom radnom ciklusu motora, zbog čega su vršni tlakovi previsoki. Dodatnim podešavanjem kalibracijskih konstanti moguće je postići bolje podudaranje eksperimentalnih rezultata i Changove korelacije, ali Soyhan et al. smatraju da to nije naročito dobro rješenje, jer se kalibracijske konstante moraju prilagođavati posebno svakom motoru. Smatraju da je Hohenbergova korelacija zbog svoje jednostavnositi i relativno dobrih podudaranja s eksperimentalnim rezultatima najprimjerenija za modeliranje HCCI motora.

Izmjena topline između zona

Izmjena topline između zona modela preuzeta je iz rada [35] gdje i detaljnije objašnjena. Izmjena topline između zona izračunava se modelom koji se temelji na potencijalu izmjene topline uslijed miješanja dviju zona. Ako su dvije zone *j* i *k* različitih temperatura u dodiru, i ako se izmiješaju, tada će nakon dovoljno dugo vremena njihova temperatura u izmiješanom stanju biti jednaka nekoj srednjoj temperaturi \overline{T}_{jk} .

Energetski potencijal uslijed kojeg se zoni j promijeni temperatura s T_j na \overline{T}_{jk} jednak je:

$$\Delta Q_{j,k} = \left[u_j(\overline{T}_{jk}) - u_j(T_j) \right] \cdot m_j \tag{4.44}$$

Taj energetski potencijal može se ostvariti samo uz dovoljno dugačko vrijeme, a ako se gornji izraz podijeli s vremenom slijedi izraz za brzinu promjene energetskog potencijala, odnosno slijedi da je toplinski tok između zona jednak:

$$\frac{\mathrm{d}Q_{j\cdot k}}{\mathrm{d}t} = \frac{\Delta Q_{j\cdot k}}{\Delta t} \tag{4.45}$$

gdje je:

 Δt – vremenska konstanta izmjene topline između zona, s.

Što je vremenska konstanta manja, toplinski tok će biti veći i obrnuto. Zbog toga se vremenska konstanta izmjene topline između zona modela može koristiti kao kalibracijska konstanta.

4.5. Podmodel za izjednačavanje tlaka u zonama

Nakon svakog proračunskog koraka sustava diferencijalnih jednadžbi stanja u zonama modela izračunato je novo termodinamičko stanje, označeno indeksom 1: $p_j^{(1)}$, $T_j^{(1)}$, $m_j^{(1)}$, $x_{ij}^{(1)}$ prikazano gornjim dijelom slike 31. (iznad strelice). Zbog primjene razdvojenog rješavača tlak u svim zonama nije jednak, već ga je potrebno izjednačiti na jedinstven tlak u cilindru p_{cyl} . Stanje u zonama nakon primjene podmodela i izjednačavanja tlaka, označeno je indeksom 2: p_{cyl} , $T_j^{(2)}$, $m_j^{(2)}$, $x_{ij}^{(2)}$ te je prikazano donjim dijelom na slici 31. (ispod strelice).



Slika 31. Termodinamičko stanje u zonama prije (iznad strelice) i poslije (ispod strelice) izjednačavanja tlaka u zonama na jedinstveni tlak

Iz poznatog termodinamičkog stanja, mase i volumena svake zone, moguće je odrediti jedinstveni tlak u cilindru p_{cyl} . Prema [87] taj tlak se izračunava iz izraza:

$$p_{\rm cyl} = \frac{\sum_{j=1}^{N_z} (p_j \cdot V_j)}{V_{\rm c}}$$
(4.46)

Preoblikovanjem desne strane izraza (4.46) i korištenjem jednadžbe stanja idealnog plina, slijedi izraz za procijenjeni jedinstveni tlak u cilindru motora u ovisnosti o termodinamičkom stanju radne tvari u pojedinoj zoni:

$$p_{\rm cyl} = \frac{\sum_{j=1}^{N_z} (m_j \cdot R_j \cdot T_j)}{V_{\rm c}}$$
(4.47)

Ako je tlak koji vlada u bilo kojoj zoni modela različit od tlaka izračunatog izrazom (4.46), potrebno ga je izjednačiti na jedinstveni tlak prilagodbom termodinamičkog stanja u zoni. U procesu izjednačavanja tlaka zona na zajednički tlak, zbog zahtjeva da volumen zona mora ostati nepromijenjen, potrebno je promijeniti masu, odnosno temperaturu pojedine zone kako bi se tlak te zone izjednačio s tlakom cilindra.

Ukoliko se pretpostavi da temperatura zone ostaje nepromijenjena, promjena mase pojedine zone može se odrediti primjenom jednadžbe stanja idealnog plina za stanje zone s početnim tlakom p_i i stanje nakon izjednačavanja tlaka na tlak p_{cyl} :

$$p_j \cdot V_j = m_j \cdot R_j \cdot T_j \tag{4.48}$$

Ako bi u toj zoni umjesto tlaka p_j vladao tlak p_{cyl} jednadžba stanja idealnog plina jednaka je:

$$p_{\rm cyl} \cdot V_j = m_j^1 \cdot R_j \cdot T_j \tag{4.49}$$

Oduzimanjem jednadžbi (4.48) i (4.49) te sređivanjem slijedi izraz za promjenu mase pojedine zone uz pretpostavku da nije došlo do promjene temperature u zoni:

$$\Delta m_j = \frac{(p_j - p_{cyl}) \cdot V_j}{R_j \cdot T_j}$$
(4.50)

Budući da se pretpostavlja da prostor cilindra predstavlja zatvoreni termodinamički sustav, u svakom trenutku mora vrijediti i zakon održanja mase, odnosno masa tvari u cilindru mora ostati konstantna.

Iz tog razloga nakon izračuna potrebne promjene mase po zonama treba provjeriti je li masa ostala nepromijenjena, odnosno je li zbroj promjena mase jednak nuli:

$$\sum_{j=1}^{N_z} \Delta m_j = 0 \tag{4.51}$$

Ukoliko je zbroj promjena masa po zonama različit od nule primjenjuje se korekcija promjene mase. Korekcija se provodi na način da se ostatak različit od nule razdijeli i doda promjeni mase svake pojedine zone u ovisnosti o masenom udjelu zone. Ako je Δm_j neke zone jednak nuli, tada se u toj zoni ne provodi korekcija. Za to služi korekcijski faktor CF_j koji je ili jednak nuli ili jedinici ovisno o tome je li Δm_j neke zone jednak ili različit od nule. Prema tome, korigirana promjena mase izračunava se prema izrazu:

$$\Delta m_{j\text{KOR}} = \Delta m_j + \frac{m_j \cdot CF_j}{\sum_{j=1}^{N_z} m_j \cdot CF_j} \cdot \sum_{j=1}^{N_z} \Delta m_j$$
(4.52)

Nakon izračuna promjene mase u svim zonama modela potrebno je odrediti raspodjelu mase između zona. Obzirom da je cilindar podijeljen na konačan broj zona s geometrijski određenim položajem, masa ne može prijeći iz zone u zonu nasumično, već se izmjena mase odvija samo između zona koje imaju zajedničku granicu, a pritom pojedine zone masu mogu izmjenjivati istovremeno sa svim susjednim zonama.

Interakcija izmjene mase između zona definirana je matricom interakcija M_{jk} veličine $N_z \times N_z$. Redak matrice interakcije predstavlja zonu *j*, a stupac zonu *k*. Elementi matrice mogu poprimiti vrijednost nula ili jedan. Ako je element matrice $M_{jk} = 1$ to znači da je moguća izmjena mase iz zone *j* u zonu *k*. Ako je pak $M_{jk} = 0$, to znači da između zona *j* i *k* nije moguća izmjena mase. Nakon što je određena interakcija između zona, za svaku zonu može se postaviti linearna jednadžba koja povezuje izmjenu mase između zona i korigiranu promjenu mase zone zbog izjednačavanja tlaka na zajednički tlak cilindra:

$$\sum_{k=1}^{N_z} M_{jk} \cdot m_{jk} = \Delta m_{j\text{KOR}}$$
(4.53)

Time se dobiva sustav od N_z linearnih jednadžbi s N_z +1 nepoznanicom.

Dodatna jednadžba koja upotpunjuje sustav je jednadžba zakona održanja mase prema kojoj zbroj svih izmjena mase između zona m_{jk} mora biti jednak nuli:

$$\sum_{k=1}^{N_z} m_{jk} = 0 \tag{4.54}$$

Rješenje sustava linearnih jednadžbi je matrica izmjene (raspodjele) masa m_{jk} između zona dimenzije ($N_z \times N_z$), koja se sastoji se od pozitivnih i negativnih elemenata. Na taj način je osim iznosa mase definiran i smjer izmjene. Ako je element matrice m_{jk} pozitivan, to znači da

je masa u zonu *j* ušla iz zone *k*, a ukoliko je element matrice m_{jk} negativan znači da je masa iz zone *j* izašla u zonu *k*. Prema tome mora vrijediti:

$$m_{kj} = -m_{jk} \tag{4.55}$$

Ovakav zapis izmjene mase između zona nije primjeren za daljnji tijek proračun pa se matrica izmjene mase između zona dijeli na dvije nove matrice – ulaznu (pozitivnu) i izlaznu (negativnu). Ulazna matrica sastoji se samo od pozitivnih elemenata matrice izmjene mase između zona dok su ostali elementi jednaki nuli. Isto tako "izlazna matrica izmjene mase" između zona sastoji se samo od negativnih elemenata matrice izmjene mase između zona. Tijekom izračuna izmjene mase između zona moguće je i rješenje u kojem je iznos mase koji iz neke zone mora izaći veći nego što je masa zone u tom trenutku. Da bi se to izbjeglo, nakon izračuna izmjene mase između zona provjerava se je li masa koja iz zone izlazi manja ili veća od trenutne vrijednosti mase zone. Ako je masa koja izlazi iz neke zone veća od trenutne mase te zone, masa Δm_{jKOR} se prepolovi te se ponovno provede proračun izmjene mase između zona. S izmjenom mase između zona doći će i do promjene kemijskog sastava u zonama modela. Masa pojedinog kemijskog elementa *i* u zoni *j* nakon izmjene mase jednaka je:

$$m_{ij}^{(2)} = m_{ij}^{(1)} + x_{ij}^{(1)} \cdot \sum_{k=1}^{N_z} m_{jk\text{OUT}} + \sum_{k=1}^{N_z} x_{ik}^{(1)} \cdot m_{jk\text{IN}}$$
(4.56)

Iz novo izračunatih masa kemijskih spojeva i mase zone može se izračunati novi maseni udio pojedinog kemijskog spoja *i* u zoni *j* nakon izmjene mase prema:

$$x_{ij}^{(2)} = \frac{m_{ij}^{(2)}}{m_j^{(2)}}$$
(4.57)

Nakon izmjene mase između zona potrebno je za svaku zonu postaviti jednadžbu održanja energije, jer s promjenom mase dolazi i do promjene unutarnje energije zone. Masa koja izlazi iz određene zone sa sobom odnosi i dio energije u obliku entalpije. Isto tako masa koja u neku zonu ulazi, unosi u tu zonu entalpiju zone iz koje dolazi. Zbog promjene unutarnje energije dolazi i do promjene temperature zone. Temperatura zone nakon izmjene mase izračunava se iz prvog glavnog stavka.


Slika 32. Zakon održanja energije u zoni prilikom izmjene mase sa susjednim zonama

Za zonu *j* može se postaviti jednadžba održanja energije za otvoreni sustav (prvi glavni stavak termodinamike):

$$U_{j}^{(2)} - U_{j}^{(1)} = Q_{j} - W_{j} + \sum_{k=1}^{N_{z}} m_{jk\text{OUT}} \cdot h_{j} + \sum_{k=1}^{N_{z}} m_{jk\text{IN}} \cdot h_{k}$$
(4.58)

Pretpostavlja se da tijekom izmjene mase između zona nema izmjene topline niti između zona niti sa stijenkama prostora izgaranja, a kako se ne mijenja ni volumen zona gornji izraz može se zapisati u obliku:

$$U_{j}^{(2)} - U_{j}^{(1)} = \sum_{k=1}^{N_{z}} m_{jk\text{OUT}} \cdot h_{j} + \sum_{k=1}^{N_{z}} m_{jk\text{IN}} \cdot h_{k}$$
(4.59)

Sređivanjem izraza (4.59) može se izračunati nova temperatura zone koja je posljedica izmjene mase između zona:

$$T_{j}^{(2)} = \frac{\sum_{k=1}^{N_{z}} m_{jk\text{OUT}} \cdot h_{j} + \sum_{k=1}^{N_{z}} m_{jk\text{IN}} \cdot h_{k} + U_{j}^{(1)}}{m_{j}^{(2)} \cdot \bar{c}_{v,j}^{(2)}(T_{j}^{(2)})}$$
(4.60)

Kako se specifični toplinski kapacitet mijenja s promjenom temperature, njegova vrijednost mora se odrediti iterativnim putem. Nakon što se odrede temperature nakon izmjene mase, iz novoizračunatog stanja u zoni izračunava se novi tlak zone:

$$p_{j}^{(2)} = \frac{m_{j}^{(2)} \cdot R_{j}^{(2)} \cdot T_{j}^{(2)}}{V_{j}}$$
(4.61)

Usporedbom izračunatog tlaka zone nakon provedene izmjene mase s jedinstvenim tlakom cilindra p_{cyl} određuje se je li potrebno ponoviti iteraciju ili je tlak zone jednak tlaku cilindra. Ukoliko je razlika veća od zadane tolerancije cijeli postupak izjednačavanja tlaka po zonama se ponavlja. Kada se postigne zadovoljavajuća točnost, odnosno kada je razlika tlaka po zonama i tlaka cilindra unutar granice tolerancije, postupak izjednačavanja tlaka po zonama se prekida. Tako izračunate vrijednosti tlaka, temperature, mase i kemijskog sastava

predstavljaju termodinamičko stanje zone nakon izjednačavanja tlaka i te vrijednosti su početni uvjeti za novi korak izračuna sustava diferencijalnih jednadžbi stanja u zonama. Dijagram toka izjednačavanja tlaka po zonama pokazan je slikom 38.

Slikom 33. pokazana je raspodjela tlaka u zonama sedamzonskog modela prije i poslije izjednačavanja tlaka u zonama. Različito obojani stupci prikazuju tlak u zonama prije, a plavom bojom obojani stupci tlak u zonama poslije postupka izjednačavanja.





Za taj slučaj ispitan je broj potrebnih iteracija da se postigne tražena točnost izračuna. S tolerancijom izračuna tlaka $p_{tol} = 0,01$ Pa, odnosno razlikom tlaka u nekoj od zona i tlaka cilindra manjom od 0,01 Pa i tolerancijom temperature $T_{tol} = 0,001$ K, rješenje se postiže nakon 15 iteracija kako je i pokazano slikom 34. Bitno je uočiti da se već nakon pete iteracije tlak u zonama gotovo izjednačio, a rješenje unutar relativno zahtijevnih granica tolerancije postiže se nešto kasnije. Osim toga ispitan je i utjecaj razlike tlaka po zonama na duljinu izračuna, odnosno konvergenciju rješenja. Za model s 40 zona ispitana su 3 različita slučaja vrijednosti tlaka u zonama prije postupka izjednačavanja. U sva tri slučaja ukupna masa radne tvari u cilindru je jednaka i ima jednak sastav. Isto tako jednaki su volumeni zona za sva tri slučaja, a promjenama masa i temperatura u zonama postignute su različite vrijednosti tlaka u pojedinoj zoni.



Slika 34. Konvergencija rješenja izjednačavanja tlaka u zonama



Slika 35. Tlak u zonama 40-zonskog modela prije i poslije izjednačavanja tlaka, slučaj 1

Slikom 35. pokazan je slučaj u kojem su zadane ekstremne razlike u vrijednostima tlaka između zona (plavi stupići), zbog čega je potreban velik broj iteracija, čak 490, da bi se, s odgovarajućom točnošću, postiglo izjednačavanje tlaka po zonama (crveni stupići).



Slika 36. Tlak u zonama 40-zonskog modela prije i poslije izjednačavanja tlaka, slučaj 2

Slikama 36. i 37. prikazani su rezultati s manjim razlikama vrijednosti tlaka iz čega se zaključuje da broj potrebnih iteracija (99 za slučaj 2 i 48 za slučaj 3) značajno ovisi o početnim uvjetima tlaka. Ukoliko su razlike između najvećeg i najmanjeg tlaka u zonama veće potreban je i veći broj iteracija za postizanje rješenja.



Slika 37. Tlak u zonama 40-zonskog modela prije i poslije izjednačavanja tlaka, slučaj 3



Slika 38. Dijagram toka modela za izjednačavanje tlaka u zonama

5. Verifikacija simulacijskog modela

Tijekom izrade pojedenih dijelova simulacijskog modela, kao što su podmodel za određivanje početnih uvjeta ili podmodel za izjednačavanje tlaka u zonama, provedena je njihova zasebna verifikacija. Nakon što su dijelovi simulacijskog modela integrirani u programski paket AVL BOOST provedena je verifikacija čitavog modela kako bi se utvrdilo da li se simulacijski model ponaša u skladu s očekivanjima i pretpostavkama postavljenim u razvojnoj fazi modela. Verifikacija je provedena analizom utjecaja parametara proračunskog koraka, vremenske konstante izmjene topline između zona modela, korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke, utjecaja temperature usisa te tlaka usisa na rezultate simulacijskog modela.

5.1. Utjecaj proračunskog koraka

Primjenom razdvojenog rješavača, masa između zona modela izmjenjuje se nakon svakog izračuna diferencijalnih jednadžbi stanja u zonama, odnosno nakon svakog proračunskog koraka. Zbog toga, rješenja proračunskog modela, ukoliko on nije odgovarajuće odabran, mogu ovisiti o proračunskom koraku te može doći do značajnih odstupanja između rezultata izračunatih različitim proračunskim koracima. Simulacijski model je ugrađen u programski paket AVL BOOST, u kojem je proračunski korak definiran je kao promjena zakreta koljenastog vratila ($\Delta \alpha$ °KV) i predstavlja vremenski korak s kojim programski paket izvodi proračune.

Da bi se razmotrio utjecaj veličine proračunskog koraka na rezultate, izračuni su napravljeni s četiri proračunska koraka (0,5; 0,25; 0,1; 0,05 °KV) i to za različite brojeve zona (12, 24, 36). Također je potrebno razmotriti utjecaj dviju konstanata, vremenske konstante izmjene topline između zona modela ZHTC (engl. *Zone Heat Transfer Constant*) i korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke WHT (engl. *Wall Heat Transfer*). Manja vrijednost vremenske konstante ZHTC znači da je izmjena topline između zona modela intenzivnija, odnosno da zone međusobno izmjenjuju veću količinu topline. Veća vrijednost korekcijskog faktora WHT znači da je izmjena topline između plinova u cilindru i stijenki prostora izgaranja također veća. Da bi se testiralo ponašanje modela u ekstremnim uvjetima, formirana su dva seta ovih proračunskih konstanata, SET 1 i SET 2. SET 1 opisuje proces izgaranja s malom izmjenom topline između zona (velika vrijednost ZHTC) i s malim odvođenjem topline kroz stijenke (mala vrijednost WHT), što odgovara slučaju slabog hlađenja motora. SET 2 je prilagođen procesu s intenzivnom izmjenom topline između zona (mala vrijednost ZHTC) i jakim odvođenjem topline kroz stijenke (veliki WHT). Pregled je dan u tablici 4.

Broj zona	Proračunski korak Δα, °KV		SET 1	SET 2
12 24	0,5 0,25	ZHTC (s)	80·10 ⁻⁵	15.10-5
36	0,1 0,05	WHT	1,1	1,4

Tablica 4. Proračunski parametri verifikacije modela

Model s 24 zone – utjecaj na profil tlaka u cilindru

Za model od 24 zone napravljena je analiza utjecaja veličine proračunskog koraka na rezultate proračuna i to pomoću oba seta proračunskih konstanata.

Utjecaj koraka uz primjenu konstanata SET 1.

Iz slike 39. na kojoj je pokazan profila tlaka u cilindru u ovisnosti o kutu zakreta koljenastog vratila može se zaključiti da su rješenja gotovo jednaka, bez obzira koji je proračunski korak primijenjen. Obzirom da se proračunskim model izračunava samo izgaranje, na slici 40. pokazan je uvećano samo relevantan dio krivulje tlaka te se vidi da su međusobna odstupanja krivulja minimalna, odnosno da je utjecaj proračunskog koraka na profil tlaka od sekundarnoga značaja.



Slika 39. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 24 zone i konstanata SET 1



Slika 40. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 24 zone i konstanata SET 1 – uvećano u području GMT

Utjecaj koraka uz primjenu konstanata SET 2.

U ovom slučaju je iznos vremenske konstante izmjene topline između zona smanjen 5,3 puta u odnosu na SET 1 tj. na vrijednost ZHTC = 0,00015 s, a korekcijski faktor izmjene topline je povećan za 27 %, odnosno na vrijednost WHT = 1,4. (Utjecaj obih veličina, i vremenske konstante izmjene topline između zona i korekcijskog faktora, bit će prikazan nešto kasnije.) Smanjivanje konstante ZHTC znači da je izmjena topline između zona modela intenzivnija. Veći korekcijski faktor WHT znači da je izmjena topline između radne tvari i stijenki prostora izgaranja također veća. Rezultat ovako odabranih konstanata je intenzivnija interakcija između zona modela, a cilj je ispitati utječe li promjena proračunskog koraka na rezultate simulacija i u slučaju intenzivnije interakcije između zona. Na slici 41. taj utjecaj nije uočljiv. Ako se uveća područje oko GMT može se vidjeti da odstupanja postoje (slika 42.), ali nisu velika.



Slika 41. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 24 zone i konstanata SET 2



Slika 42. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 24 zone i konstanata SET 2 – uvećano u području GMT

Model s 24 zone – utjecaj na vrijeme izračuna

Smanjivanjem proračunskog koraka produžuje se vrijeme izračuna. Tablicama 5. i 6. pokazana su vremena izračuna ukupno 10 radnih ciklusa proračunskog modela koji su bili podijeljeni na sljedeći način:

- 7 ciklusa jednozonskog modela (u kojima su izračunati početni uvjeti za višezonski model) i
- 3 ciklusa višezonskog modela da bi se postigla konvergencija rezultata.

Obzirom da su odstupanja za oba seta proračunskih konstanata SET 1 i SET 2 minimalna i podjednaka (usporedi slike 40. i 42.), za proračune se može koristiti najveći proračunski korak što značajno ubrzava vrijeme izračuna. Ako se ipak želi izbjeći možebitna pogreška nastala uslijed prevelikog proračunskog koraka, model se prethodno može podesiti (kalibrirati) s većim proračunskim korakom, a potom se proračun ponovi s manjim proračunskim korakom.

Konstante	Proračunski korak Δα, °KV	Vrijeme izračuna <i>t</i> , s	Omjer vremena izračuna
SET 1	0,5	1063	1
	0,25	1567	1,5
	0,1	2934	2,8
	0,05	5010	4,7

Tablica 5. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 24 zone, SET 1

Tablica 6. Vrijeme izračuna ovisno o pro	računskom koraku za	model s 24 zone, SET 2
--	---------------------	------------------------

Konstante	Proračunski korak Δα, °KV	Vrijeme izračuna t, s	Omjer vremena izračuna
SET 2	0,5	697	1
	0,25	1166	1,7
	0,1	2402	3,5
	0,05	4341	6,2

Model s 36 zona – utjecaj na profil tlaka u cilindru

Slikom 43. prikazan je tlak u cilindru za čitav radni ciklus, a slikom 44. prikazano je uvećano područje oko GMT. Vidljivo je da sa smanjivanjem proračunskog koraka postoje određena odstupanja. Rezultati proračunskih koraka $\Delta \alpha = 0.05$ °KV i $\Delta \alpha = 0.1$ °KV su identični i između njih nema odstupanja, ali između tih rezultata i onih kod proračunskog koraka $\Delta \alpha =$ 0,5 °KV postoje odstupanja koja su posljedica razdvojenog načina izračuna, odnosno izmjene mase između zona modela. Očito je da je s manjim proračunskim korakom mase izmjena učestalija. Obzirom da se proračun izgaranja provodi bez izmjene mase između zona modela, kod smanjenja proračunskog koraka, u određenoj zoni modela može se pojaviti kemijski spoj koji je u tu zonu ušao uslijed izmjene mase između zona, pa nakon izmjene mase on sudjeluje u kemijskim reakcijama odnosno u izgaranju u toj zoni. Zbog toga je sa smanjenjem proračunskog koraka krivulja tlaka nešto strmija od trenutka od kad započne izgaranje, ali isto tako nisu uočljiva kasna zapaljenja nekih (rubnih) zona kakva postoje kod modela s proračunskim korakom $\Delta \alpha = 0.5$ °KV, što se pokazuje kao skokovi na krivulji tlaka na slici 44. oko 364°KV (krivulja CS 05). Isto se opaža i kod konstanata SET 2 modela s 36 zona. Kod konstanata SET 2 je promijenjena vrijednost vremenske konstante izmjene topline između zona modela ZHTC i vrijednost korekcijskog faktora WHT ukupnog prijelaza topline na stijenke prostora izgaranja, rezultati su pokazani slikama 45. i 46. Može se zaključiti da, za razliku od modela s 24 zone u kojem su međusobna odstupanja tlaka za različite proračunske korake bila zanemariva, kod 36-zonskog modela ona značajno ovise o proračunskom koraku.



Slika 43. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 36 zona i konstanata SET 1



Slika 44. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 36 zona i konstanata SET 1 – uvećano u području GMT



Slika 45. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 36 zona i konstanata SET 2



Slika 46. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 36 zona i konstante SET-2 – uvećano u području GMT

Model s 36 zona – utjecaj na vrijeme izračuna

Tablicama 7. i 8. pokazana su vremena izračuna istih 10 radnih ciklusa kao u slučaju modela s 24 zone. Usporede li se rezultati za oba seta proračunskih konstanata SET 1 i SET 2 (slike 44. i 46.), opet se zaključuje da se zadovoljavajuća točnost postiže s najvećim korakom koji daje i najkraće vrijeme računanja, a za veću točnost se može primijeniti finiji korak na isti način kao i kod 24-zonskog modela.

	Tablica 7. Vrijem	e izračuna ovis	sno o proračun	skom koraku za	model s 36 zona	(SET 1)
--	-------------------	-----------------	----------------	----------------	-----------------	---------

Konstante	Proračunski korak Δα, °KV	Vrijeme izračuna <i>t</i> , s	Omjer vremena izračuna
SET 1	0,5	1178	1
	0,25	2088	1,78
	0,1	4741	4
	0,05	7519	6,4

Tablica 8. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 36 zona (SET 2)

Konstante	Proračunski korak Δα, °KV	Vrijeme izračuna <i>t</i> , s	Omjer vremena izračuna
SET 2	0,5	1141	1
	0,25	1923	1,7
	0,1	4420	3,9
	0,05	7492	6,6

Model s 12 zone – utjecaj na profil tlaka u cilindru

Predloženi model izveden je da omogućuje proizvoljan broj zona modela, pa je utjecaj proračunskog koraka osim na većem broju zona (24 i 36) analiziran i na manjem broju zona, točnije na modelu s 12 zona, s istim setom parametara.



Slika 47. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstanata SET 1



Slika 48. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstante SET 1 – uvećano u području GMT

Za model s 12 zona isto kao i za model s 36 zona za zadani set konstanti SET 1 mogu se uočiti određena odstupanja u krivulji tlaka u cilindru s promjenom proračunskog koraka. Kod modela s 36 zona odstupanja su bila izražena u trenutku početka izgaranja, kod 12 zonskog modela tih odstupanja nema, ali ona zato postoje u kasnijoj fazi izgaranja. Na krivulji tlaka može se uočiti lom krivulje u području GMT (slika 48.), koji je objašnjiv kao posljedica nepravilne izmjene topline između zona i relativno malog broja zona pa se izgaranje inicira u rubnim zonama modela nakon što one prime toplinu od unutarnjih zona. To se na slici vidi kao skok u krivulji tlaka. Kod malog proračunskog koraka ($\Delta \alpha = 0,01$ °KV), isto tako postoji lom u krivulji tlaka, ali se skok u krivulji tlaka, kao posljedica izgaranja u rubnim zonama, javlja ranije što je posljedica izmjene mase između zona modela pri manjem proračunskom koraku.

Analiza utjecaja proračunskog koraka sa setom konstanti SET 2 napravljena je i za model s 12 zona. Za taj set parametara u modelu s 12 zona uopće nije došlo do izgaranja, jer su parametri ZHTC i WHT očito neodgovarajući za taj model. Parametar WHT podešen na vrijednost 1,4 znači intenzivniju izmjenu topline sa stijenkama prostora izgaranja, što u kombinaciji s vrlo malom vrijednošću parametra WHT, odnosno s intenzivnom izmjenom topline između zona uzrokuje vrlo intenzivno hlađenje prostora izgaranja zbog čega su temperature niske i ne može doći do pojave samozapaljenja pa izgaranje izostaje (slika 49.). Zbog toga je set parametara za model s 12 zona promijenjen. Konstante WHT i ZHTC prilagođene su modelu s 12 zona na način da su obje konstante smanjene u odnosu na SET 2. Vrijednosti parametara dane su tablicom 9.

Broj zona	Proračunski korak Δα, °KV		SET 3
12	0,5 0,25	ZHTC (s)	50·10 ⁻⁵
	0,1 0,05	WHT	1,25

Tablica 9. Proračunski parametri verifikacije modela s 12 zona

I sa konstantama SET 3 i dalje se mogu uočiti nepravilnosti u krivulji tlaka kakve su primijećene i sa konstantama SET 1, ali su u ovom slučaju rezultati grupirani. Na slici 51. gdje je pokazano uvećano područje oko GMT vrlo dobro se može uočiti međusobno podudaranje rezultata sa većim proračunskim korakom i međusobno podudaranje rezultata s manjim proračunskim korakom.

Analizom utjecaja proračunskog koraka na rezultate profila tlaka za model s 12 zona može se zaključiti da ni jedan set konstanti ne odgovara tom proračunskom modelu i da je vrijednost vremenske konstante izmjene topline između zona modela potrebno prilagoditi proračunskom modelu ovisno o broju zona modela.



Slika 49. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstanata SET 2



Slika 50. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstanata SET 3



Slika 51. Verifikacija modela: utjecaj proračunskoga koraka (0,5 do 0,05 °KV) na profil tlaka kod modela s 12 zona i konstante SET 3 – uvećano u području GMT

Model s 12 zona – utjecaj na vrijeme izračuna

Tablicama 10. i 11. pokazana su vremena izračuna za model s 12 zona za proračunske konstante SET 1 i SET 3.

Tablica 10. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 12 zona (SET 1)

Konstante	Proračunski korak Δα, °KV	Vrijeme izračuna <i>t</i> , s	Omjer vremena izračuna
SET 1	0,5	624	1
	0,25	1005	1,61
	0,1	1872	3
	0,05	3682	5,9

Tablica 11. Vrijeme izračuna ovisno o proračunskom koraku za model s 12 zona (SET 3)

Konstante	Proračunski korak Δα, °KV	Vrijeme izračuna <i>t</i> , s	Omjer vremena izračuna
SET 3	0,5	560	1
	0,25	924	1,65
	0,1	1869	3,3
	0,05	3352	6,0

5.2. Utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona

Izmjena topline između zona opisana je u poglavlju 4.4. Zbog načina na koji je izmjena topline opisana, u izrazu za izračun izmjene topline između zona (4.45) pojavljuje se vremenska konstanta ZHTC izmjene topline između zona. Što je vrijednost te konstante manja to će izmjena topline između zona modela biti veća. Utjecaj vremenske konstante izmjene topline na proračunski model ispitan je tako da je za određenu radnu točku u modelu mijenjana samo veličina vremenske konstante, dok su svi ostali parametri bili konstantni. Budući da se sa smanjivanjem vrijednosti konstante izmjene topline povećava izmjena topline između zona modela, može se očekivati da će toplije zone koje se nalaze u središtu prostora izgaranja više topline predati rubnim zonama, odnosno one će se brže hladiti, a rubne zone će se brže zagrijavati. Na taj način će smjesa biti temperaturno homogenija. Utjecaj vremenske konstante ZHTC na profil tlaka u cilindru pokazan je slikama 52. i 53.

Tablica 12. Vrijednosti vremenske konstante izmjene topline između zona za verifikaciju modela s 24 zone

Varijanta	V0	V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7
ZHTC, s	2,5.10-5	5·10 ⁻⁵	10.10-5	20.10-5	30·10 ⁻⁵	40.10^{-5}	50·10 ⁻⁵	70·10 ⁻⁵



Slika 52. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona ZHTC na tlak u cilindru (model s 24 zone, WHT = 1,1)

Ako se uveća dio krivulje tlaka oko GMT lako se može uočiti da sa smanjivanjem vremenske konstante za iste uvjete temperature i tlaka na usisu, kao i iste temperature stijenki prostora izgaranja, i jednake uvjete izmjene topline sa stijenkama, dolazi do pomicanja krivlje tlaka udesno odnosno do kasnijeg zapaljenja smjese. Razlog tome je smanjenje temperature u središnjim zonama. Kada je vrijednost vremenske konstante veća, središnje zone su toplije i u njima ranije dolazi do samozapaljenja smjese. Nakon što izgaranje započne u zoni u kojoj su stvoreni uvjeti samozapaljenja smjese, toj zoni se naglo mijenja tlak i ona dodatno komprimira ostale zone, u kojima se zbog porasta temperature inicira samozapaljenje.



Slika 53. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona ZHTC na tlak u cilindru (model s 24 zone, WHT = 1,1) – uvećano u području GMT

Za varijantu V0 slikom 54. pokazana je raspodjela temperatura po zonama modela. Linijom točka-crta pokazana je srednja temperatura u cilindru. Lako se može uočiti da sve zone modela nakon što započne izgaranje imaju gotovo jednake temperature, što je posljedica intenzivne izmjene topline. Isto tako se na krivulji tlaka (slika 53.) uočava porast na približno 14 °KV iza GMT (374 °KV), koji je posljedica zapaljenja smjese u rubnim zonama. To se pak na dijagramu temperature (slika 54.) uočava kao šiljasti vrhovi rubnih zona s vršnom temperaturom od 2300 K (krivulje dviju od pet rubnih zona se gotovo potpuno podudaraju).



Slika 54. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline $ZHTC = 2,5 \cdot 10^{-5}$ (s) na temperature pojedinih zona i srednju temperaturu cilindra (24 zone, WHT = 1,1)



Slika 55. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline $ZHTC = 70 \cdot 10^{-5}$ (s) na temperature pojedinih zona i srednju temperaturu cilindra (24 zone, WHT = 1,1)

Za razliku od varijante V0 gdje je vrijednost vremenske konstante izmjene topline relativno malena ($ZHTC = 2,5\cdot10^{-5}$ s), kod varijante V7 je vremenska konstanta 28 puta veća ($ZHTC = 70\cdot10^{-5}$ s). Zbog toga je za iste uvjete kao u slučaju V0 izmjena topline između zona manja. Posljedica toga je da su, zbog ove manje intenzivne interakcije između zona, središnje zone toplije, grupirane su zasebno tj. odvojene su od rubnih zona u kojima je temperatura bitno manja zbog izmjene topline tih zona sa stijenkama prostora izgaranja (hlađenje), što je

pokazano slikom 55. Zbog takve temperaturne raspodjele izgaranje započinje u toplim središnjim zonama, dakle ranije nego kod varijante V0, a nisu uočeni ni skokovi u profilu tlaka kakvi su uočeni kod V0. Srednja temperatura prikazana je linijom točka-crta. Kod varijante V7 vidljiv je nagli porast srednje temperature kao posljedice naglog izgaranja u središnjim zonama, dok je u slučaju V0 porast srednje temperature blaži (slika 54.).



Slika 56. Verifikacija modela: utjecaj vremenske konstante izmjene topline između zona ZHTC na brzinu oslobađanja topline. Kod zelene krivulje konstanta je 28 puta veća

Usporednim prikazom brzine oslobađanja topline za obje varijante vidljivo je da je u slučaju veće vremenske konstante vršna vrijednost brzine oslobađanja topline dvostruko veća nego kod manje vremenske konstante kod koje postoji intenzivna izmjena topline između zona. (slika 56.)

5.3. Utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke prostora izgaranja

Korekcijski faktor prijelaza topline na stijenke WHT koristi se kako bi se, za pojedinu stijenku ili cijeli prostor izgaranja, modelom izračunati prijelaz topline mogao podesiti da odgovara izmjerenom. Korekcijski faktor WHT djeluje kao multiplikator na modelom izračunati prijelaz topline i tako intenzivira ili smanjuje intenzitet izmjene topline između radne tvari i stijenki prostora izgaranja. Kod višezonskog modela, on prije svega djeluje na rubne zone jer su one u kontaktu sa stijenkama prostora izgaranja, a indirektno i na ostale, jer se toplina koja se izmjenjuje između stijenki i rubne zone djelomično nadoknađuje izmjenom

topline između zona modela. Mijenjanjem faktora WHT utječe se na raspodjelu temperature u prostoru izgaranja. Povećanjem faktora WHT veća je izmjena topline sa okolišem, što će kod HCCI motora imati utjecaj na početak izgaranja. On se pomiče udesno odnosno na kasnije, što je uočljivo i na krivulji tlaka u cilindru pokazanom slikom 58. Osim na početak izgaranja, faktor WHT utječe na profil tlaka u cilindru, s povećanjem WHT tlak u cilindru je niži (zelena krivulja) nego kod manjeg WHT (plava krivulja), a posljedica je jačeg hlađenja cijelog cilindra.



Slika 57. Verifikacija modela: utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke WHT na tlak u cilindru (model s 24 zone, $ZHTC = 2,5 \cdot 10^{-5}$)



Slika 58. Verifikacija modela: utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke WHT na tlak u cilindru (model s 24 zone, $ZHTC = 2,5 \cdot 10^{-5}$) – uvećano u području GMT



Slika 59. Verifikacija modela: utjecaj korekcijskog faktora prijelaza topline na stijenke WHT na tlak u cilindru (model s 24 zone, $ZHTC = 1,0.10^{-3}) - uvećano u području GMT$



Slika 60. Verifikacija modela: usporedni prikaz utjecaja korekcijskog faktora WHT ovisno o ZHTC na tlak u cilindru za model s 24 zone, uvećano u području GMT

Slikom 60. je pokazano da se intenzivnijom izmjenom topline između zona dodatno pomiče krivulja tlaka u desno, jer više topline prelazi iz središnjih zona u rubne, koje opet toplinu predaju stijenkama prostora izgaranja.

5.4. Utjecaj temperature usisa

Izgaranje u HCCI motoru ovisi isključivo o kemijskim reakcijama odnosno kemijskoj kinetici. Zbog toga je jedan od glavnih parametara koji utječu na početak i daljnji tijek izgaranja upravo temperatura u cilindru motora koja inicira samozapaljenje smjese. Na temperaturu u cilindru motora direktan utjecaj ima temperatura usisa.



Slika 61. Verifikacija modela: utjecaj temperature usisa na tlak u cilindru



Slika 62. Verifikacija modela: utjecaj temperature usisa na krivulju tlaka u cilindru – uvećano u području GMT

S porastom temperature usisa, paljenje se pomiče prema naprijed, odnosno s povećanom temperaturom usisa ranije dolazi do samozapaljenja smjese. Tijekom verifikacije modela i ispitivanja utjecaja temperature na ponašanje modela, svi parametri modela bili su jednaki, jedino se mijenjala temperatura usisa s vrijednosti $T_{us} = 180$ °C do vrijednosti $T_{us} = 220$ °C. Slikom 61. prikazana je krivulja tlaka u ovisnosti o zakretu KV za model s 24 zone, a uvećano područje oko GMT pokazano je slikom 62. U uvećanom prikazu uočljivo je da za se za razliku temperature $\Delta T = 40$ °C paljenje pomiče prema naprijed za oko 5 °KV.

Pomak početka izgaranja dobro je uočljiv i na dijagramu brzine oslobađanja topline pokazanom slikom 63. Dijagramom su pokazane brzine oslobađanja topline za dvije različite temperature zraka usisa: $T_{us} = 180$ °C i $T_{us} = 220$ °C. U slučaju više temperature usisa, osim što izgaranje započinje ranije, veća je i vršna vrijednost brzine oslobađanja topline u odnosu na slučaj s nižom temperaturom usisa. Isto tako u slučaju više temperature usisa, većina topline oslobodi se odjednom, dok je u slučaju niže temperature usisa zamjetna pojava naknadnog samozapaljenja goriva, što se na dijagramu brzine oslobađanja topline vidi oko 5 °KV nakon početka glavnog izgaranja.



Slika 63. Verifikacija modela: usporedni prikaz brzina oslobađanja topline za dvije različite temperature usisa, T_{us} = 180 °C i T_{us} = 220 °C – uvećano u području GMT

5.5. Utjecaj tlaka usisa

Zadnja točka verifikacije je ispitivanje utjecaja tlaka usisa na ponašanje modela. Uporaba prednabijanja jedna je od najefikasnijih mjera za povećanje snage motora, a kod HCCI motora je zbog siromašne i razrijeđene smjese prednabijanje je jedan od načina za proširenje radnog područja motora u područje visokog opterećenja. Slikom 64. pokazani su profili tlaka u cilindru ovisno o tlaku usisa. Isto uvećano u području GMT pokazano je slikom 65.



Slika 64. Verifikacija modela: utjecaj tlaka usisa na krivulju tlaka u cilindru



Slika 65. Verifikacija modela: utjecaj tlaka usisa na krivulju tlaka u cilindru – uvećano u području GMT

Da bi se mogao analizirati utjecaj tlaka usisa na ponašanje modela provedeno je parametarsko ispitivanje modela, pri čemu su svi parametri modela držani na konstantnim vrijednostima, a mijenjao se samo tlak usisa. Vrijednost tlaka mijenjana je u rasponu od 0,1 MPa do 0,275 MPa s korakom od 0,025 MPa. Međutim s promjenom tlaka usisa mijenja se i stupanj punjenja motora. To znači da s promjenom tlaka usisa nužno mora doći i do promjene faktora pretička zraka ili do promjene količine goriva da bi faktor pretička zraka ostao konstantan. U ovoj analizi zadržan je stalan faktor pretička zraka što znači da se s povećanjem tlaka usisa mijenja i količina ubrizganog goriva. Uz to, povećani tlak usisa za iste radne uvjete znači i povišen tlak i temperaturu na kraju procesa kompresije. Oba efekta, povećana količina goriva uslijed istog faktora pretička zraka te viša temperatura i tlak na kraju kompresije dovode do pomicanja točke zapaljenja prema naprijed tj. izgaranje nastupa ranije. Utjecaj tlaka usisa na početak izgaranja može se vidjeti i na slici profila tlaka u području GMT za osam različitih vrijednosti tlaka usisa (slika 65.). Zelenom linijom pokazan je profil tlaka za vrijednosti tlaka usisa od 0,1 MPa, što praktički odgovara atmosferskom tlaku. Kod takvih uvjeta izgaranje je praktički izostalo, što se može vidjeti i na dijagramu brzine oslobađanja topline (slika 66.). S druge strane za tlak usisa 0,275 MPa (pokazan smeđom linijom) vršna vrijednost tlaka u cilindru motora iznosi gotovo 20 MPa, što znači veće mehaničko opterećenje dijelova motora, a uzrokuje i veće mehaničke gubitke. Veće mehaničko opterećenje motora zahtijeva robusniju konstrukciju, što obično povećava masu motora.



Slika 66. Verifikacija modela: usporedni prikaz brzina oslobađanja topline za tri različite vrijednosti tlaka usisa – uvećano u području GMT

Osim utjecaja na profil tlaka u cilindru, slikom 66. pokazan je i utjecaj tlaka usisa na brzinu oslobađanja topline, za tri različite vrijednosti tlaka usisa (0,1, 0,175 i 0,225 MPa). Zbog konstantnog faktora pretička zraka, promjena tlaka usisa, a time i količine goriva značajno utječe na brzinu oslobađanja topline. Kod najmanjeg tlaka izgaranje započinje oko 10 °KV poslije GMT, ali iako je došlo do samozapaljenja smjese i pojave kemijskih reakcija, brzina oslobađanja topline i oslobođena toplina su vrlo mali pa se smatra da je u tom slučaju došlo do izostanka izgaranja. Da bi za te radne uvjete i takav tlak usisa moglo doći do pojave samozapaljenja smjese i izgaranja bilo bi potrebno povisiti temperaturu usisa. Za slučaj vrijednosti tlaka usisa 0,175 MPa izgaranje započinje oko 1 °KV prije GMT, dok za vrijednost tlaka usisa 0,225 MPa ono započinje oko 4 °KV prije GMT. Razlika tlaka za navedene slučajeve od 0,05 MPa uzrokuje pomak paljenja prema naprijed za oko 3 °KV, ali istovremeno uslijed veće količine goriva pri konstantnom omjeru faktora pretička zraka vršna vrijednost brzine oslobađanja topline za slučaj višeg tlaka usisa je za oko 50 % veća u odnosu na slučaj s 0,05 MPa nižim tlakom usisa. Zbog toga se primjenom višeg tlaka usisa za isti trenutak početka izgaranja može smanjiti temperatura zraka usisa.

6. Validacija i primjena simulacijskog modela

Nakon provedene verifikacije proračunskog modela napravljena je validacija, kako bi se utvrdilo koliko dobro izrađeni model može opisati stvarne pojave koje se javljaju tijekom izgaranja u HCCI motoru. Validacija simulacijskog modela provedena je temeljem eksperimentalnih podataka dobivenih od Laboratorija za analizu izgaranja, Sveučilišta u Kaliforniji (*Combustion Analysis Laboratory, University of California at Berkeley*).

Svi eksperimentalni rezultati prikupljeni su mjerenjima na motoru prepravljenom za rad s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem [88], [89]. Motor je nastao preinakom četverotaktnog, četiri cilindarskog, vodom hlađenog Dieselovog motora s izravnim ubrizgavanjem goriva, proizvođača Volkswagen. Tehničke značajke motora prije i poslije preinaka potrebnih za rad u HCCI načinu dane su u tablici 13.

	Prije preinaka	Poslije preinaka	
Najveća snaga motora, kW	60	_	
Brzina vrtnje kod najveće snage, min ⁻¹	3300	_	
Najveći okretni moment motora, Nm	210	—	
Brzina vrtnje kod najvećeg momenta, min ⁻¹	1800	_	
Radni volumen, cm ³	18	90	
Kompresijski omjer, -	19,5	16,7	
Promjer × hod klipa, mm	79,5 × 95,5		
Duljina klipnjače, mm	m 144		
Redoslijed paljenja	1-3-4-2		
Broj ventila, (usisnih, ispušnih)	2, (1, 1)		
Trenutak otvaranja usisnog ventila (UVO)	2 °KV prije GMT		
Trenutak zatvaranja usisnog ventila (UVZ)	47,5 °KV nakon DMT		
Trenutak otvaranja ispušnog ventila (IVO)	47,5 °KV prije DMT		
Trenutak zatvaranja ispušnog ventila (IVZ)	(IVZ) 8 °KV nakon GMT		
Izgled čela klipa	duboko udubljenje	plitko udubljenje	
Priprema zraka	turbopunjač	vanjski kompresor i grijač zraka	

Tablica 13. Tehničke značajke motora korištenog za mjerenja, prije i poslije preinaka

Da bi mogao raditi u HCCI načinu rada, originalni klip s dubokim udubljenjem, karakterističan za Dieselove motore s izravnim ubrizgavanjem, zamijenjen je relativno ravnim klipom s plitkim udubljenjem. Time je, smanjen prijelaz topline na stijenke klipa, jer je površina klipa koja je u dodiru s plinovima u cilindru smanjena za oko 15 % [89]. Promjena geometrije klipa utjecala je i na kompresijski omjer koji je smanjen s 19,5 na 16,7. Turbopunjač je zamijenjen vanjskim kompresorom snage 74 kW i spremnikom zraka volumena 6 m³ kako bi se osigurala dovoljna opskrba zrakom odgovarajućeg tlaka. Za zagrijavanje usisavanog zraka na motor je dograđen električni grijač nazivne snage 18 kW. Za precizno podešavanje temperature usisa za svaki cilindar posebno, na motor je dograđeno tzv. brzo temperaturno upravljanje (engl. *Fast Thermal Management*), koje se sastoji od četiri elektronički regulirane zaklopke koje omogućuju miješanje zagrijavanog i nezagrijavanog zraka i time vrlo brzu i preciznu regulaciju temperature usisa.



Slika 67. Shematski prikaz eksperimentalnog postava [89]

Eksperimentalnim postavom ispitivana je mogućnost primjene HCCI motora pogonjenog bioplinom za pogon generatorskog seta, pa je motor spojen na generator izmjenične struje, a sva mjerenja provedena su pri stalnoj brzini vrtnje od 1800 min⁻¹. Bioplin nastaje anaerobnom razgradnjom odnosno fermentacijom tvari organskog porijekla. Uobičajeno se sastoji od 50 % do 70 % metana (CH₄) i 25 do 50 % CO₂, uz vrlo male udjele vodika (H₂) od 1 % do 5 % i dušika (N₂) od 0,3 % do 3 %. Za potrebe eksperimentalnih istraživanja bioplin je simuliran korištenjem CH₄ i CO₂ iz plinskih boca i njihovim miješanjem u volumnim udjelima 60 %

 CH_4 i 40 % CO_2 . Za mjerenje protoka CH_4 i CO_2 te održavanje zahtijevanog sastava korištene su umjerene mjerne prigušnice. Za svaki cilindar mjereni su tlak i temperatura usisa na udaljenosti od oko 20 cm ispred usisnog ventila. Tlak u svakom cilindru ovisno o kutu zakreta koljenastog vratila mjeren je piezoelektričkim senzorom tlaka, a položaj koljenastog vratila mjeren je s rezolucijom od 0,5 °KV. Analizatorom ispušnih plinova mjerena je emisija CO, CO_2 , HC i NO_X. Sva mjerna oprema spojena je na računalo za prikupljanje podataka. Eksperimentalni postav shematski je pokazan slikom 67.

Tijekom eksperimentalnih istraživanja samo su drugi i treći cilindar bili pogonjeni bioplinom, dok su prvi i četvrti cilindar pogonjeni motornim benzinom da bi se blok motora održavao na odgovarajućoj radnoj temperaturi. Za svaku radnu točku izmjerene su temperatura i tlak usisa, faktor pretička zraka, srednji indicirani tlak te emisije štetnih tvari. Osrednjeni rezultati ispitivanja 300 ciklusa za tri radne točke dani su u tablici 14.

Radna točka	1	2	3
Temperatura usisa <i>T</i> _{us} , K	483	483	483
Faktor pretička zraka λ, –	3,5	4,76	5,26
Tlak usisa $p_{\rm us}$, bar	2,2	2,2	2,2
Osrednjeni vršni indicirani tlak, bar	133	110	103
Srednji indicirani tlak IMEPg, bar	6,4	4,7	4,4
Emisija HC, ppm <i>m/m</i>	2475	2658	2867
Emisija CO, ppm <i>m/m</i>	2018	2564	2848
Emisija NOx, ppm <i>m/m</i>	13,3	0,59	0,56

Tablica 14. Osrednjeni rezultati ispitivanja 300 ciklusa za tri radne točke [88]

Prema tehničkim značajkama motora i podacima dobivenim mjerenjima, izrađen je simulacijski model ispitivanog motora u programskom paketu AVL BOOST, shematski prikazan slikom 68. Obzirom da su tijekom eksperimenta samo dva cilindra pogonjena bioplinom, a rezultati dobiveni indiciranjem i mjerenjem emisija za svaki cilindar posebno, nije bilo potrebno modelirati motor sa sva četiri cilindra, već je simulacijski model izveden kao jednocilindarski motor s odgovarajućim dimenzijama usisnog i ispušnog sustava. Model motora u programskom paketu AVL BOOST sastoji se sljedećih elemenata: motor (E1), cilindar (C1), usisne i ispušne cijevi označene brojevima 1 do 4, ograničenja protoka (R1, R2) rubni uvjeti (SB1, SB2) i mjerne točke (MP1 do MP4).



Slika 68. Shematski prikaz simulacijskog modela eksperimentalnog motora u programskom paketu AVL BOOST

U elementu motor (E1) definiraju se osnovni parametri motora koji se modelira: tip motor, broj taktova, redoslijed paljenja, brzina vrtnje te gubici trenja. U elementu cilindar (C1) zadaju se svi parametri koji definiraju prostor izgaranja, kao što su dimenzije prostora izgaranja, karakteristike klipnog mehanizma, kompresijski omjer, model za izračunavanje procesa izgaranja, model izmjene topline sa stijenkama te karakteristike ventilskog mehanizma (trenutak i profil krivulje otvaranja i zatvaranja ventila). Za svaki od elemenata cijevi (1 do 4) određuju se karakteristične dimenzije i podaci potrebni za proračun strujanja u cijevima, a ograničenjima (R1 i R2) na određenom dijelu cijevi modelira se pada tlaka uzrokovan geometrijom ili promjenama u promjeru cijevi. Rubni uvjeti (SB1 i SB2) koriste se kako bi se model povezao s okolišnim uvjetima: tlakom, temperaturom i sastavom radne tvari. Rubni uvjeti mogu biti zadani kao stalne vrijednosti ili u ovisnosti o vremenu odnosno zakretu koljenastog vratila. Da bi se osigurala usporedivost sa izmjerenim rezultatima, rubni uvjeti moraju biti podešeni tako da stanje radne tvari na početku visokotlačnog dijela procesa odgovara izmjerenim podacima. Mjernim točkama na cijevima (MP1 do MP4) omogućuje se očitavanje podataka o strujanju i stanju plina u cijevima kao što su maseni ili volumni protok, tlak, temperatura i sastav plina. Izgaranje se izračunava kemijskom kinetikom, a bioplin je modeliran kemijskim mehanizmom za prirodni plin GRI-Mech 3.0 [63] koji se sastoji od 53 kemijska spoja i 325 kemijskih reakcija.

6.1. Validacija modela s 24 zone

Validacija modela provedena je na način da je na jednoj radnoj točci analiziran set parametara kojima se simulacijski model podesio tako da se profil tlaka dobiven simulacijom što bolje podudara s eksperimentalnim rezultatima, pri čemu je bitno da početak izgaranja simulacijskog modela odgovara eksperimentalnom. Obzirom da se različitim setovima

parametara mogu postići gotovo jednaki rezultati u podudaranju krivulje tlaka i eksperimentalnih podataka, kako bi se odabrao optimalan set parametara s kojim će se analizirati i ostale radne točke, za odabrane setove parametara analizirane su i vrijednosti emisija štetnih tvari. Podaci o radnoj točci na kojoj je napravljeno podešavanje modela (radna točka 1) dani su tablicom 14., a podaci o parametrima modela koji su mijenjani prilikom validacije i podešavanja modela dani su u tablici 15. Osim s eksperimentalnim rezultatima, model je validiran s referentnim modelom. Referentni model s kojim su uspoređeni rezultati je šest zonski model s istovremenim rješavačem [35]. Referentni model je višestruko validiran i primijenjen na različitim motorima pogonjenim različitim gorivima tako da se rezultati dobiveni referentnim modelom mogu smatrati mjerodavnim. Profili tlaka izračunati simulacijskim modelima i eksperimentalno izmjeren profil tlaka za cijeli radni ciklus pokazani su slikom 69.

	WHT, -	ZHTC, s	T _{us} , K
SET 1	1,15	8,00.10-5	473,15
SET 2	1,2	7,00.10-5	478,15
SET 3	1,15	7,80·10 ⁻⁵	473,15
SET 4	1,18	6,80·10 ⁻⁵	473,15

Tablica 15. Parametri modela s 24 zone za validaciju radne točke 1



Slika 69. Validacija modela s 24 zone: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima



Slika 70. Validacija modela s 24 zone: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT

Područje oko GMT uvećano je prikazano slikom 70. Iz slike se jasno može uočiti da se korištenjem modela s 24 zone s bilo kojim od četiri seta parametara modela postiže bitno bolje podudaranje s eksperimentalnim rezultatima u odnosu na referentni model sa 6 zona.

Obzirom da je iz krivulja tlaka teško odrediti koji je set parametara modela najbolji za daljnja istraživanja, sa svakim od njih izračunate su emisije štetnih tvari, a rezultati su uspoređeni s vrijednostima emisija izmjerenih eksperimentalnim istraživanjima i simulacijskim rezultatima izračunatih referentnim 6 zonskim modelom.

	CO ppm <i>m/m</i>	∆% od izmjerenog	НС ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog	NO _X ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog
SET 1	1391,5	-31,0	3073,2	24,2	5,9	-55,6
SET 2	1652,9	-18,1	2863,2	15,7	44,8	236,5
SET 3	1616,7	-19,9	2896,8	17,0	50,1	276,9
SET 4	2030,0	0,6	2418,0	-2,3	29,0	118,3
Ref. 6Z	218,3	-89,2	347,1	-86,0	45,2	239,5
Izmjereno	2018,0		2475,0		13,3	

Tablica 16. Validacija modela s 24 zone: emisije štetnih tvari izračunate simulacijskim modelima i izmjerene ispitivanjem motora

Ako se analiziraju emisije štetnih tvari može se zaključiti da se korištenjem modela s 24 zone emisije štetnih tvari mogu predvidjeti puno bolje nego referentnim modelom sa 6 zona. Glavni razlog tome je povećanje broja zona modela, čime je omogućena veća temperaturna raspodjela u prostoru izgaranja, što je posebno bitno za predviđanje emisija HC i CO. Rezultati emisija pokazani su slikom 71. i tablicom 16.



Slika 71. Validacija modela s 24 zone: usporedni prikaz emisija štetnih tvari

Najbolji rezultati u pogledu određivanja emisija štetnih tvari izračunati su s parametrima modela SET 4. Odstupanje izračunatih emisija CO u odnosu na eksperiment manje je od 1 %, dok je odstupanje emisije HC manje od 5%. Kod izračuna emisija NO_X odstupanja su veća, ali kako su kod HCCI motora bitno veće emisije HC i CO, opravdano je simulacijski model podesiti tako da te emisije predviđa bolje.

Zbog relativno visoke emisije NO_X u 24 zonskom modelu s parametrima SET 4, dodatno je analizirana temperaturna raspodjela u prostoru izgaranja te je uspoređena s rezultatima za SET 1 kod kojeg je emisija NO_X bitno niža. Slikom 72. pokazana je raspodjela temperatura u području GMT za SET 4, a slikom 73. za SET 1. Srednja temperatura u cilindru gotovo je podjednaka (pokazana crta točka crvenom linijom na obje slike). U slučaju SET 4, nakon što izgaranje završi u fazi ekspanzije javljaju se u pojedinim zonama naknadna dogorijevanja uslijed kojih temperatura naraste iznad 1800 K. Ta temperatura smatra se granicom za stvaranje emisije NO_X , koja isključivo ovisi o vršnim temperaturama u prostoru izgaranja. U slučaju SET 1 takvih područja s naknadnom vršnom temperaturom preko 1800 K nema, zbog čega je i emisija NO_X u tom slučaju manja. Isto tako je u slučaju modela s parametrima SET 1 razina HC viša nego u slučaju SET 4, a što je posljedica nižih temperatura u rubnim zonama i zonama procjepa.



Slika 72. Raspodjela temperatura u prostoru izgaranja, model s 24 zone, SET 4 – uvećano u području GMT



Slika 73. Raspodjela temperatura u prostoru izgaranja, model s 24 zone, SET 1 – uvećano u području GMT
Analizom emisija zaključeno je da je od 4 izdvojena modela s različitim kalibracijskim parametrima, za predviđanje emisija modelom s 24 zone najbolji set parametara SET 4. Za taj set dodatno će se analizirati profil tlaka i brzina oslobađanja topline.

Slikom 74. pokazan je profil tlaka izračunat referentnim modelom sa 6 zona i istovremenim rješavačem, profil tlaka modela s 24 zone i parametrima SET 4 te profil tlaka dobiven mjerenjima. Vrlo jasno se može vidjeti da model s 24 zone mnogo bolje prati eksperimentalni profil tlaka s bitno manjim odstupanjima vršnog tlaka. Najveće odstupanje 6 zonskog modela nalazi se na 364 °KV i iznosi oko 1,44 MPa, dok je u istoj točci odstupanje 24 zonskog modela oko -0,27 MPa, što je pogreška manja od manja od 2 % izmjerene vršne vrijednosti tlaka.



Slika 74. Validacija modela s 24 zone, SET 4: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT

Razlog takvih odstupanja kod modela sa 6 zona i zajedničkim rješavačem, kao i izraženi skokovi u profilu tlaka jest upravo malen broj zona, što je uočljivo i na dijagramu brzine oslobađanja topline pokazanom slikom 75.

Kod modela sa 6 zona i zajedničkim rješavačem, u trenutku iniciranja zapaljenja u pojedinoj zoni modela, na dijagramu brzine oslobađanja topline mogu se uočiti šiljati skokovi.

Kod modela s 24 zone, ti skokovi isto postoje ali su manjeg intenziteta, a cijelo izgaranje traje nekoliko °KV dulje nego kod 6 zonskog modela što bolje opisuje zbivanja u cilindru.



Slika 75. Validacija modela s 24 zone, SET 4: usporedba brzina oslobađanja topline za model sa 6 zona i model s 24 zone – uvećano u području GMT

Utjecaj brzine izgaranja vidljiv je i u dijagramu temperature u cilindru u ovisnosti o zakretu KV (slika 76.). Vršna temperatura 24 zonskog modela manja je za oko 200 K, ali su nakon izgaranja temperature u cilindru motora kod oba modela otprilike jednake.



Slika 76. Validacija modela s 24 zone: usporedba profila temperature cilindra modela sa 6 zona i modela s 24 zone, SET 4

Osim temperature cilindra, slikom 77. pokazana je temperaturna raspodjela 6 zonskog modela iz koje se može objasniti razlog lošeg izračunavanja emisija HC i CO kod 6 zonskog modela. Srednja temperatura cilindra kod 6 zonskog modela raspodijeljena je na samo 6 zona pa se ne

može očekivati veliko rasipanje temperatura kakvo je prisutno kod 24 zonskog modela (slika 72.). Upravo ta temperaturna raspodjela za ovu radnu točku omogućuje 24 zonskom modelu nekoliko puta veću točnost izračunavanja emisija HC i CO u odnosu na model sa 6 zona.



Slika 77. Raspodjela temperature u prostoru izgaranja, modela sa 6 zona – uvećano u području GMT

6.2. Validacija modela s 18 zona

Za iste radne uvjete odnosno za istu radnu točku proveden je i proračun korištenjem simulacijskog modela s 18 zona. Uz analizu tlaka u cilindru, kao i kod 24 zonskog modela, analizirane su i emisije CO, HC i NO_X . Za izračun tlaka u cilindru odabrana su 4 seta parametara (tablica 17.), a rezultati izračuna te usporedba s izmjerenim tlakom i referentnim 6 zonskim modelom pokazani su slikama 78. i 79.

	WHT, -	ZHTC, s	T _{us} , K
SET 1	1,19	$1,60.10^{-4}$	473,15
SET 2	1,19	$1,70 \cdot 10^{-4}$	473,15
SET 3	1,2	$1,50 \cdot 10^{-4}$	473,15
SET 4	1,2	$1,60.10^{-4}$	473,15

Tablica 17. Parametri modela s 18 zona za validaciju radne točke 1



Slika 78. Validacija modela s 18 zone: usporedba profila izmjerenog tlaka (E1) i tlaka izračunatog simulacijskim modelima

Slikom 79. pokazan je profil tlaka u cilindru u području GMT. Kao i u slučaju modela s 24 zone, različitim setom parametara, dobiveni su vrlo slični profili tlaka.



Slika 79. Validacija modela s 18 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka (E1) i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT

Za svaki od četiri seta parametara, izračunate su emisije štetnih tvari i uspoređene s referentnim 6 zonskim modelom i izmjerenim podacima. Za razliku od 24 zonskog modela sa parametrima SET 4 kod kojeg su odstupanja izračunatih emisija štetnih tvari i izmjerenih podataka vrlo mala, kod modela s 18 zona razine izračunatih emisija značajnije odstupaju od mjerenja. Tablicom 18. iskazane su vrijednosti izračunatih emisija simulacijskim modelima i odstupanja od eksperimentalnih rezultata, a slikom 80. emisije su pokazane grafički.

	CO ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog	НС ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog	NO _X ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog
SET 1	2640,8	30,9	533,1	-78,5	38,7	191,3
SET 2	2896,2	43,5	577,6	-76,7	42,1	216,2
SET 3	3400,6	68,5	571,1	-76,9	36,8	177,0
SET 4	3839,1	90,2	1756,4	-29,0	40,4	203,9
Ref. 6Z	218,3	-89,2	347,1	-86,0	45,2	239,5
Izmjereno	2018,0		2475,0		13,3	

Tablica 18. Validacija modela s 18 zona: emisije štetnih tvari izračunate simulacijskim modelima i izmjerene ispitivanjem motora



Slika 80. Validacija modela s 18 zona: usporedni prikaz emisija štetnih tvari

Razlog tako velikih odstupanja u izračunu emisija CO (do 90 %) te odstupanja emisija HC (do 80 %) od izmjerenih vrijednosti modela s 18 zona za sve analizirane parametre jest neadekvatna raspodjela temperatura u prostoru izgaranja. Slikom 81. pokazane su temperature zona modela s 18 zona s parametrima SET 1 u području GMT. U rubnim zonama i zonama procijepa temperatura je relativno niska (ispod 1000 K) i u tim zonama ne dolazi do samozapaljenja i izgaranja što je pogoduje stvaranju emisija HC. Odmicanjem od rubnih zona prema središnjim raste temperatura u zonama što dovodi do pretvorbe HC u CO. Ako su

temperature u prostoru izgaranja dovoljno visoke (iznad 1400 K) dolazi do potpune pretvorbe CO u CO₂. S druge strane, ukoliko je raspodjela temperatura takva da u prostoru izgaranja postoje lokalna područja s nižim temperaturama u kojima je spriječena ili usporena pretvorba CO u CO₂, to posljedično uzrokuje visoke emisije CO u ispuhu. Ako se za isti model analiziraju i emisije NO_X, može se zaključiti da je izračunata emisija viša od izmjerene posljedica visokih temperatura središnjih zona (iznad 1800 K) u kojima je došlo do formiranja NO_X, bez obzira što je srednja temperatura cilindra ispod temperature od 1800 K za koju se smatra da je granična vrijednost temperature iznad koje dolazi do formiranja NO_X.



Slika 81. Raspodjela temperatura u prostoru izgaranja, model s 18 zone, SET 1 – uvećano u području GMT

6.3. Validacija modela s 12 zona

Model s 12 zona validiran je za istu radnu točku (Radna točka 1 – tablica 14.). Uz eksperimentalne rezultate i 12 zonski model uspoređen je s referentnim 6 zonskim modelom. Za parametre dane su tablicom 19., analizirane su emisije štetnih tvari, a profili tlaka pokazani su slikom 82. i uvećano u području GMT slikom 83.

	WHT, -	ZHTC, s	T _{us} , K
SET 1	1,1	4,00.10-4	478,15
SET 2	1,2	$4,00.10^{-4}$	473,15
SET 3	1,1	2,50.10-4	493,15

Tablica 19. Parametri modela s 12 zona za validaciju radne točke 1

Kod modela s 12 zona za sva tri seta proračunskih parametara u području GMT postoje određena odstupanja od izmjerene krivulje tlaka. Na slici 83. primjetno je da profil tlaka kod modela s 12 zona ima izrazite skokove kakvi su karakteristični i za referentni model sa 6 zona. Te anomalije u profilu tlaka analizirane su nakon što je utvrđeno s kojim parametrima izračunate razine emisija najmanje odstupaju od izmjerenih.



Slika 82. Validacija modela s 12 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima



Slika 83. Validacija modela s 12 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT

Slikom 84. grafički su pokazane izmjerene emisije, izračunate modelima s 12 zona i referentnim modelom. Numeričke vrijednosti i izračunata odstupanja dana su u tablici 20. Iz rezultata izračuna emisija zaključuje se da su za ispitivani 12 zonski model najbolji parametri SET 1. Premda s parametrima SET 2 model bolje izračunava emisije CO i HC, zbog dvostruko lošije izračunate emisije NO_X kao optimalan odabran je SET 1. Model s parametrima SET 3 uopće ne može izračunati emisije CO i HC, dok je emisija NO_X oko 50 % veća od izmjerene.



Slika 84. Validacija modela s 12 zona: usporedni prikaz emisija štetnih tvari

	CO ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog	НС ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog	NO _X ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog
SET 1	382,2	-81,1	585,2	-76,4	22,6	70,2
SET 2	404,6	-80,0	554,3	-77,6	50,5	279,7
SET 3	0,0	-100,0	0,0	-100,0	46,1	246,6
Ref. 6Z	218,3	-89,2	347,1	-86,0	45,2	239,5
Izmjereno	2018,0		2475,0		13,3	

Tablica 20. Validacija modela s 12 zona: emisije štetnih tvari izračunate s različitim setovima parametara i izmjerene ispitivanjem motora

Razlog nemogućnosti izračuna emisija CO i HC je vrlo intenzivna izmjena topline između zona modela, što se može objasniti i kroz prikaz temperatura u zonama prostora izgaranja (slika 85.). Iz slike je uočljivo da zbog modelirane prevelike izmjene topline između zona, toplina prelazi iz središnjih, toplijih, zona u vanjske rubne zone i zone procijepa koje se zagrijavaju do temperatura koje u njima iniciraju samozapaljenje i izgaranje smjese. Uslijed izgaranja u vanjskim i rubnim zonama, nema neizgorjelih HC, a relativno visoke temperature u zonama uzrokovale su potpunu pretvorbu CO u CO₂.



Slika 85. Raspodjela temperature u prostoru izgaranja, modela s 12 zona, SET 3 – uvećano u području GMT

Model s parametrima SET 1 ima ukupno najmanja odstupanja u odnosu na izmjerene emisije te će biti dodatno analiziran i uspoređen s referentnim modelom od 6 zona i eksperimentalnim podacima. Prikaz profila tlaka za taj slučaj, uvećan u području GMT, pokazan je slikom 86.

Pojava skokova u krivulji tlaka posljedica je relativno malenog broja zona i nedovoljne interakcije između zona modela, što se može vidjeti i u raspodjeli temperature u zonama modela prikazanoj slikom 87. Uzrok navedenih pojava je neadekvatna izmjena topline između zona. Ona je intenzivnija što je manja vremenska konstanta izmjene topline između zona (ZHTC), a manje intenzivna što je ta konstanta veća. Ona je jednaka za sve zone, bez obzira nalaze li se one bliže rubnim zonama ili su pak bliže središnjim zonama, a to onemogućuje bolju raspodjelu temperature po zonama modela.



Slika 86. Validacija modela s 12 zona, SET 1: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT



Slika 87. Raspodjela temperature u prostoru izgaranja, modela s 12 zona, SET 1 – uvećano u području GMT

Na slici 87. može se uočiti grupiranje središnjih zona i nedovoljna interakcija s hladnijim rubnim zonama. Nakon što dođe do porasta temperature u središnjim zonama i pojave samozapaljenja, zbog nedovoljne interakcije između zona, središnje zone se počinju hladiti, a rubne zone i susjedne zone bliže rubnim zonama ne mogu primiti dovoljno topline da i u njima dođe do samozapaljenja. To dovodi i do zadržavanja ili blagog pada srednje temperature cilindra (prikazane linijom crta-točka).

Takvo stanje traje sve dok se ne izmijeni dovoljno topline i mase između zona modela što inicira samozapaljenje zona bližih rubnim zonama, zbog čega se izgaranje nastavlja, a što se manifestira kao skok na krivulji tlaka. Takvi prekidi izgaranja i diskontinuiteti temperature i tlaka teško da se mogu dogoditi u stvarnom motoru.

Zbog toga se validacijom 12 zonskog modela zaključuje da je njegova primjena ograničena te da bi za kvalitetniji proračun izgaranja trebalo koristiti modele s većim brojem zona.

Usporedbom vremena izračuna za model s 24 zone i model s 12 zona izmjerena tijekom verifikacije modela zaključuje se da prelazak na dvostruko veći broj zona modela zahtijeva samo 25 % do 30 % veća proračunska vremena, odnosno računalne resurse. To se obzirom na pokazanu točnost 24 zonskog modela smatra i više nego prihvatljivim.

Tablica 21. Vremena izračuna ovisna o proračunskom koraku za modele s 24 zone i s 12 zona

Proračunski korak Δα, °KV	Vrijeme izračuna modela s 12 zona <i>t</i> , s	Vrijeme izračuna modela s 24 zone <i>t</i> , s	Omjer vremena izračuna u odnosu na model s 12 zona
0,5	560	697	1,24
0,25	924	1166	1,26
0,1	1869	2402	1,29
0,05	3352	4341	1,30

6.4. Validacija modela s 36 zona

SET 2

SET 3

I model s 36 zona validiran je za istu radnu točku. Tri seta parametara 36 zonskog modela dani su u tablici 22. Osim sa eksperimentalnim podacima, 36 zonski model uspoređen je i s referentnim modelom sa 6 zona i zajedničkim rješavačem te s 24 zonskim modelom s razdvojenim rješavačem. Profil tlaka prikazan je samo za uvećani dio oko GMT (slika 88.).

 $2,80.10^{-5}$

 $3.50 \cdot 10^{-5}$

473,15

473,15

	WHT, -	ZHTC, s	T _{us} , K
SET 1	1,15	$4,00.10^{-5}$	473,15

1,22

1.2

Tablica 22. Parametri modela s 36 zona za validaciju radne točke 1



Slika 88. Validacija modela s 36 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima – uvećano u području GMT

Iz slike 89. može se vidjeti vrlo dobro podudaranje profila tlaka u području GMT modela s 24 i modela s 36 zona. Obzirom na tako male, praktički zanemarive razlike u profilu tlaka zaključuje se da je za ove uvjete rada odnosno ovu radnu točku dovoljno koristiti model s 24 zone, s kojim je postignut optimum između točnosti i brzine izračuna.



Slika 89. Validacija modela s 36 zona: usporedba profila izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog simulacijskim modelima s 24 i 36 zona SET 3 – uvećano u području GMT

6.5. Analiza izračuna tlaka u cilindru modelima s 12, 18, 24 i 36 zona

Tijekom validacije modela s 12, 18, 24 i 36 zona analiziran je utjecaj parametara simulacijskog modela na profil tlaka u cilindru i zaključeno je da se s različitim setom parametara za simulacijski model s određenim brojem zona mogu dobiti približno jednaki rezultati izračuna tlaka u cilindru. Osim utjecaja proračunskih parametara, modeli s različitim brojem zona međusobno su uspoređeni kako bi se analizirao utjecaj broja zona na izračun tlaka u cilindru. Slikom 90. pokazan je profil tlaka u cilindru određen mjerenjima i simulacijskim modelima sa 6, 12, 18, 24 i 36 zona te razlika tlaka određenog mjerenjima i pojedinim simulacijskim modelom u ovisnosti o zakretu KV. Razlike između izmjerenog i izračunatog tlaka u cilindru javljaju se samo u uskom području oko GMT, dok je u ostatku radnog ciklusa razlika gotovo nema.



Slika 90. Validacija modela: usporedba izmjerenog tlak u cilindru i izračunatog simulacijskim modelima sa 6, 12, 18, 24 i 36 zona

Profil tlaka i razlike u tlaku između mjerenja i simulacija u području GMT pokazani su slikom 91. Na slici profili tlaka prikazani su punim linijama, dok su crtkanim linijama prikazane razlike između izmjerenog tlaka i tlaka izračunatog određenim simulacijskim modelom. Kod modela s malim brojem zona, 6 zonskog i 12 zonskog, najveća odstupanja od izmjerenog profila tlaka javljaju se u području vršnih vrijednosti tlaka. Kod modela sa 6 zona

i zajedničkim rješavačem to je posljedica nedovoljnog broja zona modela. Izgaranje započinje u zoni u kojoj su stvoreni uvjeti samozapaljenja smjese, najčešće središnjoj zoni, nakon čega se izgaranje nastavlja u drugim zonama s određenim zakašnjenjem. To se na profilu tlaka manifestira u obliku oštrih skokova na krivulji, a jedan takav se pojavljuje i u području vršnog tlaka. Kod modela s 12 zona i razdvojenim rješavačem se pojavljuju slične nepravilnosti. Iako je broj zona udvostručen, zbog nedovoljne interakcije između zona modela u izmjeni energije i neadekvatne raspodjele temperatura u zonama 12 zonskog modela također postoje skokovi u profilu tlaka, koji jesu nešto manji nego kod modela sa 6 zona, ali i dalje previsoki pa je preporučljivo povećati broj zona kako bi se te nepravilnosti izbjegle.



Slika 91. Validacija modela: usporedba izmjerenog tlak u cilindru i izračunatog simulacijskim modelima sa 6, 12, 18, 24 i 36 zona – uvećano u području GMT

Kod modela s većim brojem zona (18, 24 i 36) najveća odstupanja u tlaku cilindra u odnosu na mjerenje javljaju se u trenutku početka izgaranja. Profil tlaka određen mjerenjem, u trenutku početka izgaranja ima relativno blago zaobljenje. Kod simulacijskih modela, bez obzira na broj zona, takav profil se ne može postići, već postoji određeno zakašnjenje u početku izgaranja, koje se na profilu tlaka očituje kao pad tlaka u odnosu na eksperiment, nakon čega dolazi do naglog izgaranja, a time i relativno velikog gradijenta u profilu tlaka. Razlog tome je najvjerojatnije mehanizam kemijske kinetike za prirodni plin GRI-Mech 3.0 [63] koji se koristi za proračune izgaranja, a kojim se očito ne može dovoljno dobro opisati proces izgaranja bioplina u uvjetima koji se javljaju prilikom izgaranja u HCCI motoru za ovu radnu točku, zbog čega bi bilo korisno provesti simulacije korištenjem nekog drugog mehanizma kemijske kinetike. Kod svih modela odstupanja u profilu tlaka javljaju se na oko 5 °KV prije GMT i praktički nestaju oko 25 °KV poslije GMT. Da bi se mogla odrediti točnost izračuna tlaka u cilindru ovisno o broju zona modela, analizirana su odstupanja tlaka od izmjerenih vrijednosti, a ukupno odstupanje izraženo srednjom kvadratnom pogreškom (*SKP*) [90] koja se izračunava korištenjem izraza:

$$SKP = \frac{1}{N_{v}} \cdot \sum_{iv=1}^{N_{v}} (Y_{iv, sim} - Y_{iv, izmj})^{2}$$
(6.1)

gdje su

 $N_{\rm v}$ – ukupan broj izmjerenih / simuliranih vrijednosti

Yiv,sim – vrijednost izračunata simulacijskim modelom u točki iv

 $Y_{iv,izmj}$ – vrijednost dobivena mjerenjem u točki iv

Srednja kvadratna pogreška predstavlja razliku između izmjerenih vrijednosti i vrijednosti izračunatih simulacijom, a koristi se kako bi se odredilo odstupanje izračunatih i izmjerenih ili predviđanih podataka. Korištenjem *SKP* može se odrediti kako određene promjene u modelu kao što su pojednostavnjenja ili promjena neke varijable utječu na proračunske rezultate modela. U ovom slučaju se sa *SKP* ocjenjuje utjecaj broja zona na točnost izračuna tlaka u cilindru u odnosu na izmjereni tlak u cilindru za radnu točku kojom je model validiran.



Slika 92. Validacija modela: srednja kvadratna pogreška simulacijskih modela u odnosu na izmjerene podatke tlaka

Slikom 92. pokazana je *SKP* ovisno o broju zona modela. Općenito se može zaključiti da se s povećanjem broja zona modela pogreška bitno smanjuje, ali isto tako osim broja zona na pogreške utječu i parametri modela i njegova podešenost. Tako je kod modela s 36 zona *SKP* zanemarivo veća u odnosu na model s 24 zone, što je posljedica podešavanja parametara modela. Kod modela s 36 zona zbog gotovo jednakih rezultata kao kod modela s 24 zone, nije rađeno fino podešavanje modela. Utjecaj parametara može se primijetiti i kod modela s 12 zona, kod kojeg parametri SET 1 imaju veću pogrešku nego referentni model sa 6 zona, dok model s parametrima SET 3 ima pogrešku manju od referentnog modela. Ukoliko su parametri modela loše podešeni, njegova odstupanja su veća u odnosu na model s ispravno podešenim parametrima.

Iz analiziranog može se zaključiti da je poželjno za svaki model odrediti odgovarajući set parametara s kojima model ima najmanja odstupanja od izmjerenih vrijednosti, a nakon toga odrediti optimalan broj zona analizom osjetljivosti rezultata izračunatih simulacijskim modelom s različitim brojem zona i za zadovoljavajuću točnost odabrati optimalan broj zona za daljnje proračune.

6.6. Analiza izračuna emisija modelima s 12, 18 i 24 zone

Osim analize utjecaja broja zona na profil tlaka, napravljena je analiza utjecaja broja zona na izračun emisija štetnih tvari. U prethodnim poglavljima tijekom validacije, za modele s 12, 18 i 24 zone analiziran je utjecaj parametara modela na izračun emisija i pokazana je usporedba s referentnim modelom sa 6 zona s zajedničkim rješavačem i eksperimentalnim rezultatima. Za analizu utjecaja broja zona na rezultate izračuna emisija štetnih tvari, od svakog modela s odgovarajućim brojem zona odabrano je pojedinačno najbolje rješenje izračunatih emisija, a usporedni rezultati ovisno o broju zona dani su tablicom 23. i pokazani slikom 93.

	CO ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog	НС ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog	NO _X ppm <i>m/m</i>	Δ% od izmjerenog
Ref. 6 zona	218,3	-89,2	347,1	-86,0	45,2	239,5
12 zona	382,2	-81,1	585,2	-76,4	22,6	70,2
18 zona	2640,8	30,9	533,1	-78,5	38,7	191,3
24 zone	2030,0	0,6	2418,0	-2,3	29,0	118,3
Izmjereno	2018,0		2475,0		13,3	

Tablica 23. Validacija modela: emisije štetnih tvari izračunate modelima s različitim brojem zona i izmjerene ispitivanjem motora



Slika 93. Validacija modela: prikaz emisija štetnih tvari ovisno o broju zona modela u odnosu na izmjerene vrijednosti

Iz usporedbe vrijednosti emisija izračunatih modelima sa 6, 12, 18 i 24 zone može se zaključiti da s povećanjem broja zona rastu mogućnosti točnijeg izračuna emisija štetnih tvari. Razlog tome je utjecaj broja zona na geometrijsku podjelu prostora izgaranja. Zone procijepa, te rubne zone koje su u dodiru sa stijenkama prostora izgaranja sastavni su dio svakog modela, što znači da ukoliko je broj zona relativno malen, ostatak volumena prostora izgaranja dijeli između tih preostalih zona. To znači da se cjelokupna masa u cilindru raspodjeljuje se na manji broj zona pa je i raspodjela temperatura između tih zona grublja odnosno s većim skokovima. S druge strane, ako imamo model s većim brojem zona tada se za iste uvjete, istu masu radne tvari i istu srednju temperaturu u cilindru, s povećanjem broja zona može napraviti finija podjela temperatura između zona u odnosu na model s manjim brojem zona. Upravo ta mogućnost boljeg opisivanje temperaturne raspodjele kakva postoji i u stvarnom motoru omogućuje bolje predviđanje emisije štetnih tvari.

Isto tako iz analize utjecaja broja zona na izračun emisija, kao i prijašnjih analiza izračuna emisija štetnih tvari pojedinog modela s određenim brojem zona i različitim parametrima modela može se zaključiti da značajan utjecaj na izračun emisija ima podešenost modela, odnosno parametri modela koji utječu na izmjenu topline između zona te izmjenu topline sa stijenkama prostora izgaranja. Naime, emisije CO i HC nastaju uslijed nepotpunog izgaranja tj. oksidacije goriva, a njihov nastanak općenito ukazuje na: ili prenisku temperaturu izgaranja

unutar cjelokupnog prostora izgaranja ili da se dio goriva našao u dijelovima prostora izgaranja s izrazito niskim temperaturama što onemogućuje samozapaljenje i oksidaciju goriva. Područja prostora izgaranja s izrazito niskim temperaturama jesu zone procijepa te zone graničnog sloja uz stijenke prostora izgaranja. Obzirom na izrazitu osjetljivost emisija HC i CO na lokalnu raspodjelu temperature, njihovo i približno točno izračunavanje je izrazito zahtjevno. To se posebno odnosi na bezdimenzijske modele, koje je potrebno pravilno podesiti da bi se modelom mogli obuhvatiti sve pojave koje utječu na formiranje HC i CO. Osjetljivost izračuna emisija na podešenost modela može se objasniti na primjeru modela s 18 zona. Iako je broj zona modela relativno velik, što omogućuje dobro opisivanje temperaturne nehomogenosti prostora izgaranja, emisije HC izračunate primjenom tog modela su neznatno lošije od emisija HC izračunatih modelom s 12 zona, ali istovremeno i mnogo lošije od emisija izračunatih modelom s 24 zone.

Istovremeno je emisija CO izračunata modelom s 18 zona nešto veća od emisije CO izračunate modelom s 24 zone. Razlog takvim rezultatima su nedovoljno dobro podešene vrijednosti parametara modela s 18 zona, prije svega to se odnosi na vrijednost vremenske konstante izmjene topline između zona modela. Ona utječe na izmjenu topline između zona modela, a time i na temperaturnu raspodjelu u prostoru izgaranja. Veća emisija CO posljedica je oksidacije neizgorjelih HC u CO, pri čemu su temperature u pojedinim dijelovima prostora izgaranja niže od 1400 K što sprečava daljnju oksidaciju CO u CO₂. Model bi trebalo podesiti tako da zone graničnog sloja imaju takvu temperaturu koja će onemogućiti oksidaciju HC u CO što bi u izračunu emisija imalo za posljedicu smanjenje izračunate emisije CO i povećanje emisije HC, čime bi rezultati izračuna emisija bolje odgovarali izmjerenim vrijednostima.

Drugi pokazatelj loše raspodjele temperature u zonama modela je emisija NO_X , koja je posljedica vršnih temperatura u dijelovima prostora izgaranja viših od 1800 K. Najčešće se one pojavljuju u središnjim zonama modela. Ukoliko bi se izmjena topline između zona korigirala na način da se zonama s visokim vršnim vrijednostima temperature, odvođenjem topline smanji temperatura, izračunavanje emisije NO_X bilo bi točnije.

Općenito se može zaključiti da se povećanjem broja zona modela emisije mogu bolje izračunati, ali pri tome je potrebno veliku pažnju posvetiti ispravnom podešavanju parametara modela. Optimalno podešenim parametrima postiže se zadovoljavajuća razina točnosti predviđanja emisija štetnih tvari u HCCI motoru u odnosu na rezultate mjerenja.

6.7. Utjecaj zone procijepa na emisije štetnih tvari – primjena modela

Razvoj suvremenih motora, iako usmjeren na povećanje performansi i korisnosti motora, ograničen je sve strožom zakonskom regulativom o emisijama štetnih tvari iz MSUI. Motor s homogenom smjesom i kompresijskim paljenjem svojim karakteristikama visoke termičke korisnosti, niske emisije NO_x i krutih čestica nameće se kao mogući izbor za proces budućnosti. U području emisija štetnih tvari najveći nedostatak HCCI motora jesu visoke emisije HC i CO. Kao jedan od glavnih uzročnika visoke emisije HC smatraju se zone procijepa, dok je visoka emisija CO posljedica nemogućnosti potpune oksidacije CO u CO_2 uslijed nedovoljno visoke temperature, najčešće u području graničnog sloja uz stijenke prostora izgaranja. Osim zone procijepa između klipa i stijenke cilindra iznad prvog klipnog prstena, zona procijepa postoji i u području brtve glave motora. Da bi se ispitao utjecaj zona procijepa na razine emisija HC i CO za određeni motor, mogu se provesti eksperimentalna istraživanja njihovog utjecaja ili se njihov utjecaj može ispitati primjenom simulacijskih modela.

Eksperimentalna istraživanja zahtijevaju značajne konstrukcijske promjene klipa, ali i cijelog klipnog mehanizma odnosno prostora izgaranja ako se promjenama volumena zona procijepa ne želi utjecati na ostale karakteristike, prije svega na kompresijski omjer ili kompresijski volumen cilindra. Uz zahtjevne konstrukcijske preinake motora, eksperimentalnim istraživanjima vrlo je teško postići ponovljivost rezultata, jer je tijekom eksperimenta vrlo teško zadržati sve parametre u željenim vrijednostima, a promjenom samo jednog parametra utječe se na druge. To u konačnici utječe na ponašanje i rezultate cjelokupnog eksperimentalnog postava. Druga mogućnost, ispitivanje utjecaja prostora procijepa simulacijskim modelima mnogo je fleksibilnija, jer ne zahtijeva skupe preinake motora, a istovremeno omogućuje ispitivanje praktički proizvoljnog broja mogućih rješenja i utjecaja tih rješenja na emisije štetnih tvari. Čak i ako se simulacijskim modelom određena pojava ne može modelirati na način da je rezultat simulacija potpuno točan, korištenjem simulacijskih modela mogu se ispitati trendovi. Iz tako izračunatih trendova mogu se donijeti zaključci koji se naknadno mogu istražiti eksperimentalnim istraživanjima. Na taj način može se smanjiti broj potrebnih eksperimentalnih istraživanja te skratiti vrijeme i smanjiti cijena razvoja motora. U ovom slučaju utjecaj prostora procijepa na emisije štetnih tvari analiziran je za motor i radnu točku koja je korištena tijekom validacije modela. Referentni slučaj predstavljaju volumeni zona procijepa dobiveni iz tehničkih podataka motora i korišteni tijekom validacije modela. Tijekom analize mijenjan je volumen zona procjepa, dok su ostali parametri modela zadržani na konstantnim vrijednostima. Da bi se analizom obuhvatio utjecaj obiju zona procijepa: zone procjepa između klipa i cilindra (zona 1) te zone procjepa u području brtve glave motora (zona 2), simulacije su provedene na način da je u prvih 10 simulacijskih ispitivanja mijenjan samo volumen zone procjepa između klipa i cilindra, dok je volumen zone procijepa u području brtve glave motora (u području brtve glave motora bio postavljen na referentnu vrijednost. U sljedećih 10 simulacijskih ispitivanja analiziran je utjecaj volumena zone procjepa u području brtve glave motora, dok je volumen zone procijepa između klipa i cilindra zadržan na referentnoj vrijednosti (tablica 24.)

	Volumen V_1 zone procijepa 1, m ³	Udio V_1 od referentnog V_1	Volumen V_2 zone procijepa 2, m ³	Udio V_2 od referentnog V_2	
Referentno	4,00.10-7		5,50·10 ⁻⁷		
95 % V ₁	3,80.10-7	95 %	5,50·10 ⁻⁷		
90 % V ₁	3,60.10-7	90 %	5,50·10 ⁻⁷		
$85 \% V_1$	3,40.10-7	85 %	$5,50 \cdot 10^{-7}$		
$80 \% V_1$	3,20.10-7	80 %	5,50·10 ⁻⁷		
$75 \% V_1$	3,00.10-7	75 %	5,50·10 ⁻⁷	100.0/	
$70 \% V_1$	2,80.10-7	70 %	5,50·10 ⁻⁷	100 %	
$65 \% V_1$	2,60.10-7	65 %	5,50·10 ⁻⁷		
$60 \% V_1$	2,40.10-7	60 %	5,50·10 ⁻⁷		
55 % V ₁	2,20.10-7	55 %	5,50·10 ⁻⁷		
$50 \% V_1$	2,00.10-7	50 %	5,50·10 ⁻⁷		
95 % V ₂	4,00.10-7		5,23·10 ⁻⁷	95 %	
90 % V ₂	4,00.10-7		4,95·10 ⁻⁷	90 %	
85 % V ₂	4,00.10-7		4,68·10 ⁻⁷	85 %	
80 % V ₂	4,00.10-7		$4,40.10^{-7}$	80 %	
75 % V ₂	4,00.10-7	100 %	4,13.10-7	75 %	
70 % V ₂	4,00.10-7	100 %	3,90.10-7	70 %	
65 % V ₂	4,00.10-7		3,58·10 ⁻⁷	65 %	
60 % V ₂	4,00.10-7		3,30.10-7	60 %	
55 % V ₂	4,00.10-7		3,03.10-7	55 %	
50 % V ₂	4,00.10-7		$2,80 \cdot 10^{-7}$	50 %	

Tablica 24. Vrijednosti volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2

Utjecaj promjene volumena zona procjepa na razine emisije HC s pokazan je tablicom 25. i dijagramom na slici 94. Promjena volumena zone procjepa u prostoru brtve glave motora tj. volumena zone 2 za 25 % u odnosu na referentni volumen zone 2 rezultira smanjenjem emisije HC za oko 30 %. Isto tako smanjivanjem volumena procjepa uz klip odnosno volumena zone 1 za isti iznos (25 % u odnosu na referentni volumen zone 1) emisija HC smanji se za otprilike 40 %. Usporedbom dobivenih rezultata može se zaključiti da bez obzira kojoj zoni procijepa se mijenja volumen izračunati rezultati su približno jednaki odnosno imaju isti trend, što pokazuje da je simulacijski model stabilan odnosno da za isti efekt daje približno jednaka rješenja.

	CO ppm <i>m/m</i>	$\Delta\%$ od referentnog	НС ppm <i>m/m</i>	$\Delta\%$ od referentnog	NO _X ppm <i>m/m</i>	$\Delta\%$ od referentnog
Referentno	2030,2		2418		29	
95 % V ₁	2296,18	13,10 %	2316,05	-4,22 %	38,5	32,76 %
90 % V ₁	2641,97	30,13 %	2001,28	-17,23 %	38,66	33,31 %
85 % V ₁	2486,66	22,48 %	2125,85	-12,08 %	38,8	33,79 %
$80 \% V_1$	3328,59	63,95 %	1156,13	-52,19 %	38,97	34,38 %
75 % V ₁	3383,57	66,66 %	971,82	-59,81 %	39,05	34,66 %
$70 \% V_1$	3314,46	63,26 %	719,19	-70,26 %	39,12	34,90 %
65 % V ₁	3075,12	51,47 %	503,06	-79,20 %	39,27	35,41 %
$60 \% V_1$	2777,41	36,80 %	254,31	-89,48 %	40,05	38,10 %
55 % V ₁	2283,37	12,47 %	125,76	-94,80 %	40,45	39,48 %
50 % V ₁	1771,31	-12,75 %	65,92	-97,27 %	41,49	43,07 %
95 % V ₂	1986,25	-2,16 %	2562,83	5,99 %	38,53	32,86 %
90 % V ₂	2440,38	20,20 %	2171,99	-10,17 %	38,65	33,28 %
85 % V ₂	3091,88	52,29 %	1515,6	-37,32 %	38,89	34,10 %
80 % V ₂	3372,86	66,13 %	1011,06	-58,19 %	39,06	34,69 %
75 % V ₂	3314,88	63,28 %	729,53	-69,83 %	39,23	35,28 %
70 % V ₂	3163,31	55,81 %	571,13	-76,38 %	39,38	35,79 %
65 % V ₂	2955,24	45,56 %	470,46	-80,54 %	39,54	36,34 %
60 % V ₂	2594,97	27,82 %	200,82	-91,69 %	39,78	37,17 %
55 % V ₂	1823,68	-10,17 %	31,91	-98,68 %	41,53	43,21 %
50 % V ₂	1354,1	-33,30 %	10,65	-99,56 %	41,91	44,52 %

Tablica 25. Primjena modela: emisije štetnih tvari izračunate za različite vrijednosti volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2

Razlike u izračunatim emisija HC između slučajeva smanjenja volumena zona 1 i 2 od oko 10 % posljedica su prije svega različitih veličina referentnih volumena zona te različitih temperatura zona procjepa. Daljnjim smanjivanjem zona procjepa dobiveni su slični rezultati, a već pri vrijednosti od 60 % referentnog volumena u oba slučaja, emisija HC smanjena je preko 90 % u odnosu na početne (referentne) vrijednosti. Promjena ukupne emisije HC s promjenom volumena zona procijepa pokazana je dijagramom na slici 94. u kojem je uočljiv trend smanjenja emisije HC sa smanjenjem volumena zona procijepa. Takav rezultat pokazatelj je utjecaja zona procjepa na emisiju HC, ali da bi se taj utjecaj sa sigurnošću mogao potvrditi, potrebno je provesti eksperimentalna istraživanja kojima bi se rezultat simulacije potvrdio mjerenjima.



Slika 94. Primjena modela: promjena ukupne emisije HC uslijed promjene volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2

Emisija CO u ispuhu posljedica je ne mogućnosti potpune oksidacije CO u CO₂. Razlog tome može biti općenito preniska temperatura (< 1400 K) u prostoru izgaranja ili područja s izrazito niskom temperaturom kao što su stijenke prostora izgaranja. Prilikom smanjenja volumena zone procjepa za 25 % odnosu na referentni volumen, u oba slučaja došlo je do značajnog povećanja emisije CO (za oko 66 % u odnosu na referentne vrijednosti). Takav rezultat posljedica je preraspodjele dijela mase iz zona procjepa u rubne zone s relativno niskom temperaturom. Daljnjim smanjivanjem volumena zona procijepa smanjuje se i emisija CO kako je i pokazano tablicom 25. i dijagramom na slici 95.



Slika 95. Primjena modela: promjena ukupne emisije CO uslijed promjene volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2



Slika 96. Primjena modela: promjena ukupne emisije NO_X uslijed promjene volumena zona procijepa, zone 1 i zone 2

Iako volumen zone procijepa i emisija NO_X nisu direktno povezani, uz utjecaj na emisije HC i CO, analiziran je utjecaj volumena zona procjepa na razinu emisija NO_X . Može se zaključiti

da se sa smanjenjem volumena zone procjepa dolazi do povećanja emisije NO_x što je posljedica načina modeliranja volumena zona modela. Naime s promjenom volumena zone procjepa utječe se i na kompresijski volumen, a time i na kompresijski omjer. Da bi se kompresijski omjer zadržao na vrijednosti jednakoj kompresijskom omjeru referentnog slučaja, prilikom promjene volumena zone procijepa nije mijenjan kompresijski volumen, već je za veličinu za koju je smanjen volumen procjepa povećan volumen središnjih zona. Na taj način je kompresijski volumen ostao jednak referentnom. Uslijed takve preraspodjele volumena, dio mase je raspodijeljen središnjim zonama koje imaju višu temperaturu nego rubne zone odnosno zone bliže rubnim zonama. Posljedica toga je povećanje emisije NO_x prilikom smanjenja volumena zona procjepa, kako je pokazano tablicom 25. i dijagramom na slici 96.

Provedenim analizama može se odrediti trend promjena emisija štetnih tvari s promjenom volumena zona procijepa, ali za pouzdanije vrednovanje dobivenih rezultata bilo bi ih potrebno dodatno potvrditi eksperimentalnim istraživanjem.

7. Zaključak

Glavni cilj provedenih istraživanja bio je daljnji razvoj i unapređenje višezonskog simulacijskog modela HCCI motora. Da bi se taj cilj ostvario, rad je bio podijeljen u nekoliko faza. Svaka od njih imala je svoj parcijalni cilj i rezultirala je određenim korakom u stvaranju modela koji je naposljetku kao cjelina implementiran u programski paket AVL BOOST, gdje je verificiran i validiran. Unapređenja su postignuta primjenom razdvojenog rješavača diferencijalnih jednadžbi stanja u zonama, proizvoljnim odabirom broja zona i uvođenjem nove zone koje u postojećim modelima nema.

7.1. Glavna postignuća rada

Rad ima četiri glavna postignuća: model izgaranja s proizvoljnim brojem zona, novu rubnu zonu u području brtve glave motora, podmodel za određivanje početnih uvjeta višezonskog modela izgaranja i podmodel za izračunavanje tlaka u cilindru nakon svakog proračunskog koraka odvojenog rješavača. Zbog međusobne isprepletenosti, ova su postignuća u nastavku opisana zajedno.

Za razliku od dosadašnjih modela izgaranja u HCCI motoru u kojima je broj zona u prostoru izgaranja unaprijed zadan i ne može se mijenjati bez zahvata u programski kod, ovaj model omogućuje korisniku da proizvoljno odabere broj zona, sukladno potrebama. Nakon što se na temelju geometrije prostora izgaranja odrede volumeni rubnih zona, tj. zona uz plohe koje omeđuju prostor izgaranja, preostali se volumen podijeli na zone jednakog volumena.

Većim brojem zona postiže se veća točnost proračuna u odnosu na modele s manjim brojem zona, prvenstveno emisija štetnih tvari, dok je kod manjeg broja zona brzina računanja veća u odnosu na modele s većim brojem zona. U poglavlju o validaciji je pokazano da od tri ispitivana modela, s 12, 24 i 36 zona, najpovoljniji kompromis između točnosti i vremena računanja predstavlja model s 24 zone.

Jedan od ključnih momenata u razvoju modela bila je primjena razdvojenog rješavača diferencijalnih jednadžbi stanja u zonama. Kod zajedničkog rješavača se u svakom proračunskom koraku odjednom rješavaju diferencijalne jednadžbe svih zona, a kod razdvojenog se jednadžbe svake pojedine zone rješavaju neovisno o jednadžbama ostalih zona. Za razliku od zajedničkog rješavača koji ima samo jednu ali veliku Jakobijevu matricu

za sve zone, kod odvojenog rješavača svaka zona ima svoju, vrlo malenu pojasnu Jakobijevu matricu. Računanje ove jedne velike matrice traje znatno dulje od računanja odgovarajućeg broja malih matrica, pa se odvojenim rješavačem skraćuje vrijeme računanja.

Primjena razdvojenog rješavača bila je osnovni preduvjet za formiranje modela kod kojega korisnik može interaktivno odabrati proizvoljan broj zona modela. Međutim, odvojenim rješavanjem na kraju svakog proračunskog koraka svaka od zona ima svoja tlak pa je trebalo razviti podmodel za izjedanačavanje tlakova u zonama na jedinstveni tlak u cilindru. Navedenim podmodelom se u tu svrhu preraspodjeljuje masa između zona, uslijed toga se mijenja sadržaj energije pojedine zone pa se dodatno moraju korigirati i temperature zona. Za te korekcije tlaka i temperatura se specificiraju tolerancije.

Glavni izvori emisija CO i HC su hladne zone velikih oplošja i malih volumena od kojih je najznačajnija ona iznad gornjeg klipnog prstena. Međutim, izvor istih emisija je i zona procjepa u području brtve glave motora. Zbog toga je ona uvedena u simulacijski model kao nova zona, što predstavlja novi doprinos povećanju točnosti modela.

Kod HCCI motora trenutak početka izgaranja u najvećoj mjeri ovisi o temperaturi i njenoj raspodjeli u prostoru cilindra, a ona opet ovisi isključivo o toplinskom stanju u cilindru na početku kompresije, odnosno visokotlačnog dijela procesa. Za proračun izmjene radnog medija koristi se jednozonski 1-D/0-D model ugrađen u AVL BOOST. Međutim, on pretpostavlja potpunu izmiješanost plinova u cilindru te kao rezultat daje tlak, temperaturu i sastav. Zbog toga je za ovaj višezonski model izgaranja trebalo razviti i višezonski podmodel za određivanje uvjeta na početku visokotlačnog dijela procesa. Podmodelom se izračunavaju temperature rubnih zona, a potom središnjih, uz uvjet da srednja temperatura cilindra ostane jednaka onoj izračunatoj jednozonskim modelom izmjene radnog medija.

Novi model izgaranja u HCCI motoru uključuje izmjenu topline između plinova u cilindru i stijenki koje okružuju prostor izgaranja, a zone modela međusobno izmjenjuju masu i energiju. Proces izgaranja opisan je jednadžbama kemijske kinetike kojom se izračunavaju svi procesi vezani uz izgaranje kao što su: promjena sastava ili energija oslobođena izgaranjem.Proračun novim modelom omogućuje detaljnu termodinamičku i kemijsku analizu procesa izgaranja u cilindru, pružajući uvid u veličine kao što su temperaturna raspodjela u prostoru izgaranja, profil tlaka, emisije štetnih tvari, brzina oslobađanja topline, itd.

7.2. Izvorni znanstveni doprinos

Istraživački rad proveden tijekom izrade ove disertacije rezultirao je sljedećim znanstvenim doprinosima u području simulacija motora s unutarnjim izgaranjem:

- Usavršavanjem i daljnjim razvojem simulacijskog modela za proračun HCCI motora omogućeno je unapređenje procedura za analizu termodinamičkih procesa izgaranja u HCCI motoru.
- Primjenom novog višezonskog modela izgaranja s razdvojenim rješavačem i s proizvoljnim brojem zona u cilindru stvoren je alat koji omogućuje točniji izračun raspodjele temperature u prostoru izgaranja i detaljnije analize procesa izgaranja HCCI motora u odnosu na dosadašnje simulacijske modele HCCI motora.
- Na osnovi povećanog broja zona modela i njihovog drugačijeg rasporeda te na taj način određene raspodijele temperature u prostoru izgaranja u odnosu na postojeće modele HCCI motora omogućeno je točnije predviđanje emisija štetnih tvari.
- Novi model predstavlja doprinos pouzdanijem kritičkom vrednovanju HCCI motora kao potencijalnog procesa u budućim motorima s unutarnjim izgaranjem.

7.3. Mogući smjer daljnjih istraživanja

Nastavak istraživanja trebalo bi usmjeriti prema dodatnim poboljšanjima i unapređenjima pojedinih dijelova modela. Intenzivnom verifikacijom i validacijom modela utvrđeno je da u modelu koji se sada primjenjuje za izmjenu topline između zona postoji prostor za poboljšanja, posebno u pogledu vremenske konstante izmjene topline između zona. Isto tako bi predmetom poboljšanja mogao biti novi model izmjene topline između zona, koji kao parametar ne bi sadržavao vremensku konstantu, a istovremeno bi omogućio kvalitetnije modeliranje izmjene topline između zona na način da se obuhvati utjecaj geometrijskog položaja pojedine zone u prostoru izgaranja. Sljedeće poboljšanje vezano je uz implementaciju zadavanja početnih uvjeta višezonskog modela u koje bi bila uključena raspodjela kemijskog sastava po zonama. Time bi se obuhvatila nehomogenost sastava pa bi se realnije opisalo stanje u cilindru stvarnog motora. Nadalje za unapređenje modela trebalo bi u obzir uzeti i propuhivanje smjese uz klip, koje je ovim modelom zanemareno. Razdvojeni rješavač omogućuje primjenu paralelnog računanja na više procesora ili više računala istovremeno. Primjena paralelnog računanja dodatno bi skratila vrijeme izračuna i omogućila intenzivnija parametarska istraživanja i optimizaciju procesa izgaranja u HCCI motoru.

Popis citirane literature

- Rodrigue J.P., Comtois C., Slack B.: *The Geography of Transport Systems*, Routledge, ISBN 0-203-00111-7, Milton, 2006.
- [2] World Business Council for Sustainable Development: Mobility 2030: Meeting the challenges to sustainability, full report 2004, ISBN: 2-940240-57-4
- [3] CO₂ Emissions From Fuel Combustion Highlights 2014, International Energy Agency
- [4] Uredba (EZ) br. 443/2009 o utvrđivanju standardnih vrijednosti emisija za nove osobne automobile u okviru integriranog pristupa Zajednice smanjenju emisija CO2 iz lakih vozila
- [5] *Global transportation energy and climate roadmap*, International Council on Clean Transportation, Washington DC, 2012.
- [6] World Energy Outlook 2010, IEA Publications, ISBN: 978-92-64-08624-1, Pariz, 2010.
- [7] The Outlook for Energy: A View to 2040, ExxonMobil, 2014.
- [8] BP Energy Outlook 2035, BP January 2014, BP plc, 2014.
- [9] UREDBA (EZ) br. 715/2007 EUROPSKOG PARLAMENTA I VIJEĆA od 20. lipnja 2007. o homologaciji tipa motornih vozila u odnosu na emisije iz lakih osobnih i gospodarskih vozila (Euro 5 i Euro 6) i pristupu podacima za popravke i održavanje vozila
- [10] Šagi G., Tomić R, Ilinčić P.: *The Development of Regulations on Approved Harmful Substances Emissions From IC Engines*. Fuel and Lubricants, Vol. 48, No. 2, 2009, ISSN 0350-350X, p. 174-188.
- [11] Zhao, H.: HCCI and CAI engines for the automotive industry, Woodhead Publishing Limited, ISBN 978-1-84569-128-8, Cambridge, 2007.
- [12] Yao, M., Zheng, Z., Liu, H.: Progress and recent trends in homogeneous charge compression ignition (HCCI) engines, Progress in Energy and Combustion Science 35, 398 437, 2009.
- [13] Lu, X., Han, D., Huang, Z.: Fuel design and management for the control of advanced compression-ignition combustion modes, Progress in Energy and Combusion Science 37, 741 – 783, 2011.
- [14] Merker, G., P., Schwarz, C., Teichmann, R.: Combustion Engines Development -Mixture Formation, Combustion, Emissions and Simulation, Springer-Verlag, ISBN 978-3-642-02951-6, Berlin, 2012.

- [15] Easley, W., Agarwal, A., Lavoie, G.: Modeling of HCCI Combustion and Emissions Using Detailed Chemistry, SAE Technical Paper 2001-01-1029, 2001.
- [16] Komninos, N., Hountalas, D., Kouremenos, D.: Development of a New Multi-Zone Model for the Description of Physical Processes in HCCI Engines, SAE Technical Paper 2004-01-0562, 2004.
- [17] Guo, H., Neill, W. S., Li, H.: On the Formation of NO_X and N₂O in a HCCI Engine Fuelled with n-Heptane, Proceedings of Combustion Institute – Canadian Section, Spring Technical Meeting, Carleton University, Ottawa, 2010.
- [18] Komninos, N., Hountalas, D., Kouremenos, D.: Description of in-Cylinder Combustion Processes in HCCI Engines Using a Multi-Zone Model, SAE Technical Paper 2005-01-0171, 2005.
- [19] Annand, W. J.: Heat Transfer in the Cylinders of Reciprocating Internal Combustion Engines, Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Volume 177,36, 1963.
- [20] Komninos, N.: Modeling HCCI Combustion: Modification of a Multi-Zone Model and Comparison to Experimental Results at Varying Boost Pressure, Applied Energy 86, 2141–2151, 2009.
- [21] Ogink, R., Golovitchev, V.: Gasoline HCCI Modeling: An Engine Cycle Simulation Code with a Multi-Zone Combustion Model, SAE Technical Paper 2002-01-1745, 2002.
- [22] Ogink, R., Golovitchev, V.: Gasoline HCCI Modeling: Computer Program Combining Detailed Chemistry and Gas Exchange Processes, SAE Technical Paper 2001-01-3614, 2001.
- [23] Fiveland, S., Assanis, D.: A Four-Stroke Homogeneous Charge Compression Ignition Engine Simulation for Combustion and Performance Studies, SAE Technical Paper 2000-01-0332, 2000.
- [24] Kozarac, D., Lulic, Z., Sagi, G.: A Six-zone Simulation Model for HCCI Engines with Non-segregated Solver of Zone State, Combustion Theory and Modelling; 14:3, 425-451, 2010.
- [25] Woschni, G.: A Universally Applicable Equation for the Instantaneous Heat Transfer Coefficient in the Internal Combustion Engine, SAE Technical Paper 670931, 1967.
- [26] Hohenberg, G.: Advanced Approaches for Heat Transfer Calculations, SAE Technical Paper 790825, 1979.
- [27] Chang, J., Güralp, O., Filipi, Z., Assanis, D., Kuo, T. W., Najt, P., Rask, R.: New Heat Transfer Correlation for an HCCI Engine Derived from Measurements of Instantaneous Surface Heat Flux, SAE Technical Paper 2004-01-2996, 2004.

- [28] Xu, H., Liu, M., Gharahbaghi, S., Richardson, S., Wyszynski, M., Megaritis, T.: Modelling of HCCI Engines: Comparison of Single-zone, Multi-zone and Test Data, SAE Technical Paper 2005-01-2123, 2005.
- [29] Wyszynski M.L., Xu, H.M.: *HCCI with selected standard and alternative fuels: challenges and solutions*, Journal of KONES Internal Combustion Engines, 12 (3-4), ISSN 1231 – 4005, 2005.
- [30] Aceves, S., Martinez-Frias, J., Flowers, D., Smith, J. et al.: A Decoupled Model of Detailed Fluid Mechanics Followed by Detailed Chemical Kinetics for Prediction of Iso-Octane HCCI Combustion, SAE Technical Paper 2001-01-3612, 2001.
- [31] Aceves, M. S., Flowers, L. D., Westbrook, K. C., Smith, R. J., Pitz, W., Dibble, R., Christensen, M., Johansson, B.: A Multi-Zone Model for Prediction of HCCI Combustion and Emissions, SAE Technical Paper 2000-01-0327, 2000.
- [32] Aceves, M. S., Flowers, L. D., Martinez-Frias, J., Smith, R. J., Dibble, R. Au, M., Girard, J.: *HCCI Combustion: Analysis and Experiments*, SAE Technical Paper 2001-01-2077, 2001.
- [33] Aceves, S., Flowers, D., Espinosa-Loza, F., Martinez-Frias, J., Dec, J.E., Sjöberg, M., Dibble, R.W., Hessel, R.P.: Spatial Analysis of Emissions Sources for HCCI Combustion at Low Loads Using a Multi-Zone Model, SAE Technical Paper 2004-01-1910, 2004.
- [34] Jia, M., Xie, M., Peng, Z.: Applying the multi-zone model in predictioning the operating range of HCCI engines, Frontiers of Energy and Power Engineering in China, Volume 4, Issue 3, 414 423, 2010.
- [35] Kozarac, D.: Višezonski model izgaranja u HCCI motoru primjenom kemijske kinetike, doktorska disertacija, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb, 2008.
- [36] Onishi, S., Jo, S.H., Shoda, K., Jo, P.D., Kato, S.: Active Thermo-Atmosphere Combustion (ATAC) – a New Combustion Process for Internal Combustion Engines, SAE Technical Paper 790501, 1979.
- [37] Noguchi, M., Tanaka, T., Takeuchi Y.: A Study on Gasoline Engine Combustion by Observation of Intermediate Reactive Products During Combustion, SAE Technical Paper 790840; 1979.
- [38] Najt, P. M., Foster, D. E.: Compression-Ignited Homogeneous Charge Combustion, SAE Technical Paper 830264, 1983.

- [39] Thring, R. H.: Homogeneous-Charge Compression-Ignition (HCCI) Engines, SAE Technical Paper 892068, 1989.
- [40] Olsson, J., Tunestål, P., Johansson, B.: *Boosting for High Load HCCI*, SAE Technical Paper 2004-01-0940, 2004.
- [41] Baumgarten, C.: *Mixture Formation in Internal Combustion Engines*, Springer-Verlag, ISBN: 978-3-540-30835-5, Berlin, 2006.
- [42] Dec, J. E.: Advanced compression-ignition engines understanding the in-cylinder processes, Proceedings of the Combustion Institute, Volume 32, Issue 2, 2009
- [43] Komninos, N.P., Hountalas, D.T., Rakopoulos C.D.: A Parametric Investigation of Hydrogen HCCI Combustion Using a Multi-zone Model Approach, Energy Conversion and Management, Volume 48, Issue 11, ISSN: 0196-8904, 2007.
- [44] Sjoberg, M., Dec, J.: Ethanol Autoignition Characteristics and HCCI Performance for Wide Ranges of Engine Speed, Load and Boost, SAE International Journal of Engines 3 (1), ISSN: 1946-3936, 2010.
- [45] Shahangian, S. N., Jazayeri, S. A.: Effect of Initial Temperature and EGR on Combustion and Performance Characteristics of Homogenous Charge Compression Ignition Engine Fueled with Dimethyl Ether, The Journal of Engine Research, Volume 14, Number 14, ISSN: 1735-5214, 2009.
- [46] Komninos, N. P., Rakopoulos, C. D.: *Modeling HCCI combustion of biofuels: A review*, Renewable and Sustainable Energy Reviews, Volume 16, Issue 3, 1588-1610, ISSN 1364-0321, 2012.
- [47] Nobakht, A.Y., Saray, R. K., Rahimi, A.: A parametric study on natural gas fueled HCCI combustion engine using a multi-zone combustion model, Fuel, Volume 90, Issue 4, ISSN: 0016-2361, 2011.
- [48] Visakhamoorthy,S., Tzanetakis, T., Haggith, D., Sobiesiak, A., Wen, J.Z.: Numerical study of a homogeneous charge compression ignition (HCCI) engine fueled with biogas, Applied Energy, Volume 92, ISSN: 0306-2619, 2012.
- [49] Moriyoshi, Y., Kuboyama, T.: *Recent Progress in HCCI Combustion for a Practical Usage as a Gasoline Engine*, Journal of Automotive Safety and Energy, Vol. 3, No. 2, ISSN 1674-8484, 2012.
- [50] Merker, G. P., Teichmann, R.: *Grundlagen Verbrennungsmotoren*, Springer Vieweg Verlag, ISBN 978-3-658-03194-7, 2014.
- [51] Heywood, J. B.: Internal Combustion Engine Fundamentals, McGraw-Hill Science / Engineering / Math, ISBN 007028637X, 1988.

- [52] Medina, A., Curto-Risso, P. L., Hernández, A. C., Guzmán-Vargas, L., Angulo-Brown,
 F., Sen, A. K.: *Quasi-Dimensional Simulation of Spark Ignition Engines*, Springer Verlag, ISBN: 978-1-4471-5289-7, London, 2014.
- [53] Law, C. K.: Combustion at a crossroads: Status and prospects, Proceedings of the Combustion Institute, Volume 31, Issue 1, ISSN 1540-7489, 2007.
- [54] Etheridge, J., Bhave, A., Smallbone A., Coble, A., Mosbach, S., Kraft M.: Optimisation of Injection Strategy, Combustion Characteristics and Emissions for IC Engines Using Advanced Simulation Technologies, SAE Technical Paper 2011-26-0080, 2011.
- [55] Kozarac D., Mahalec I., Lulić Z.: Modeling of Multi Zone Chemical Kinetic Model in Avl Boost Environment, prezentacija, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb, 2008.
- [56] Cao, L., Bhave, A., Su, H., Mosbach, S., Kraft, M., Dris, A., McDavid, M. R.: Influence of Injection Timing and Piston Bowl Geometry on PCCI Combustion and Emissions, SAE Technical Paper 2009-01-1102, 2009.
- [57] Aceves, S., Flowers, D., Martinez-Frias, J., Espinosa-Loza, F. Christensen, M., Johansson, B., Hessel, R.P.: Analysis of the Effect of Geometry Generated Turbulence on HCCI Combustion by Multi-Zone Modeling, SAE Technical Paper 2005-01-2134, 2005.
- [58] Kong, S., Marriott, C., Reitz, R., Christensen, M.: Modeling and Experiments of HCCI Engine Combustion Using Detailed Chemical Kinetics with Multidimensional CFD, SAE Technical Paper 2001-01-1026, 2001.
- [59] Kong, S., Reitz, R., Christensen, M., Johansson, B.: Modeling the Effects of Geometry Generated Turbulence on HCCI Engine Combustion, SAE Technical Paper 2003-01-1088, 2003.
- [60] Jimenez-Espadafor, F. J., Torres Garcia, M., Correa Herrero, J. A., Becerra Villanueva,
 J. A.: *Effect of Turbulence and External Exhaust Gas Recirculation on HCCI Combustion Mode and Exhaust Emissions*, Energy & Fuels 2009 23 (9), 4295-4303,
 ISSN: 0887-0624, 2009.
- [61] Burcat, A., Ruscic, B. (2005): Third Millennium Ideal Gas and Condensed PhaseThermochemical Database for Combustion with Updates from ActiveThermochemical Tables, Argonne National Laboratory, Illinois 2005.
- [62] Podhorsky, R., Požar, H., Štefanović, D.: *TEHNIČKA ENCIKLOPEDIJA*, *13*,
 Leksikografski zavod Miroslav Krleža, ISBN: 953-6036-49-5, Zagreb, 1997.
- [63] Mehanizam kemijske kinetike za prirodni plin GRI-Mech 3.0, http://combustion.berkeley.edu/gri_mech/data/thermo_table.html

- [64] Battin-Leclerc, F., Simmie, J. M., Blurock, E.: Cleaner Combustion, Developing Detailed Chemical Kinetic Models, Springer-Verlag, ISBN: 978-1-4471-5306-1, London, 2013.
- [65] Upadhyay, K. S.: Chemical Kinetics and Reaction Dynamics, Springer-Verlag, ISBN: 1-4020-4546-8, 2006.
- [66] Zheng, J., Miller, D., Cernansky, N.: A Global Reaction Model for the HCCI Combustion Process, SAE Technical Paper 2004-01-2950, 2004.
- [67] McNenly, J. M., Havstad, A. M., Aceves, M. S., and Pitz, J. W.: *Integration Strategies* for Efficient Multizone Chemical Kinetics Models, SAE Int. J. Fuels Lubr. 3(1), 2010.
- [68] Kodavasal, J.: Effect of Charge Preparation Strategy on HCCI Combustion, doktorska disertacija, The University of Michigan, 2013.
- [69] Visakhamoorthy, S.: Modeling of Biofuelled HCCI Engines with a Parallel Multizone Model, doktorska disertacija, the University of Waterloo, Ontario, 2011.
- [70] Kongsereeparp P.: *Chemical Kinetic Based Simulation for an HCCI Engine and its Combustion*, doktorska disertacija, University of Alberta, Edmonton, 2008.
- [71] McNenly, M. J., Whitesides, R. A., Flowers, D.L.: Adaptive Preconditioning Strategies for Integrating Large Kinetic Mechanisms, 8th US National Combustion Meeting 2013, ISBN: 9781627488426, Utah, 2013.
- [72] Whitesides, R. A., McNenly, M. J., Flowers D. L.: Optimizing Time Integration of Chemical - Kinetic Networks for Speed and Accuracy, 8th US National Combustion Meeting 2013, ISBN: 9781627488426, Utah, 2013.
- [73] Korisnički priručnik AVL BOOST version 2010.1, edition 03/2011., AVL List GmbH
- [74] Galović, A.: *Termodinamika I*, Fakultet strojarstva i brodogradnje, ISBN: 953-6313-44-8, Zagreb, 2002.
- [75] Machrafi, H.: Green Energy and Technology, Bentham Science, eISBN: 978-1-60805-285-1
- [76] Dec, J., Sjöberg, M., A Parametric Study of HCCI Combustion the Sources of Emissions at Low Loads and the Effects of GDI Fuel Injection, SAE Technical Paper 2003-01-0752, 2003.
- [77] Kongsereeparp, P., Checkel, M.: Novel Method of Setting Initial Conditions for Multi-Zone HCCI Combustion Modeling, SAE Technical Paper 2007-01-0674, 2007.
- [78] Neshat, E., Saray, R. K.: Development of a new multi zone model for prediction of HCCI (homogenous charge compression ignition) engine combustion, performance and emission characteristics, Energy, Volume 73, ISSN 0360-5442, 2014.

- [79] Yelvington, P. E.: Design of a Viable HCCI Engine-A Computational Study with Detailed Chemical Kinetics, doktorska disertacija, Massachusetts Institute of Technology, Boston, 2004.
- [80] Aritmetički niz, http://mathworld.wolfram.com/ArithmeticSeries.html
- [81] Hairuddin A. A., Yusaf, T. F., Wandel A. P.: Predicting the Combustion Behaviour of a Diesel HCCI Engine Using a Zero – Dimensional Single-Zone Model, Proceedings of the Australian Combustion Symposium, The University of Newcastle 2011.
- [82] Komninos N.P., Kosmadakis, G.M.: Heat transfer in HCCI multi-zone modeling: Validation of a new wall heat flux correlation under motoring conditions, Applied Energy, Volume 88, Issue 5, ISSN 0306-2619, 2011.
- [83] Noda, T., Foster, D.: A Numerical Study to Control Combustion Duration of Hydrogen-Fueled HCCI by Using Multi-Zone Chemical Kinetics Simulation, SAE Technical Paper 2001-01-0250, 2001.
- [84] Amano, T., Morimoto, S., Kawabata, Y.: Modeling of the Effect of Air / Fuel Ratio and Temperature Distribution on HCCI Engines, SAE Technical Paper 2001-01-1024, 2001.
- [85] Bedoya, D. I., Cadavid, F., Saxena, S., Dibble, R., Aceves, S., Flowers, D.: A Sequential Chemical Kinetics-CFD-Chemical Kinetics Methodology to Predict HCCI Combustion and Main Emissions, SAE Technical Paper 2012-01-1119, 2012.
- [86] Soyhan, H.S., Yasar, H., Walmsley, H., Head, B., Kalghatgi, G.T., Sorusbay, C.: *Evaluation of heat transfer correlations for HCCI engine modeling*, Applied Thermal Engineering 29, 541–549. 2009.
- [87] Eichmeier, J. U., Reitz, R., Rutland, C.: A Zero-Dimensional Phenomenological Model for RCCI Combustion Using Reaction Kinetics, SAE Technical Paper 2014-01-1074, 2014.
- [88] Bedoya, D. I., Cadavid, J. F., Saxena S., Dibble, W. R.: Numerical Analysis of Biogas Composition Effects on Combustion Parameters and Emissions in Biogas Fuelled HCCI Engines for Power Generation, Proceedings of the ASME 2011 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference ICEF2011, Morgantown, 2011.
- [89] Bedoya, I. D., Saxena, S., Cadavid, F. J., Dibble, R. W., Wissink, M.: Experimental evaluation of strategies to increase the operating range of a biogas-fueled HCCI engine for power generation, Applied Energy, Volume 97, ISSN 0306-2619, 2012.
- [90] Mahalec, I.: Utjecaj nepravilnosti profila brijega bregastog vratila na njegova dinamička svojstva, doktorska disertacija, Fakultet strojarstva i brodogradnje, Zagreb, 1996.

Kratak životopis

Petar Ilinčić rođen je 3. studenog 1980. godine u Zagrebu. Osnovnu školu pohađa u Oroslavju, Gimnaziju A. G. Matoš u Zaboku. Fakultet strojarstva i brodogradnje upisao je 1999. godine, a diplomirao je 2007. godine na Konstrukcijskom smjeru, usmjerenje Motori i vozila. Od 2007. godine zaposlen je kao stručni suradnik, a od 2009. godine kao asistent na Katedri za motore i vozila, Fakulteta strojarstva i brodogradnje. Područje istraživanja su mu motori s unutarnjim izgaranjem. Kao autor ili koautor objavio je 18 znanstvenih i stručnih radova u časopisima i zbornicima skupova u Hrvatskoj i inozemstvu. Služi se engleskim jezikom.

Kratak životopis na engleskom jeziku

Petar Ilinčić was born on November 3rd, 1980 in Zagreb. He attended Primary school in Oroslavje and high school A. G. Matoš in Zabok. In 1999 he enrolled at the Faculty of Naval Architecture (FAMENA) of the University of Zagreb. He graduated from the Department of Mechanical Design, IC Engines and Motor Vehicles in 2007. Since 2007, he has been employed at the FAMENA at the Chair of IC Engines and Motor Vehicles, first as a professional associate and then, since 2009, as assistant. His fields of interest are IC Engines and Vehicles. As the author or co-author he has published 18 scientific and professional papers in journals and conference proceedings in Croatia and abroad. He can speak and write English.