

Modeling soot formation in diesel engines using conditional moment closure

Doctoral Thesis

Author(s):

Bolla, Michele

Publication date:

2013

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010087266>

Rights / license:

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

DISS. ETH NO. 21646

**MODELING SOOT FORMATION IN DIESEL ENGINES
USING CONDITIONAL MOMENT CLOSURE**

A dissertation submitted to

ETH ZURICH

for the degree of

Doctor of Sciences

presented by

MICHELE BOLLA

MSc ETH in Mechanical Engineering

born January 14th, 1984

citizen of Acquarossa TI, Switzerland

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Konstantinos Boulouchos, ETH Zürich, examiner

Prof. Dr. Epaminondas Mastorakos, University of Cambridge, UK, co-examiner

Dr. Yuri M. Wright, ETH Zürich, co-examiner

2013

Abstract

In this study numerical simulations of diesel spray combustion with emphasis on soot formation have been performed using multi-dimensional first order conditional moment closure (CMC) coupled with a reduced *n*-heptane chemical mechanism, representing the first application of a semi-empirical soot model within the framework of CMC for spray combustion and for diesel engines.

Validation and application of the model have been conducted at three different experimental test facilities: (1) model validation at the Sandia constant-volume chamber for quasi-steady fully developed *n*-heptane sprays, (2) model application at the Wärtsilä marine spray combustion chamber for diesel sprays representative for large two-stroke marine diesel engines and (3) model application at the Sandia heavy-duty diesel engine with intermittent diesel sprays.

Sandia constant-volume chamber:

A detailed analysis of *n*-heptane autoigniting sprays under diesel engine conditions has first been conducted, including comparison with experimental data of ignition delay (ID) and flame lift-off length (LOL) for different ambient oxygen volume fractions (8-21%) and ambient densities (14.8 and 30 kg/m³). ID was in general over-estimated, particularly for low reactivity cases. Flame LOL was found to agree well for all conditions. The soot volume fraction distribution during the quasi-steady period (3-6 ms) has been compared with experimental data. In general, high soot volume fraction location and semi-quantitative distribution have been well described. Furthermore, for the same test cases, the influence of the combustion model has been assessed by comparing the CMC model with the direct integration (DI) approach (i.e. neglecting turbulent fluctuations) shedding light upon conditions where turbulence-chemistry interaction (TCI) plays a major role.

Wärtsilä marine spray combustion chamber:

Numerical simulations of autoigniting diesel sprays with an injector orifice diameter of 0.875 mm from a two-stroke marine diesel engine reference experiment have been performed. Simulation results are compared with

experimental data by means of macroscopic spray development under non-reacting conditions as well as ID time, ignition location and quasi-steady flame LOL for different ambient temperatures ranging between 730 and 910 K.

Sandia heavy-duty diesel engine:

The model has been subsequently applied to the Sandia optically accessible heavy-duty diesel engine for five different operating conditions including variations in ambient oxidizer dilution, start of injection (SOI) and intake temperature. Simulation results have been compared with experimental data by means of non-reactive fuel vapor distribution, apparent heat release rates (AHRR), temporal evolutions of quantitative in-cylinder soot mass and natural luminosity. The model was found to well reproduce traces of AHRR with a slight underestimation of the premixed portion of combustion and it was capable to reproduce semi-quantitative trends of soot mass for all five cases. A post-processing methodology for a consistent comparison of 3D computed soot distribution with the 2D measured natural luminosity has further been proposed.

Overall, the CMC framework coupled with a two-equation soot model has demonstrated excellent prediction capabilities for diesel spray combustion over a wide range of applications and is a highly promising candidate for studying soot emissions in the full complexity of diesel engines.

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden numerische Simulationen von reaktiven Dieselsprays durchgeführt. Die instationäre Interaktion zwischen Turbulenz und Chemie wurde mittels mehr-dimensionaler erster Ordnung conditional moment closure (CMC) abgebildet. Hierbei wird erstmals ein semi-empirisches Russmodell im CMC-Kontext für Sprayverbrennung und Dieselmotoren verwendet.

Die Validierung und Anwendung der Modellierung wurde an drei verschiedenen Versuchsträgern durchgeführt: (1) Validierung an der Sandia Hochdruckzelle für quasi-stationäre n-Heptan Sprays, (2) Anwendung an der für grosse Zweitakt-Schiffsdieselmotoren charakteristischen Wärtsilä Hochdruckzelle für Dieselsprays und (3) Anwendung für den Sandia Heavy-Duty Dieselmotor mit taktweisem Betrieb der Treibstoffeinspritzung.

Sandia Hochdruckzelle

Zuerst wurden die während der Selbstzündung von n-Heptan Sprays ablaufenden Prozesse detailliert analysiert. Zündverzüge und Lift-off Längen wurden mit dem Experiment für verschiedene Sauerstoffanteile der Umgebung (8-21 % Vol) und Umgebungsdichten (14.8 und 30 kg/m³) verglichen. Die berechnete Zündverzüge wurden im Allgemeinen überschätzt, vor allem für Bedingungen mit kleinen Umgebungsreaktivitäten, wohingegen die Lift-off Länge gut wiedergegeben wurde. Die Verteilung des Russvolumenanteils während der stationären Periode (3-6 ms) wurde mit experimentellen Daten verglichen, wobei die semi-quantitative räumliche Verteilungen korrekt abgebildet wurde. Im Weiteren wurde der Einfluss der Turbulenz-Chemie Interaktion untersucht anhand eines direkten Vergleiches zwischen dem CMC-Modell und der direct integration Methode, welche turbulente Fluktuationen vernachlässigt.

Wärtsilä Hochdruckzelle

Numerische Simulationen von Dieselsprays mit einem Injektordurchmesser von 0.875 mm wurden durchgeführt und validiert anhand von experimentellen Daten eines Referenzversuchsträgers repräsentativ für Zweitakt-Schiffsdieselmotoren. Die untersuchten Grössen sind die nicht-reaktive makroskopische

Sprayentwicklung, Zündverzug, Zündort und stationäre Lift-off Länge für einen Lufttemperaturbereich von 730 bis 910 K.

Sandia Heavy-Duty Dieselmotor

Das Modell wurde anschliessend am Sandia Dieselmotor für fünf verschiedene Betriebsbedingungen angewandt, welche einer Variation von Sauerstoffkonzentration, Einspritzzeitpunkt und Einlasstemperatur entsprechen. Die Validierung der Simulationsergebnisse basiert auf der nicht-reaktiven gasförmigen Brennstoffverteilung, der Wärmefreisetzungsrates, dem zeitlichen Verlauf der Russmasse im Zylinder und der natürlichen Luminosität. Die Simulation reproduzierte die Wärmefreisetzungsrates qualitativ gut wobei der Anteil der Vormischverbrennung leicht unterschätzt wurde. Die semi-quantitativen zeitlichen Russverläufe wurden für alle fünf Betriebsbedingungen gut abgebildet. Eine Methodik für einen konsistenten Vergleich zwischen der dreidimensional berechneten Russverteilung und der zweidimensional gemessenen Luminosität wurde vorgeschlagen.

Die CMC-Methode kombiniert mit einem semi-empirischen Russmodell hat eine hervorragende Voraussagekraft für die Simulation von Dieselsprayverbrennung über einen breiten Bereich von Applikationen aufgezeigt, und stellt somit eine vielversprechende Methodik für die Analyse von Russbildung in Dieselmotoren dar.