



Doctoral Thesis

## Numerical analysis of mixture formation and combustion in a hydrogen direct-injection internal combustion engine

**Author(s):**

Gerke, Udo

**Publication Date:**

2007

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-005540349> →

**Rights / License:**

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

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

Diss. ETH No. 17477

# Numerical Analysis of Mixture Formation and Combustion in a Hydrogen Direct-Injection Internal Combustion Engine

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY  
ZURICH

for the degree of  
DOCTOR OF SCIENCE

presented by  
UDO GERKE  
Dipl.-Ing. Uni. Stuttgart  
born February 26<sup>th</sup>, 1978  
citizen of Munich, Germany

accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. Konstantinos Boulouchos, ETH Zurich, examiner  
Prof. Dr. Andreas Wimmer, TU Graz, co-examiner  
Prof. Dr. Aldo Steinfeld, ETH Zurich, co-examiner

2007

# Abstract

The present work investigates the mixture formation and combustion process of a direct-injection (DI) hydrogen internal combustion engine by means of three-dimensional numerical simulation. The study specifies details on the validity of turbulence models, combustion models as well as aspects on the definition of hydrogen-air burning velocities with respect to hydrogen IC engine applications. Results of homogeneous, stratified and multi-injection engine operation covering premixed, partially premixed and non-premixed combustion of hydrogen are presented.

Results of the numerical simulations are validated using data of experimental analysis from parallel works [44, 59], employing a one-cylinder research engine and a research engine with optical access. As a fundamental contribution to combustion modelling of hydrogen IC engines, a new correlation for laminar burning velocities of hydrogen-air mixtures at engine-relevant conditions is derived from measurements of premixed outwards propagating flames conducted in a single-cylinder compression machine.

Numerical results of the direct-injection mixture formation give a detailed understanding of the interrelation between injection timing and the degree of mixture homogenisation. A favourable agreement between the computed fuel concentration and results of Planar Laser Induced Fluorescence (PLIF) measurements is reported for various injection timings. Different two-equation turbulence models, a Shear Stress Transport (SST) model and a  $k$ - $\epsilon$  model based on Renormalisation Group (RNG) theory as well as a Reynolds Stress Model (RSM) are discussed. The impact of the models on the level of turbulent kinetic energy proves to be of major importance.

State-of-the-art turbulent combustion models on the basis of turbulent flame speed closure (TFC) and on the basis of a flame surface density approach, the Extended Coherent Flame Model (ECFM), are examined. The models are adapted to hydrogen internal combustion engines and are interfaced to the established three-dimensional flow field solver ANSYS CFX within the framework of the international research project *HyICE* [15, 36, 112]. Two different approaches are investigated as input for the laminar burning velocities of hydrogen. Firstly, flame speed data are computed with a kinetic mechanism proposed by Conaire et al. [86]. Secondly, an existing experimentally derived laminar flame speed correlation is extended to rich air/fuel equivalence ratios ( $\lambda < 1$ ) and is compared to measurements conducted within the present work.

In general, the TFC-models show a satisfying agreement for DI operating points compared to experimental data, when mixing computations are conducted with the SST turbulence model. Also, port fuel injection (PFI) operating points demonstrate a good performance with these models, however, the constant model prefactor (multiplier for the closure of turbulent flame speed) has to be defined individually for PFI and DI computations. This effect might be caused by the dissimilar sources of turbulence for the two engine types (PFI and DI) which cannot be adequately predicted by the turbulence models. Combustion computations on the basis of mixture results obtained by the RNG-model generally underrate the level of turbulence intensity for stratified operation points, effecting too weak rates of heat release. The ECFM combustion model shows a satisfying predictability for the PFI case using a constant model prefactor. Computations of DI operating points with this model, however, require a readjustment of the prefactor for each operating point in order to match experimental results.

Regarding turbulent combustion, the hydrogen laminar flame speed is recognised to be the crucial quantity for the employed modelling approaches. Since direct-injection hydrogen engines in the stratified case engender a wide range of equivalence ratios, fundamental data for the laminar flame speed has to be provided as a model input within the entire boundaries of ignition limits. A lack of experimental data of lami-

nar flame speed at engine-relevant conditions (high pressure, high temperature) is noticed. In order to perform a detailed study on hydrogen burning velocities, a single-cylinder compression machine is selected to conduct flame speed measurements of hydrogen-air mixtures at ignition temperatures and pressures up to  $T = 700$  K and  $p = 45$  bar, considering air/fuel equivalence ratios between  $\lambda = 0.4$  and 2.8. Flame front velocities are acquired by means of optical methods using OH-chemiluminescence and thermodynamic, multi-zone evaluation of pressure traces. In comparison to data of laminar flame speed derived from reaction mechanisms and flame speed correlations found in literature, the experimental results show increased burning velocities due to flame front wrinkling caused by hydrodynamic and thermo-diffusive instabilities.

# Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit behandelt die numerische Berechnung der Gemischbildung und ottomotorischen Verbrennung von Wasserstoff mit Methoden der reaktiven CFD (Computational Fluid Dynamics). Gegenstand der Untersuchung ist ein Einzylinder-Forschungsmotor, der wahlweise mit Saugrohrenblasung bzw. mit Hochdruck-Direkteinblasung betrieben werden kann. Als Betriebspunkte werden homogene und geschichtete Gemische sowie Mehrfacheinblasung untersucht. Es können somit vorgemischte, teilweise vorgemischte und nicht vorgemischte Verbrennungsmodi dargestellt werden.

Detaillierte CFD-Berechnungen des Einblasevorgangs und der Kraftstoffverteilung zum Zündzeitpunkt werden anhand eines Einzylinder-Transparentmotors validiert [59]. Die Verifikation von Berechnungen des Brennstoffumsatzes erfolgt mittels Indizierdaten eines thermodynamischen Forschungsmotors [44].

Mit Bezug auf die Hochdruck-Direkteinblasung stellt neben der Düsengeometrie der Einblasezeitpunkt eine wesentliche Einflussgröße auf die Form der Gemischbildung dar. CFD-Berechnungen der inneren Gemischbildung liefern detaillierte Erkenntnisse über den Zusammenhang zwischen Einblasezeitpunkt und dem Grad der Gemischhomogenisierung. Für verschiedene Einblasezeitpunkte ist eine gute Übereinstimmung der berechneten Kraftstoffverteilung mit optischen Lichtschnitt-Aufnahmen (PLIF) des Transparentmotors nachgewiesen worden.

Als Turbulenzmodelle werden ein Shear Stress Transport (SST) Modell und ein  $k-\varepsilon$  Modell auf Basis eines Renormalisierungs-Ansatzes (RNG) eingesetzt und mit Ergebnissen eines Reynolds Stress Modells (RSM) verglichen. Die Turbulenzmodelle zeigen deutliche Unterschiede in der durch die

Wasserstoff-Einblasung generierten turbulenten kinetischen Energie, während der Einfluss verschiedener Turbulenzmodelle auf die Vorausberechnung der Gemischverteilung weniger stark ausgeprägt ist.

Zur Berechnung der Kraftstoffumsetzung werden unterschiedliche turbulente Verbrennungsmodelle auf Basis eines turbulenten Flammgeschwindigkeits-Modells (Turbulent Flame Speed Closure, TFC) und eines Flammenoberflächendichte-Ansatzes (Extended Coherent Flame Model, ECFM) untersucht. Die Modelle sind im Rahmen des internationalen EU-Förderprojektes *HyICE* an die spezifischen Eigenschaften der Wasserstoff-Verbrennung angepasst und in den CFD-code ANSYS CFX implementiert worden [15, 36, 112].

Zur Definition laminarer Wasserstoff-Flammgeschwindigkeiten werden zwei unterschiedliche Ansätze verfolgt. Einerseits werden theoretische Werte für Flammgeschwindigkeiten auf der Basis eines detaillierten Reaktionsmechanismus berechnet. Diese Methode liefert Flammgeschwindigkeiten einer stabilen laminaren Verbrennung. Andererseits wird als Eingangsgröße für die Verbrennungsmodelle eine Flammgeschwindigkeits-Korrelation auf Basis experimenteller Daten verwendet. Im Gegensatz zu theoretischen Werten berücksichtigt diese Methode den Einfluss von Flammfrontinstabilitäten auf die effektive Brenngeschwindigkeit.

Berechnungen unterschiedlicher Betriebspunkte mit innerer Gemischbildung (DI) zeigen für die TFC-Verbrennungsmodelle in Kombination mit dem SST-Turbulenzmodell eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit experimentellen Daten. Betriebspunkte mit äusserer Gemischbildung (AGB) werden von den Modellen ebenfalls gut wiedergegeben, jedoch ist eine Übertragbarkeit der Modellkonstanten (Multiplikatoren zur Schließung des Terms der turbulenten Flammgeschwindigkeit) zwischen den AGB- und DI-Berechnungen nicht gegeben. Verbrennungsberechnungen auf Basis des RNG-Turbulenzmodells unterschätzen das Niveau der Turbulenzintensität für Direkteinblasung mit sehr späten Einblasezeiten. Als Konsequenz sind die Brennverläufe der CFD-Berechnungen mit diesem Turbulenzmodell im Vergleich zu Ergebnissen der Brennverlaufsanalyse stark verlangsamt.

Das ECFM-Verbrennungsmodell zeigt zufriedenstellende Resultate für Betriebspunkte mit äußerer Gemischbildung. Verbrennungsberechnungen mit innerer Gemischbildung erfordern jedoch eine Anpassung der Modellkonstanten an experimentelle Daten für jeden einzelnen Betriebspunkt, wodurch die Allgemeingültigkeit dieses Ansatzes stärker limitiert ist als für Berechnungen mit dem TFC-Modell.

In Bezug auf die Berechnung der Kraftstoffumsetzung erweist sich die laminare Flammgeschwindigkeit als eine der kritischen Einflussgrößen der turbulenten Verbrennungsmodelle. Aufgrund des weiten Bereiches der lokalen Luft/Kraftstoff-Verhältnisse bei innerer Gemischbildung müssen Werte der laminaren Brenngeschwindigkeit innerhalb der gesamten Zündgrenzen bekannt sein. Ein fundamentaler Beitrag zur Bestimmung dieser Größen wird durch detaillierte Untersuchungen laminarer Flammgeschwindigkeiten in einem Einhubtriebwerk erbracht. Die betrachteten Luft-/Kraftstoff-Verhältnisse, Zünddrücke und Temperaturen liegen in einem Bereich von  $0,4 \leq \lambda \leq 2,8$ ,  $p = 5 \text{ bar}$  bis  $45 \text{ bar}$  und  $T = 350 \text{ K}$  bis  $700 \text{ K}$  und stellen eine wesentliche Erweiterung von bisher in der Literatur verfügbaren experimentellen Daten dar. Eine Bestimmung des Flammradius erfolgt sowohl durch optische Messmethoden (OH-Chemilumineszenz) als auch durch thermodynamische Analyse des indizierten Druckverlaufes. Die abgeleiteten laminaren Brenngeschwindigkeiten werden durch einen Vergleich mit Werten einer reaktionskinetischen Berechnung plausibilisiert.