

# Experimental Investigations for Phenomenological Modelling of Two-Stage Auto-Ignition under HCCI Conditions

**Doctoral Thesis**

**Author(s):**

Mitakos, Dimitrios A.

**Publication date:**

2014

**Permanent link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010421729>

**Rights / license:**

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

Diss. ETH No. 22323

**Experimental Investigations for  
Phenomenological Modelling of Two-Stage  
Auto-Ignition under HCCI Conditions**

A thesis submitted to attain the degree of  
DOCTOR OF SCIENCES OF ETH ZURICH  
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

DIMITRIOS ANGELOS MITAKOS

Diploma in Mechanical Engineering  
Aristotle University of Thessaloniki

born August 30, 1982  
citizen of Greece

accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. Konstantinos Boulouchos, examiner  
Prof. Dr. Michael Bargende, co-examiner

2014

# Abstract

The present work focuses on the development of a methodology for ignition delay prediction in Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) engines.

The HCCI combustion process is quite promising for the simultaneous, in-cylinder soot and NO<sub>x</sub> reduction. Nevertheless, its wide-spread application in internal combustion engines is hindered by difficulties mainly related to its controllability under varying operation conditions. Due to the absence of an ignition-controlling event (spark or liquid fuel injection), the ignition time and heat release control relies on the indirect control of engine operating parameters, such as charge inlet temperature, boost pressure, and EGR rate. Modern synthetic fuels can, to a certain extent, be ‘tailored’ to the needs of the HCCI process. Thus, fuel becomes an important parameter for the development of a controlling strategy. Aiming at a controllable HCCI combustion, detailed knowledge of the auto-ignition behavior of modern, practical, and alternative fuels under different operating conditions is necessary. The chemical kinetic modeling mechanisms commonly used for the study of the auto-ignition of various fuels are computationally demanding and usually not developed for multi-component fuels. Phenomenological ignition delay models are often used, instead, as a computationally efficient tool for the auto-ignition study of practical fuels and for ‘first-order’ design purposes.

The aim of the this work is to provide a novel phenomenological ignition delay model, appropriate for the prediction of ignition in an HCCI engine environment. The cornerstone of the approach followed is the fact that the proposed model includes all of the effects resulting from the two-stage heat release of heavier hydrocarbons, particularly alkanes. The Negative Temperature Coefficient (NTC) behavior of the main ignition delay as well as the Low-Temperature Heat Release (LTHR) are considered.

Transient ignition delay and heat release data were obtained from experiments in an optically accessible Rapid Compression Expansion Machine (RCEM). OH-chemiluminescence and spectrography measurements performed in parallel, provided insight into the combustion process. Three primary reference fuels (n-heptane, PFR25 and PRF50) and two synthetic fuels (Naphtha1, Naphtha2) were investigated under homogeneous conditions, for a variety of initial charge temperatures, EGR rate, and equivalence ratios.

The homogeneous operation of the RCEM was validated by the optical characteristics of the induced combustion. OH-chemiluminescence images revealed extended homogeneity, with total absence of non-reactive zones. Very fast coverage of the cylinder volume with reaction zones, characterized by rapidly (faster than flame speed) propagating auto-ignition fronts, suggested minimum spatiotemporal deviation of ignition delay. Moreover, the light emission spectrum was dominated by the CO-O continuum, which is characteristic of homogeneous combustion.

A pre-existing ‘3-Arrhenius’ ignition delay model, parameterized on shock tube steady-state data, was used as a basis for the model proposed in this work. This model describes well the NTC behavior of the main ignition delay and is also able to predict the Low Temperature Reaction (LTR) ignition. The transferability of the model to the transient environment of the RCEM was examined. Applied through the knock-integral method on experimental combustion pressure/temperature traces, the model was found capable of describing accurately the transient main ignition delay, but it overpredicted the LTR ignition delay time. Nevertheless, the model could not be used for predictive calculations of the main ignition delay without an a-priori knowledge of the cool-flame heat release magnitude and shape.

In this work, the LTHR (or cool-flame) characteristics, as obtained from the experiments, and their correlation to the operating conditions were studied. A simple and mathematically independent cool-flame heat release model was empirically derived from the measured LTR heat release data. Chemical kinetic mechanism simulations revealed large variation in phasing, magnitude, and shape of the LTHR among the different mechanisms examined. Comparison with the experiments showed that the most accurate mechanisms, in terms of heat release magnitude, are the detailed ones. Therefore, the cool-flame heat release model could be potentially parameterized on data from simulations as well, but the validity of the selected mechanism, particularly with regard to LTHR characteristics and phasing, should be previously ascertained.

---

The cool-flame heat release model is used solely for obtaining the cool-flame heat release profile. The ‘3-Arrhenius’ ignition delay model was re-parameterized on RCEM data, in order to predict accurately the LTR ignition. As the cool-flame heat release model provides the pressure/temperature rise after LTR ignition, with the combination of the two models, both LTR and main ignition delays can be computed for any ‘motored’ or simulated trace. As a final step, the performance and applicability of the combined model was evaluated. Excellent agreement was observed between experimental ignition delays and the computed ignition delays with the cool-flame integrated ‘3-Arrhenius’ ignition delay model.

Although not including any chemical reaction dynamics, the proposed combined model can be promptly used for the fuels examined in this work, as a rapid and computationally efficient tool for prediction of homogeneous ignition delay in simulation and control applications. Moreover, the methodology presented in this work, is applicable to a great variety of two-stage ignition fuels that could potentially be used in HCCI engine processes.

# Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Entwicklung einer Methode für die Berechnung des motorischen Zündverzuges im homogenen Brennverfahren (HCCI, Homogeneous Charge Compression Ignition).

Das HCCI-Brennverfahren verspricht eine gleichzeitige innermotorische Reduktion sowohl der Russ- als auch der Stickoxid( $\text{NO}_x$ )-Emissionen. Eine ausgedehnte Nutzung des Brennverfahrens in Verbrennungsmotoren wird allerdings dadurch behindert, dass die Verbrennung unter wechselnden Betriebsbedingungen nur schwer kontrollierbar ist. Da keine Zündquelle vorhanden ist (Zündkerze oder Kraftstoff-Einspritzung), müssen Zündzeitpunkt und Verbrennung indirekt durch die Betriebsparameter des Motors (Einlasstemperatur, Ladedruck, Abgas-Rückführrate etc.) eingestellt werden. Ein zusätzlicher Kontrollparameter könnte die Zusammensetzung neuer synthetischer Kraftstoffe sein, die an die Anforderungen des HCCI-Brennverfahrens angepasst werden. So würde der Kraftstoff ebenfalls zu einem wichtigen Parameter in der Entwicklung besserer HCCI Kontroll-Strategien. Im Hinblick auf die Entwicklung besser kontrollierbarer HCCI-Brennverfahren in Motoren müssen detaillierte Kenntnisse über das Selbstzündverhalten moderner, normaler und alternativer Kraftstoffe unter verschiedensten Betriebsbedingungen vorhanden sein. Computersimulationen mit chemisch-kinetischen Modellmechanismen werden häufig für die Untersuchung der Selbstzündeigenschaften von Kraftstoffen eingesetzt, sie sind jedoch sehr Rechenaufwendig und wurden zudem oft nicht für Mehrkomponentenkraftstoffe entwickelt. Phänomenologische Zündverzugsmodelle sind dagegen deutlich weniger rechenintensiv und werden daher häufig in rechnerischen Anwendungen für Selbstzündungsstudien oder CFD-Simulationen der motorischen Verbrennung eingesetzt.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, ein neues phänomenologisches Zündverzugsmodell zu erarbeiten, das für die Vorhersage des Zündverzugs einer motorischen HCCI-Verbrennung hervorragend geeignet ist. Dies beruht

auf der Tatsache, dass das vorgeschlagene Modell alle durch die zweistufige Wärmefreisetzung schwererer Kohlenwasserstoffe (insbesondere Alkane) hervorgerufenen Effekte mit einschliesst, inklusive des Temperaturbereichs mit negativem Temperaturkoeffizienten (NTC, Negative Temperature Coefficient) des Zündverzugs und der bei der Tieftemperaturreaktion freigesetzten Wärmemenge (LTHR, Low Temperature Heat Release).

Die experimentellen Daten des Zündverzugs und der Wärmefreisetzung wurden in einem optisch zugänglichen Einhubtriebwerk (RCM, Rapid Compression and Expansion Machine) erhoben. Einen tieferen Einblick in die Verbrennung erlaubte die gleichzeitige bildmässige Erfassung sowohl der OH-Chemilumineszenz als auch der Spektren des emittierten Lichts. Drei primäre Referenzkraftstoffe (n-Heptan, PRF25 und PRF50) und zwei synthetische Kraftstoffe (Naphta1 und Naphta2) wurden unter homogenen Bedingungen für unterschiedliche Kraftstoff-Luft-Verhältnisse, Abgasrückführaten und Ladungstemperaturen (vor der Kompression) vermessen.

Der homogene Betriebsmodus im Einhubtriebwerk wurde durch die optischen Messungen validiert: Die Bilder der OH-Chemilumineszenz zeigen weitgehende Homogenität ohne Bereiche mit fehlender Reaktivität. Die Reaktionszonen füllten das Zylindervolumen in sehr kurzer Zeit aus. Charakteristisch waren dabei die sich sehr schnell (viel schneller als mögliche Flammgeschwindigkeiten) ausbreitenden Selbstzündungszonen, die auf minimale räumlich-zeitliche Unterschiede im Selbstzündverzug hindeuten. Die Spektren des emittierten Lichts während der Verbrennung wurde zudem durch das CO-O Kontinuum dominiert, was eine weitere Charakteristik der Homogenen Verbrennung darstellt.

Als Ausgangsbasis für diese Arbeit diente ein bereits existierendes '3-Arrhenius' Zündverzugsmodell, das mit Daten aus Messungen in einem Stossrohr parametrisiert wurde. Dieses Modell beschreibt das NTC-Verhalten des Hauptzündverzugs sehr gut und kann zudem auch den Zündverzug der Tieftemperaturreaktion (LTR) vorhersagen. Die Eignung dieses Modells für die transiente Umgebung im Einhubtriebwerk wurde durch die Anwendung des Zündverzugsmodells im Zündintegral untersucht. Für die Hauptverbrennung (HTR, High Temperature Reaction) stimmen die gemessenen Zündverzüge sehr gut mit dem auf die experimentellen Druck- und Temperaturläufe angewendeten Modell überein, für die Tieftemperaturreaktion (LTR) liefert das Modell hingegen tendenziell zu lange Zündverzüge. Dennoch kann das existierende Zündverzugsmodell nicht ohne a Priori Kenntnis der Freisetzungsmenge und -form der Tieftemperaturreaktionswärme für Voraussagen zum Zündverzug der Hauptverbrennung benutzt werden.

---

In dieser Arbeit wurde die Charakteristik der Wärmefreisetzung der Tieftemperaturreaktion (LTHR, Low Temperature Heat Release or Cool Flame) in Abhängigkeit von den Betriebsbedingungen experimentell untersucht. Daraus wurde empirisch ein einfaches, mathematisch vom Zündverzugsmodell unabhängiges Modell für die LTR-Wärmefreisetzung entwickelt. Entsprechende chemisch-kinetische Computersimulationen zeigen bezüglich der Phase, des Betrages und der Form der LTR-Wärmefreisetzung grosse Unterschiede zwischen den verfügbaren Mechanismen, wobei die detaillierten Mechanismen die beste Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Wärmemengen der LTR aufzeigten. Daher ist es grundsätzlich auch möglich, das in dieser Arbeit entwickelte Modell der LTR-Wärmefreisetzung mittels Daten aus entsprechenden Computersimulationen zu parametrisieren, der dazu eingesetzte chemisch-kinetische Mechanismus müsste aber in Bezug auf die LTR Wärmefreisetzungseigenheit zuvor sorgfältig validiert werden.

Das neue LTHR-Wärmefreisetzungsmodell wird nur für die Bestimmung des Verlaufs der LTHR-Wärmefreisetzung nach der LTR-Zündung eingesetzt. Das bereits existierende '3-Arrhenius' Zündverzugsmodell wurde aufgrund der Messdaten aus dem Einhubtriebwerk neu parametrisiert, um den LTR-Zündzeitpunkt genauer beschreiben zu können. Durch die Kombination dieser beiden Modelle kann nun sowohl der Zündverzug der LTR als auch der Hauptzündverzug der HTR korrekt vorausberechnet werden. Die einzige Voraussetzung dafür ist ein gemessener oder berechneter Kompressionsverlauf (Druck/Temperatur) ohne Verbrennung. Ein Vergleich zwischen den experimentell ermittelten und den mit der Kombination des LTR-Wärmefreisetzungsmodells und des '3-Arrhenius' Zündverzugsmodells berechneten LTR- und HTR-Zündverzügen zeigt eine hervorragende Übereinstimmung mit allen untersuchten Betriebsparameter.

Obwohl das hier vorgeschlagene kombinierte Modell für die Berechnung der Zündverzügen keinerlei Dynamik der ablaufenden chemischen Reaktionen enthält, kann es umgehend für Anwendungen mit den hier untersuchten Kraftstoffen eingesetzt werden, denn es stellt eine schnelle und sehr wenig Rechenleistung erfordernde Methode für die Berechnung der homogenen Zündverzügen in CFD-Simulationen oder auch in Motorsteuerungen dar. Zudem ist die in dieser Arbeit vorgestellte Methodik auf eine grosse Bandbreite von Kraftstoffen anwendbar, die eine zweistufige Zündung aufweisen und in HCCI-Brennverfahren eingesetzt werden.