

Populärvetenskaplig artikel

Modellering av kväveoxidbildning i Heavy Duty-motorer

Kenan Murić

Bakgrund

I dagens moderna samhälle tar vi för givet att de varor vi behöver för vårt dagliga liv alltid finns nära till hands. Om man ägnar en tanke åt detta påstående är det inte längre särskilt självklart. Detta var i synnerhet fallet för människorna som levde under 1800-talet och tidigare. Den vanlige medborgaren då kunde knappast unna sig lyxvaror som bananer från Sydamerika, te från Kina eller brasilianska kaffeböner. Varor som vi idag tar för givet och förutsätter skall finnas i våra närbutiker var för inte så länge sedan lyxvaror reserverade för den europeiska societeten.

Att situationen fundamentalt ändrades berodde bland annat på de tekniska genombrott man hade gjort under 1800- och 1900-talet. Det är en lång logistisk kedja från bananodlaren i Colombia till slutkonsumenten i Lund eller Luleå, men den finns där och har gjort så i ett bra tag nu. Denna logistiska kedja innefattar transport med tåg, flyg och lastbil. Det kan knappast ha undgått någon att man i mediala sammanhang ofta talar om baksidorna med lastbils- och flygtransporter, men faktum är att mycket av det vi tar för givet idag inte skulle ha funnits i våra dagliga liv utan dessa ”miljöbovar”. Dessvärre tar detta inte bort de miljöproblem som de facto orsakas av tunga vägtransporter. På lastbilstillverkaren Scania ser man allvarligt på de miljöproblem som skapas av långa transportsträckor och bränsleslukande lastbilar. Dessa transporter startar oftast sin färd i rurala områden, där bonden finns, och slutar i urbana städer där slutkonsumenten huserar. Avståndet är stort mellan producent och konsument i dagens globaliserade värld, och miljöproblemen likaså.

Scania är en lastbilsproducent som tar samhällets ökande miljöfokus på största allvar. Detta görs bland annat genom stora satsningar på utveckling av efterbehandlingssystem. Efterbehandlingssystemet tar hand om de av motorn producerade föroreningar som annars skulle komma ut i naturen och göra stor skada på miljön. Ett av de miljöförorenande ämnena man försöker få bukt med är utsläppet av kväveoxider. Kväveoxiderna är skadliga för både människor och djur, och i värsta fall är utgången också dödlig vid exponering av för stora mängder kväveoxider.

Alla lastbilsproducenter som verkar på den europeiska (specifikt: Europeiska unionen) marknaden måste följa de miljölagar som stiftas av den europeiska kommissionen. Direktiven för lastbilstillverkarna går under namnet Euro I, II, III, IV, V respektive VI, där det senaste direktivet är direktiv nummer VI. Gränserna för kväveoxidutsläpp är mycket stränga och enligt det senaste direktivet måste nya lastbilar släppa ut betydligt mindre kväveoxid än vad tidigare lagstiftning inom området krävt. Detta kräver metoder för att både mäta och skatta kväveoxidmängder som bildas vid förbränning av diesel i en Heavy Duty-motor.

Modellen

Inledande om modellen

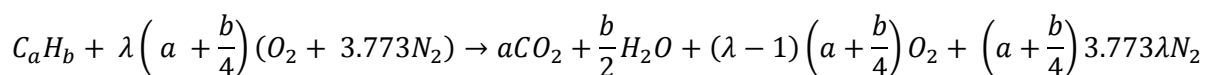
Kväveoxider bildas vid förbränning, främst genom tre olika mekanismer: prompt bildning, bränslebildning och termisk bildning. Den mest bidragande mekanismen vid höga temperaturer är termisk bildning. Då är arbetstemperaturerna i motorn tillräckligt höga för att syret och kvävet i luften, som ingår i förbränningen, ska reagera och bilda kväveoxid. Prompt bildning och bränslebildning av kväveoxider bildas på ett mer omständigt tillvägagångssätt. Prompt bildning går ut på att kolväten reagerar med kvävet i luften och bildar molekyler som sedan kan bilda kväveoxider. Bränslebildning förutsätter att det finns kväve i bränslet som vid förbränning kan bilda kväveoxider med syret i luften. Modellen som presenteras i detta examensarbete utgår från den termiska formationsmekanismen. Att modellera inverkan av bränslebildning och prompt bildning är däremot inte lika enkelt och oftast bortser man från dessa två i praktiska sammanhang, då modellen implementeras i kod.

Det finns två olika sätt att minska utsläppen av kväveoxider. Det ena är att använda SCR (**S**elective **C**atalytic **R**eduction) där kväveoxiderna istället omvandlas till kvävgas, koldioxid och vatten, genom en kemisk reaktion med tillsatsämnet urea. Ett annat sätt är att inkorporera en EGR-funktion i motorn. Enkelt uttryckt är EGR (**E**xhaust **G**as **R**ecirculation) en återkoppling av avgaserna som produceras vid förbränning av bränsle. Genom att göra denna återkoppling kan man både få ner temperaturen, men också koncentrationen av luft vid själva förbränningen. Eftersom SCR ingår i efterbehandlingssystemet har den ingen direkt inverkan på kväveoxidbildningen, men det har däremot EGR-funktionen på grund av dess direkta inverkan på förbränningstemperaturen.

För att i framtiden kunna reglera utsläpp av kväveoxider behövs matematiska modeller som beskriver hur mycket utsläpp som faktiskt bildas. Den matematiska/fysikaliska modellen som förslås i detta examensarbete bygger på vissa antaganden. Ett av dessa antaganden är att förbränningsrummet, det vill säga motorcyklindern, kan delas upp i två specifika områden: ett område där förbränningen av bränsle sker och ett annat där inget märkvärdigt händer. Dessa två områden brukar kallas bränd zon respektive obränd zon. Det är i den brända zonen som kväveoxider bildas och som sedan kommer ut i naturen. Den obrända zonen å andra sidan, antas bestå av luft, EGR och oförbränt bränsle. Ett annat antagande är att det inte finns några värmeövergångar mellan områdena och att den obrända zonen bara ändrar temperatur på grund av tryckförändring i cylindern, det vill säga isentropisk kompression.

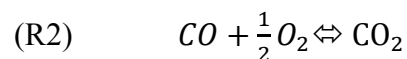
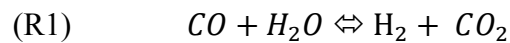
Förbränningen

Själva förbränningen som sker i den brända zonen kan med kemins nomenklatur och bränslet C_aH_b skrivas som:



Symbolen λ anger här förhållandet mellan luft och bränsle. Reaktionen ovan används för att bestämma syre- och kvävekoncentrationen. Dessa koncentrationer är ytterst väsentliga för kväveoxidbildningen i cylindern. I modellen antas förbränningen ske under stökiometriska förhållanden då $\lambda = 1$.

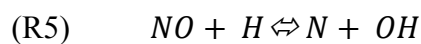
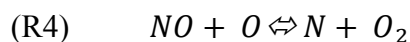
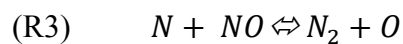
Förbränningsreaktionen ovan återger dock inte hela sanningen. Ofta lägger man till ytterligare två reaktioner för att beskriva bildningen av koloxid och därmed dess inverkan på koncentrationerna av syre och kväve.



Man kan ganska enkelt ur detta se att dessa två kemiska reaktioner kommer att ha en inverkan på koncentrationen av syre och därmed också kväveoxidbildningen.

Zeldovich-mekanismen

I den brända zonen används också något som kallas Zeldovich-mekanismen för att bestämma hur mycket kväveoxid som bildas. Zeldovich-mekanismen beskriver tre kemiska reaktioner som antas vara dominerade i kväveoxidbildning. Dessa är:



Det finns betydligt fler reaktionsmekanismer där kväveoxid kan bildas men Zeldovich visade att (R3)–(R5) var de absolut dominerande reaktionsvägarna.

Temperaturberäkningar

För att kunna använda Zeldovich-mekanismens tre reaktioner behövs ytterligare information. Det visar sig att ovan givna reaktioner är starkt temperaturberoende. Med andra ord måste temperaturen i den brända zonen bestämmas för att gå vidare i modelleringen. Denna temperatur kan bestämmas genom att använda tryckgivare i cylinder som med jämna mellanrum mäter trycket. Ifall man känner till trycket är det möjligt att även beräkna temperaturen, förutsatt att ett homogent tryck råder i hela motorcylindern. När temperaturen väl är känd kan man med hjälp av (R1)–(R3) beräkna kvantiteter kväveoxid som bildas under antagandet att kemisk jämvikt hinner ställa in sig.

Temperaturen bestäms från det enkla termodynamiska sambandet:

$$dQ = mc_p dT$$

dQ är frigiven värme vid förbränning, m är massan av produkterna som bildas vid förbränningen, c_p är specifik värmekapacitet vid konstant tryck och dT är temperaturökningen som sker till följd av värmeutvecklingen.

Den specifika värmekapaciteten talar om hur mycket värme som behöver tillföras för att masselementet ska få en temperaturökning dT . Det är här inverkan av EGR på kväveoxidbildningen kommer in i bilden. Det visar sig att EGR höjer den specifika värmekapaciteten och därmed fås lägre temperatur. Tidigare konstaterades att höga temperaturer är en förutsättning för kväveoxidbildningen. En lägre temperatur ger därmed mindre kväveoxid.

Den frigjorda värmeenergin Q kan bestämmas från värmefrigörelse-ekvationen, som ges av:

$$\frac{dQ}{d\varphi} = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p \frac{dV}{d\varphi} + \frac{1}{\gamma - 1} V \frac{dp}{d\varphi}$$

Symbolen γ motsvarar den termodynamiska storhet som brukar benämnas *polytropisk exponent*, V är cylindervolymen, p är trycket och φ är vevvinkeln. Ofta lägger man dessutom till en term för eventuella värmeförluster som sker till omgivningen (cylinderväggen).

Detta kan enklast göras med ett samband som kallas för Woschni-ekvationen. Denna utgår i stora drag från Newtons avkylningslag:

$$\dot{T} = k\Delta T$$

Konstanten k bestäms slutligen från Woschni-sambandet $k = 3.26B^{-0.2}p^{0.8}T^{-0.55}w^{0.8}S$. De ingående storheterna är: B motsvarar borrhådiameter, w är gasens medelhastighet och storheten S är kontaktytan mellan cylindergasen och cylindervägg. S approximeras ofta med cylinderns mantelarea.

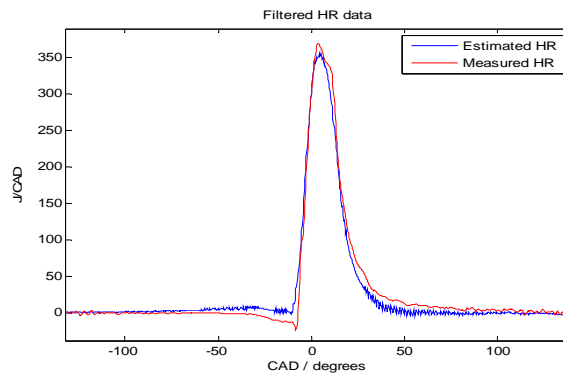
Temperaturen i den obrända zonen bestäms av sambandet för isentropisk kompression:

$$T = \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$$

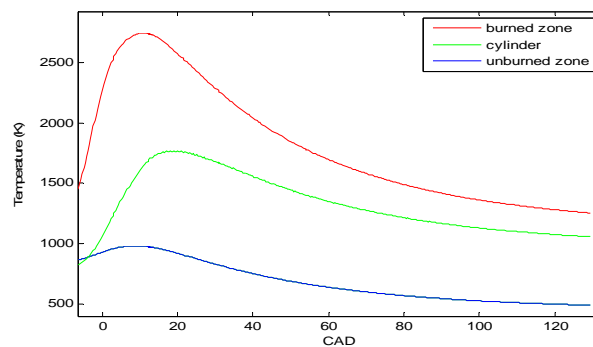
Medeltemperaturen i cylindern bestäms utifrån den välkända allmänna gaslagen $pV = nRT$ där n är total substansmängd gas och R den ideala gaskonstanten.

Modellens resultat

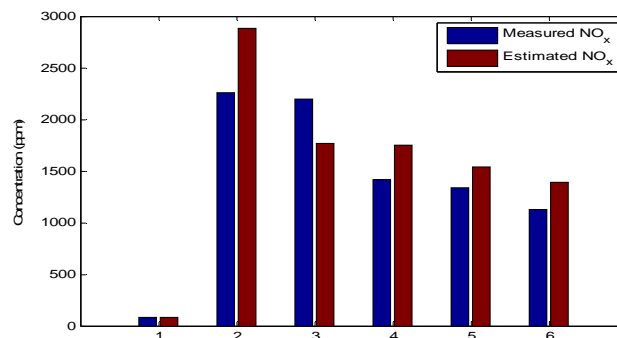
När koncentrationen av kväveoxid väl kan beräknas utifrån tryck, temperatur, förbränningskemi och Zeldovich-mekanismen, kan modellen i framtiden användas till att minska utsläppen med hjälp av reglertekniska finesser. Några intressanta resultat kan studeras i Figur 1, Figur 2 och Figur 3.



Figur 1 – Beräkningen av frigiven värme under förbränningen i enheten Joule/vevinkelgrad.



Figur 2 – Resultat av temperaturberäkningar. Den brända zonen är varmast, följt av cylinderns medeltemperatur och slutligen temperaturen i den obrända zonen. Detta är givetvis väntat.



Figur 3 – Jämförelse mellan beräknad kväveoxidkoncentration och uppmätt koncentration kväveoxid.

Implementeringsaspekter

Modellen ska i framtiden också implementeras på en FPGA. En FPGA är en integrerad krets som används för snabba beräkningar i olika praktiska applikationer där man inte nödvändigtvis är intresserad av att ha en konventionell PC-dator. Problemet med en FPGA är att den har väldigt begränsat minne och att divisioner samt olinjära uttryck tar lång tid att beräkna, även om det går. Eftersom den presenterade modellen är vevinkelupplöst är det väldigt viktigt att man tillräckligt snabbt kan beräkna hur mycket kväveoxid som bildas vid en viss tidpunkt.

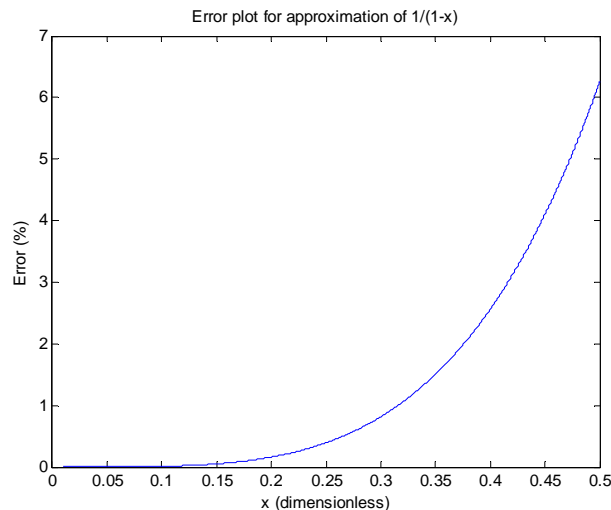
För att man i framtiden ska undvika divisioner och olinjära samband i beräkningar som utförs på en FPGA föreslås i detta examensarbete en enkel algoritm för division och därutöver en interpoleringsmetod som baseras på en flervariabel minsta kvadrat-metod.

Divisionsalgoritmen

Divisionsalgoritmen utgår från att divisionen $\frac{1}{1-x}$ bland annat kan approximeras, under förutsättningen att $|x| < 1$, som:

$$\frac{1}{1-x} = \frac{(1+x)(1+x^2)}{1-x^4} \sim (1+x)(1+x^2)$$

Det är ytterst vanligt att FPGA-kod implementeras med fixpunktsteknik. I sådana fall kan man med hjälp av bitskift göra så att nämnare uppfyller villkoret $|x| < 1$.



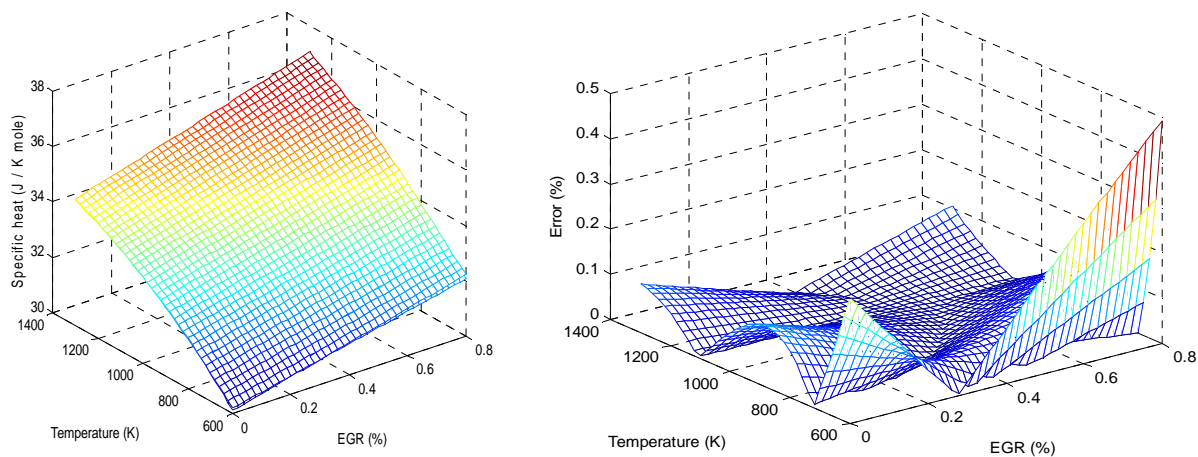
Figur 4 - Felet som erhålls då divisionen $\frac{1}{1-x}$ approximeras med $(1+x)(1+x^2)$.

LSQ-metoden

För att exempelvis bestämma den specifika värmekapaciteten behövs tidsmässigt ganska omständliga beräkningsoperationer och tabuleringar. För att undvika detta kan man göra en enkel ansats: den specifika värmekapaciteten är bara beroende av EGR-nivåer och temperatur. Detta kan uttryckas som en funktion $c_p = f(EGR, T)$. Genom att beräkna specifik värmekapacitet vid många olika kombinationer av EGR-nivåer och temperaturer kan man använda minsta kvadrat-metoden för att få fram $f(EGR, T)$. Detta blir då ett polynom som är beräkningseffektivt och ej heller särskilt minneskrävande. Funktionen erhålls genom att lösa följande ekvation:

$$E(\bar{P}) = \sum_{i=1}^n (z_i - \bar{P}\bar{Q}_i)^2$$
$$\nabla E(\bar{P}) = 2 \sum_{k=1}^n (z_k - \bar{P}\bar{Q}_i) \bar{Q}_i = 0$$

Storheten z skulle då, enligt ovan givna exempel, motsvara den specifika värmekapaciteten. P innehåller interpoleringsparametrarna och Q är en funktion av x och y , som helst ska vara ett polynom. Variablerna x och y motsvarar i sådana fall temperatur och EGR-nivå. I figur 5 visas resultaten av felet när man approximerar den specifika värmekapaciteten på detta vis.



Figur 5 – Interpolation av specifik värmekapacitet vid konstant tryck. Den högra figuren anger felet. Notera skillnaden i skala mellan figurerna.

Referenser

K. Murić, Master's thesis, Department of Automatic Control, Lund University, Modeling of NO_x formation in heavy duty engines, 2011.

R. Egnell, On Zero-dimensional Modelling of Combustion and NO_x formation in Diesel Engines, 2001, ISSN: 0282-1990.

C. Wilhelmsson, Embedded Systems and FPGAs for implementation of control oriented Models, November 2009, LUTMDN/TMHP—09/1068--SE.

Euro VI Regulations for emissions from Lorries and Buses, EEB position paper, European Environmental Bureau, Contact person: Dragomira Raeva, dragomira.raeva@eeb.org, 2008.