

Numerische Simulation von kraftstoffflexiblen, direkteinspritzenden Schiffsmotoren

Stephanie Gabriele Frankl

Vollständiger Abdruck der von der TUM School of Engineering and Design der Technischen Universität München zu Erlangung des akademischen Grades einer Doktorin der Ingenieurwissenschaften genehmigten Dissertation.

Vorsitzende/-r: Prof. Dr.-Ing. Hartmut Spliethoff

Prüfende/-r der Dissertation:

1. Prof. Dr.-Ing Georg Wachtmeister
2. Prof. Dr.-Ing. Thomas Sattelmayer

Die Dissertation wurde am 18.05.2021 bei der Technischen Universität München eingereicht und durch die TUM School of Engineering and Design am 30.09.2021 angenommen.

Kurzzusammenfassung

Ziel dieser Arbeit ist es, Methoden zur effektiven Berechnung und Simulation für das High-Pressure-Dual-Fuel Brennverfahren zu entwerfen, mit deren Hilfe der experimentelle Aufwand bei der Entwicklung optimierter Motorkonfigurationen deutlich reduziert werden kann. Daher wurde in der vorliegenden Arbeit ein 3D-CFD Modell aufgebaut. Begonnen wurde mit der Kraftstoff-Kombination Methan als Hauptkraftstoff und Diesel als Pilotkraftstoff. Mithilfe von zur Verfügung gestellten experimentellen Daten werden die Simulationsmodelle parametrisiert, verifiziert und abschließend validiert. Es zeigt sich, dass das Simulationsmodell vor allem im frühen Stadium der Experimente als Interpretationswerkzeug für Zündung und Flammausbreitung genutzt werden kann. Im weiteren Verlauf wird das Modell auf die Anwendung von Wasserstoff und Ammoniak als Hauptkraftstoffe erweitert. Auch für Wasserstoff lässt sich eine gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten nachweisen. Für Ammoniak liegen keine experimentellen Daten für die Validierung vor. Da Ammoniak von besonderem Interesse für eine Dekarbonisierung der Schifffahrt ist, wird eine Parameterstudie zur Anwendung von Ammoniak im HPDF-Brennverfahren durchgeführt und vorgestellt.

Abstract

The aim of this thesis is to design methods for the effective calculation and simulation of high pressure dual fuel combustion processes, with the help of which the expenditure of experimental tests can be significantly reduced. Therefore, a 3D-CFD model was built in the present work. It was started with the fuel combination methane as main fuel and diesel as ignition oil (also called pilot fuel). With the help of experimental data provided, the simulation models are parameterized, verified and finally validated. It is shown that the simulation model can be used as an interpretation tool for ignition and flame propagation in the experimental data, especially in the early stages of the experiments. In the further course, the model is extended to the application of hydrogen and ammonia as main fuels. A good agreement of the simulation results with experimental data can also be demonstrated for hydrogen. No experimental data are available for ammonia. Since ammonia is of particular interest for decarbonisation of marine shipping, a parameter study on the application of ammonia in the HPDF combustion process is carried out and presented.

Danksagung

Diese Arbeit ist im Rahmen der beiden Forschungsprojekte „FlexDi: Flexible direkteinspritzende Motoren für die Schifffahrt“ und „MethQuest – MethMare: Effiziente und saubere Nutzung von erneuerbaren, methanbasierten Kraftstoffen in maritimen Anwendungen“ entstanden. Die Projekte wurden in Zusammenarbeit mit MTU Friedrichshafen, Woodward L’Orange und dem Lehrstuhl für Thermodynamik der TUM durchgeführt.

Allen voran bedanke ich mich bei meinem Doktorvater Prof. Dr.-Ing Georg Wachtmeister, der mir und meinem geschätzten Kollegen Stephan Gleis das Vertrauen entgegen gebracht hat diese Projekte überwiegend eigenverantwortlich zu bearbeiten und uns inhaltlich freie Hand gelassen hat. Auch bedanke ich mich für das Feedback zu meiner Arbeit und die vielen fachlichen Diskussionen. Des Weiteren bedanke ich mich bei Prof. Dr.-Ing Thomas Sattelmayer für das Erstellen des Zweitgutachtens zu dieser Arbeit und sein ehrliches Interesse an meinen Forschungsergebnissen. Mein Dank geht auch an Herrn Prof. Hartmut Spliethoff für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommission.

Diese Arbeit wäre nicht möglich gewesen ohne die Unterstützung durch die Projektpartner. Ein herzliches Dankeschön geht daher an Manuel Boog, Joachim Schwarte, Ingmar Berger, Michael Jud und Georg Fink.

Besonders erwähnen möchte ich die freundschaftliche Zusammenarbeit mit meinem Kollegen Stephan Gleis, der für den experimentellen Teil unserer Forschungsprojekte verantwortlich war. Abgesehen von den gemeinsamen, langen Stunden die wir mit Glasputzen und –Verkleben verbracht haben, schätze ich sein fachliches Knowhow und die vielen intensiven Diskussionen zu unserem Thema die maßgeblich zum Erfolg unserer Projekte und dieser Arbeit beigetragen haben.

Des Weiteren möchte ich mich bei Christian Mährle, meinem langjährigen Büro-Kollegen bedanken. Er hat es mit Geduld ertragen, dass das Büro als Fahrradgarage gedient hat und mir mit seiner Expertise stets mit Rat zu Seite gestanden. Er hat nicht nur mit seinem grünen Daumen unser Büro in einen Dschungel verwandelt und mit seinen Kochkünsten regelmäßig für das leibliche Wohl in Garching gesorgt, sondern ist auch dafür verantwortlich, dass in dieser Arbeit kaum noch Rechtschreibfehler vorkommen (alle verbliebenen Fehler wurden von mir nach seiner Korrektur wieder eingefügt).

Ebenfalls bedanken möchte ich mich bei allen meinen anderen Kollegen am Lehrstuhl für die gute Zeit, insbesondere Stephan Karman, Kai Gaukel und Alexander Gelner. Ebenso danke ich allen Studierenden deren Abschlussarbeiten ich betreuen durfte.

In dieser Liste nicht fehlen dürfen meine alten Kommilitonen Felix Fischer, Tobias Pflumm und Svenja Schoeder. Wir haben uns nicht nur gemeinsam durch das Studium gekämpft, sondern auch durch die Promotionszeit.

Ein besonderer Dank geht an meine Eltern, die mir das Studium ermöglicht haben, sowie meine Brüder; sie alle haben immer hinter mir gestanden, auch wenn es mal nicht so gelaufen ist wie ich mir das vorgestellt habe.

Zum Schluss geht mein Dank noch an meinen Mann Thomas Girth, der mir immer den Rücken freihält und mir ermöglicht meine Träume zu verwirklichen, sowie an unseren Sohn Luca, der mit seiner Geburt brav gewartet hat, bis diese Arbeit fertiggestellt und auch die mündliche Prüfung bestanden waren.

München, Januar 2021

Stephanie Frankl

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis	IX
Abbildungsverzeichnis	X
Akronyme	XII
Formelverzeichnis.....	XIII
1. Einleitung.....	1
1.1. Motivation	1
1.2. Zielsetzung	3
1.3. Struktur der Arbeit.....	3
2. Phänomenologie des HPDF-Brennverfahrens	5
2.1. Dual-Fuel Brennverfahren.....	5
2.2. Das HPDF-Verfahren.....	6
2.2.1. Einspritzstrategien und Strahlanordnung	7
2.2.2. Haupt- und Pilotkraftstoffe	9
3. Theoretische Grundlagen	14
3.1. Strömungsmechanische Grundlagen	14
3.1.1. Erhaltungsgleichungen	14
3.1.2. Zustandsgleichung.....	15
3.1.3. Reaktionskinetik	16
3.1.4. Hochdruck - Gaseinblasung.....	18
3.1.5. Flüssigstrahlen	20
3.2. Numerische Methoden.....	22
3.2.1. Simulation turbulenter Strömungen.....	22
3.2.2. Simulation der Einspritzung flüssiger Kraftstoffe	25
3.2.3. Adaptives Gitternetz	26
3.2.4. Solver	28
4. Experimente und Optische Aufnahmen	29
4.1. Validierungsexperimente - Messdaten	30
4.2. Optische Aufnahmen	31
4.2.1. Analyse des Strömungsfeldes.....	31
4.2.2. Spraydiagnostik	31
4.2.3. Verbrennungsdiagnostik	32
5. Publikationen.....	34
5.1. Modellentwicklung Methan-Diesel HPDF	34
5.2. Validierung und Interpretation des HPDF Brennverfahrens.....	37

5.3. Untersuchung von Wasserstoff und Ammoniak als Kraftstoffalternativen	40
6. Diskussion der Ergebnisse	44
6.1. Abgrenzung zu ähnlichen Arbeiten	45
6.2. Alternativen zum HPDF-Brennverfahren	46
7. Literaturverzeichnis	48

Anhang:

A1: Development of a 3D-CFD Model for a Full Optical High-Pressure Dual-Fuel Engine

A2: Interpretation of Ignition and Combustion in a Full-Optical High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) Engine using 3D-CFD Methods

A3: Investigation of Ammonia and Hydrogen as CO₂-free Fuels for Heavy Duty Engines using a High Pressures Dual Fuel Combustion Process

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Motordaten	29
Tabelle 2: Untersuchte Einflussparameter im Experiment	30

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Zwei Hafenschlepper demonstrieren ihre Fähigkeiten beim Schlepperballett im Hafen von Vancouver. In Seitwärtsbewegung geht es nebeneinander in um den Pier auf dem die Zuschauer stehen.....	1
Abbildung 2: Vergleich der verschiedenen Dual-Fuel-Motor Varianten.....	5
Abbildung 3: Phasen der HPDF-Verbrennung mit Piloteinspritzung vor Hauptkraftstoff-Einbringung	7
Abbildung 4: Eindring- und Mischungsverhalten eines Hochdruckgasstrahls	8
Abbildung 5: Vergleich der Dieselizeündung bei Modellierung mittels ECFM-Verbrennungsmodell (links), mit Tabellen für die Zündung erweitertem ECFM (mitte) und Reaktionskinetik (rechts) (89)	16
Abbildung 6: Druckverläufe und Druckverhältnis von Sackloch und Brennraum.....	20
Abbildung 7: Modellierung von Einspritzstrahlen	25
Abbildung 8: Beispiele für adaptive Gitterverfeinerung und "Fixed Embedding"	27
Abbildung 9: Schematische Darstellung des optischen Aufbaus mit Strahlteiler.....	30
Abbildung 10: Mie-Streulicht-Aufnahmen des Dieselpilotspray; deutlich erkennbar ist der Einfluss von Fertigungsabweichungen im Nadelsitz durch welche sich die Strahlen nicht gleichmäßig ausbreiten.....	32
Abbildung 11: Flammeigenleuchten (oben) und OH*-Chemilumineszenz (unten) für Methan, Methanol und Wasserstoff bei 730°KW. Darstellung einer Mittelung von jeweils 25 Arbeitsspielen. Nur im OH*- Bild ist klar zu erkennen, dass in allen drei Fällen die Kraftstoffstrahlen voll entflammt sind.....	33
Abbildung 12: Rechengebiete	34
Abbildung 13: Vergleich PIV-Ergebnisse mit Simulationen für zwei unterschiedliche Einlass-Nockenwellen, bei 710°KW 15mm unterhalb des Zylinderkopfes aufgenommen	35

Abbildung 14: Ergebnisse der Netzstudie für die Dieseleinspritzung	36
Abbildung 15: Abgleich der Simulation (farbig) mit Aufnahmen des Flammeigenleuchten (monochrom, Hintergrund). Orange Flächen markieren Temperaturbereiche von $T=1500K$, blaue Bereiche eine Methankonzentration von 2%	37
Abbildung 16: Vorhersage der Wärmefreisetzungsrate in Experiment (links) und Simulation (rechts) für verschiedene Pilot-Einspritzzeitpunkte	38
Abbildung 17: Variation Diesel $-10^{\circ}v.OT$, die Gasstrahlen treffen auf die Verbrennungsprodukte der Pilotverbrennung und entzünden daran. Mithilfe der Simulation kann die Position der heißen Verbrennungsprodukte verfolgt werden	39
Abbildung 18: Reduktion des Modells von 120° auf 40° -Sektor.....	41
Abbildung 19: Vergleich der Flammenausbreitung bei Wasserstoff- und Ammoniak-Verbrennung. Gezeigt ist jeweils unter dem Temperaturprofil eine Draufsicht der Isofläche von OH bei einem Massenanteil von 0,001	42

Akronyme

CA – Crank Angle

CFD – Computational Fluid Dynamics

HPDF – High Pressure Dual Fuel

KW – Kurbelwinkel

LIF – Laser Induced Fluorescence

LES – Large Eddy Simulation

OME – Oxymethylenether

PIV – Particle Image Velocimetry

RANS – Reynolds Averaged Navier Stokes

SOE – Start of Energizing

Dimensionslose Kennzahlen

CFL – Courant-Friedrich-Lewy-Zahl

Ma – Machzahl

Oh – Ohnesorgezahl

Pr – Prandtlzahl

Re – Reynoldszahl

Sc – Schmidtzahl

We – Weberzahl

Formelverzeichnis

Symbol	Einheit	Benennung
a	Pa	Kohäsionsdruck
b	m ³	Kovolumen
C _{ei}	-	Modellkonstanten
d	m	Tropfendurchmesser
E _a	J/mol	Aktivierungsenergie
f	N	Kraftvektor
H	J	Enthalpie
K _t	W/(m K)	Turbulente Wärmeleitfähigkeit
k	J/kg	Turbulente kinetische Energie
k _i	m ³ /(mol s)	Reaktionsratenkoeffizient
L ₀	m	Referenzlänge
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
p	Pa	Druck
p _c	Pa	Kritischer Druck
Q	J	Wärme
R	J/(kg K)	Spezifische Gaskonstante
R _m	J/(mol K)	Universelle Gaskonstante
S	m ²	Oberfläche
S	J/K	Entropie
T	K	Temperatur
T _c	K	Kritische Temperatur
t	s	Zeit
U	J	Innere Energie

u	m/s	Geschwindigkeit
V	m^3	Volumen
v	m/s	Geschwindigkeit
ν_i	-	Stöchiometrische Koeffizienten
W	J	Arbeit
w_s	mol/s	Produktionsrate einer Spezies
Z	m	Zellgröße
Γ_t		Turbulenter Skalarfluss
ε	$kg/(m\ s^3)$	Dissipation
η	$kg/(m\ s)$	Dynamische Viskosität
κ	(-)	Isentropenexponent
μ_t	$kg/(m\ s)$	Turbulente Wirbelviskosität
ρ	kg/m^3	Dichte
σ	N/mm^2	Oberflächenspannung
τ_{ij}	N/mm^2	Spannungstensor
φ		Skalare Größe

1. Einleitung

1.1. Motivation

Die faszinierendsten Einparkhilfen der Welt finden sich in Häfen: Schlepperboote. Die kleinen, wendigen Schiffe sind mit leistungsstarken Motoren bestückt und bugsieren große Container- und Kreuzfahrtschiffe an ihre Anlegestellen.



Abbildung 1: Zwei Hafenschlepper demonstrieren ihre Fähigkeiten beim Schlepperballett im Hafen von Vancouver. In Seitwärtsbewegung geht es nebeneinander in um den Pier auf dem die Zuschauer stehen.

Gerade für den Anwendungsbereich der Hafenschlepper mit ihren dynamischen Lastprofilen und hohen Spitzenleistungen ist der Verbrennungsmotor nach wie vor perfekt geeignet. In Zeiten des Klimawandels werden die Emissionsrichtlinien allerdings nicht nur für den internationalen Transport auf See immer strenger (1). Vor allem in Küstennähe und Häfen, in den sogenannten „Emission Controlled Areas“, den Einsatzbereichen der kleinen „schwimmenden Motoren“, stehen die Antriebshersteller vor wachsenden Herausforderungen bezüglich der erlaubten Grenzwerte. Sichtbare Partikelemissionen, wie in Abbildung 1 zu erkennen, stehen in der Kritik. Hinzu kommt, dass wegen des Klimawandels auch die Emissionen von klimaaktiven Gasen wie Kohlenstoffdioxid (CO_2) und Methan (CH_4) immer weiter reduziert werden müssen (2, 3). Um all diese Anforderungen erfüllen, werden seit einigen Jahren neue Motorkonzepte wie Dual-Fuel-Motoren

erforscht, welche zusätzlich zum klassischen Dieselmotor mit einem weiteren Kraftstoff betrieben werden können. (4)

Als Brennverfahren, mit vergleichbaren Wirkungsgraden und ähnlicher Verbrennungsstabilität wie beim Dieselmotor, wurde das Konzept der Hochdruck-Direkteinspritzung für Dual Fuel Motoren (auch High-Pressure-Dual-Fuel, HPDF) entwickelt. Hierbei werden beide Kraftstoffe, Zündkraftstoff und Hauptkraftstoff kurz vor dem oberen Totpunkt in den Brennraum eingebracht und in einer diffusiven Flamme verbrannt. Durch die Direkteinspritzung gelangt beim Ladungswechsel kein unverbrannter Kraftstoff ins Abgas. Die Verdichtung reiner Luft unterliegt nicht der Gefahr des Klopfens, weswegen dieseltypische Verdichtungsverhältnisse möglich sind und ähnliche Wirkungsgrade wie bei klassischen Dieselmotoren erreicht werden können. (5–7)

Allerdings bedingt dieses Brennverfahren hochkomplexe und teure Verbrennungsausrüstung: es werden zwei Hochdruckkreisläufe sowie komplexe Dual-Fuel Injektoren benötigt. Durch die individuelle Einbringung der beiden Kraftstoffe entstehen viele Freiheitsgrade für die Optimierung, welche nur mithilfe von gut validierten Simulationsmodellen kosteneffizient evaluiert werden können.

Zu den Freiheitsgraden des HPDF-Dual-Fuel Verfahrens zählen:

- **Kraftstoffauswahl:** Als Hauptkraftstoffe können beispielsweise regenerativ erzeugtes Methan, Wasserstoff, Methanol oder auch Ammoniak dienen. Als Zündöl kann neben Diesel auch Oxymethylenether verwendet werden. Alleine hierdurch ergeben sich bereits 8 verschiedene Kraftstoffkombinationen.
- **Einspritzdrücke und Timing** der Einspritzungen: Der in dieser Arbeit verwendete Injektor besitzt zwei unabhängige Kraftstoffkreisläufe und kann daher die beiden Kraftstoffe unabhängig vom Einspritzzeitpunkt und Einspritzdruck einspritzen.
- **Geometrische Freiheitsgrade:** Die Brennraumgeometrie sowie Anzahl, Anordnung und Durchmesser der Düsenlöcher können variiert werden. Hier sind beispielsweise unterschiedliche Kolbengeometrien von Interesse, durch welche die Kraftstoffstrahlen umgelenkt werden, da hierdurch maßgeblich die Emissionen beeinflusst werden können.

- **Betriebspunkte:** Drehzahlen, Ventilsteuerzeiten, Ladedrücke, Abgasgegendrücke, Abgasrückführung, Temperaturen (Ladeluft-, Kraftstoff-, Öltemperaturen, ...)

1.2. Zielsetzung

Um die Vielzahl an Freiheitsgraden des HPDF-Brennverfahrens hinsichtlich eines stabilen und effizienten Motorbetriebs beurteilen zu können, ist ein validiertes Simulationsmodell als Interpretations- und Optimierungswerkzeug unumgänglich. Im Zuge dieser Arbeit wird daher ein 3D-CFD Simulationsmodell entwickelt, welches in der Lage ist, die im Motor auftretenden Phänomene korrekt abzubilden und zu beschreiben. Mithilfe von zur Verfügung gestellten Daten aus einer Kooperation mit einer parallelen experimentellen Forschungsarbeit (8) wird das Modell für den Anwendungsfall Methan-Diesel mithilfe von Messdaten und optischen Aufnahmen validiert. Im weiteren Verlauf wird mithilfe von Simulationen ein sicherer Betrieb des Prüfstandes mit anderen Kraftstoff-Kombinationen wie z.B. Ammoniak-Diesel und Wasserstoff Diesel vorhergesagt.

Ziel ist es, ein tiefgehendes Verständnis für das neuartige Dual-Fuel Brennverfahren zu generieren um Optimierungen hinsichtlich Zündverhalten und Emissionsbildung durchführen zu können.

1.3. Struktur der Arbeit

Im nächsten Abschnitt werden die Phänomenologie des HPDF-Brennverfahrens und der aktuelle Stand der Technik vorgestellt. Anschließend wird ein Überblick über die theoretischen Grundlagen gegeben. Auf eine Beschreibung der numerischen Abbildung von turbulenten Strömungen und Verbrennung folgen der experimentellen Aufbau und die verwendeten optischen Messtechniken.

Der anschließende Teil enthält die Zusammenfassung über den Aufbau und die Validierung des numerischen Modells für den Methan-Diesel HPDF-Betrieb (Veröffentlichung 1). Weiterhin wird gezeigt, dass das Modell in der Lage ist, als Interpretationshilfe für experimentelle Aufnahmen aus dem optischen Einzylinder-Motor verwendet zu werden (Veröffentlichung 2). Eine Weiterentwicklung des Modells wird für die Simulation von

Wasserstoff und Ammoniakverbrennung mit Zündstrahl verwendet. Mithilfe dieses Modells wird der sichere Betrieb des optischen Einzylindermotors mit Wasserstoff vorhergesagt und diese Vorhersagen durch die Experimente bestätigt. Abschließend wird eine Studie zur HPDF-Verbrennung mit Ammoniak als Hauptkraftstoff durchgeführt (Veröffentlichung 3).

Im Diskussionsteil werden die wichtigsten Erkenntnisse und Ergebnisse nochmals zusammengestellt und die Stärken und Schwächen des Simulationsmodells für die einzelnen Anwendungen erläutert. Die durchgeführten Arbeiten werden im Kontext ähnlicher Arbeiten diskutiert. Zudem wird ein Ausblick auf zukünftige Arbeiten und Entwicklungen auf dem Gebiet des HPDF gegeben.

2. Phänomenologie des HPDF-Brennverfahrens

2.1. Dual-Fuel Brennverfahren

In Abbildung 2 sind die drei aktuellen Konzepte für Dual-Fuel Motoren schematisch dargestellt. Die einfachste Umsetzung eines Dual-Fuel Motors besteht in einer Umrüstung eines Dieselmotors durch Ergänzung einer Saugrohr-Beimischung des zweiten Kraftstoffes, wie z.B. Erdgas mittels Niederdruckeinspritzung. Die Zündung des Gas-Luftgemisches findet mithilfe des bestehenden Diesel-Injektors statt. Dieses Konzept ist einfach und kostengünstig zu realisieren. Aufgrund der hohen Verdichtungsverhältnisse klassischer Dieselmotoren muss das Gemisch sehr mager gehalten werden, um anormale Verbrennungsphänomene wie beispielsweise Klopfen, zu vermeiden. Auch der Anteil an eingespritztem Zündkraftstoff ist mit 5-15% Energieanteil relativ hoch, da so umgerüstete Motoren meist nicht über Injektoren verfügen, welche für derart kleine Mengen an Diesel ausgelegt sind.

Weiterentwickelte, gemischansaugende Otto-Gasmotoren mit Pilotzündung hingegen verfügen über einen speziellen Pilotinjektor, welcher auf Kleinstmengen ausgelegt ist. (9) Hierbei geht aber meist die Diesellastfähigkeit verloren oder es wird, falls der Bauraum dies zulässt, neben dem Hauptinjektor ein zweiter Injektor verbaut. Hinzu kommt, dass das magere Gas-Luftgemisch oft nicht vollständig abbrennt und daher unverbrannter Kraftstoff ins Abgas gelangt und ausgestoßen wird. Vor allem bei Methan ist dies problematisch, da es auf hundert Jahre gerechnet, ein CO_2 -Äquivalent von 28 besitzt (10). Die katalytische Aufbereitung von Methan im Abgastrakt ist nur bei sehr hohen Abgastemperaturen möglich, was einem effizienten Motorbetrieb entgegensteht. (11, 3)

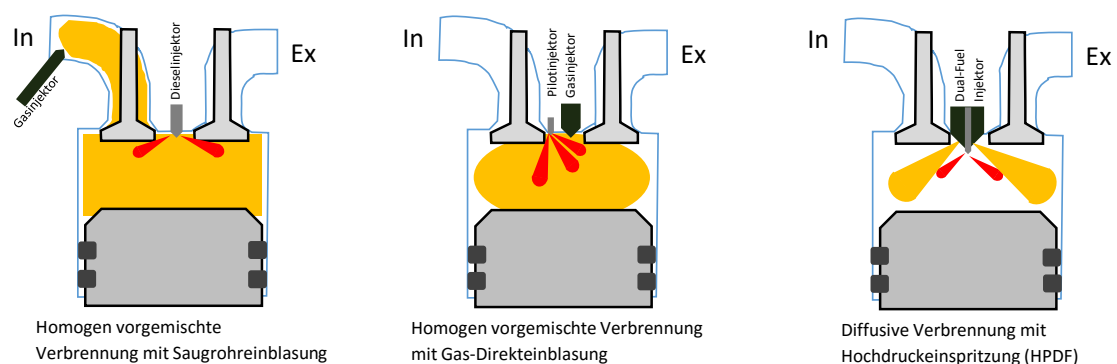


Abbildung 2: Vergleich der verschiedenen Dual-Fuel-Motor Varianten

Auch während der Ventilüberschneidung im Ladungswechsel kann bei Gemischansaugung unverbrannter Kraftstoff ins Abgas gelangen. Damit dies vermieden wird, gibt es den Ansatz der homogen vorgemischten Verbrennung mit Gas-Direkteinblasung. Der Hauptkraftstoff wird hierbei während des Ansaughubes eingebracht und während des Verdichtungs Vorgangs homogenisiert.

Durch die homogene Mischung ist diese Art von Dual-Fuel Motoren aber ebenso im maximal möglichen Verdichtungsverhältnis begrenzt wie die zuvor vorgestellten Konzepte, da die Verbrennung zum Klopfen neigt. Da das Verdichtungsverhältnis direkt in den Wirkungsgrad eingeht, liegen die erreichbaren Werte unterhalb derer von aktuellen Dieselmotoren.

Um die oben genannten Nachteile von homogen vorgemischten Dual-Fuel Motoren zu umgehen, wurde das Konzept der Hochdruck Direkteinspritzung für Dual-Fuel Motoren (auch High-Pressure-Dual-Fuel, HPDF) entwickelt.

2.2. Das HPDF-Verfahren

Das Konzept des HPDF-Brennverfahrens liegt in der diffusiven Verbrennung eines nicht-selbstzündenden Hauptkraftstoffes mithilfe eines selbstzündenden Pilotkraftstoffes. In Abbildung 3 ist beispielhaft die Wärmefreisetzung einer Methan-Diesel HPDF Verbrennung gezeigt. Diese lässt sich in mehrere Abschnitte unterscheiden.

Im gezeigten Fall findet die Diesel-Pilotverbrennung vor der Gasverbrennung statt. Nach der Dieselverbrennung folgt die Gaseinblasung. Wenn die Gasstrahlen auf die heißen Produktgase der Pilotverbrennung treffen, entzünden sich diese. In der Zeit zwischen Start der Gaseinblasung und Auftreffen der Gasstrahlen auf die heißen Produktgase, mischt ein Teil des Methans mit der Brennraumluft vor. Diese vorgemischten Bereiche werden nach der Zündung schlagartig umgesetzt und bilden ein lokales Maximum in der Wärmefreisetzungsrate (Premixed Peak). Anschließend findet bis zum Ende der Einblasung eine diffusionsgesteuerte Verbrennung statt. Mit dem Schließen der Düsennadel brechen der Strahlimpuls und damit auch die Einspritzstrahlen in sich zusammen. In einer ausgeprägten Ausbrandphase brennt der in der Kolbenmulde angesammelte Kraftstoff ebenfalls überwiegend diffusiv ab.

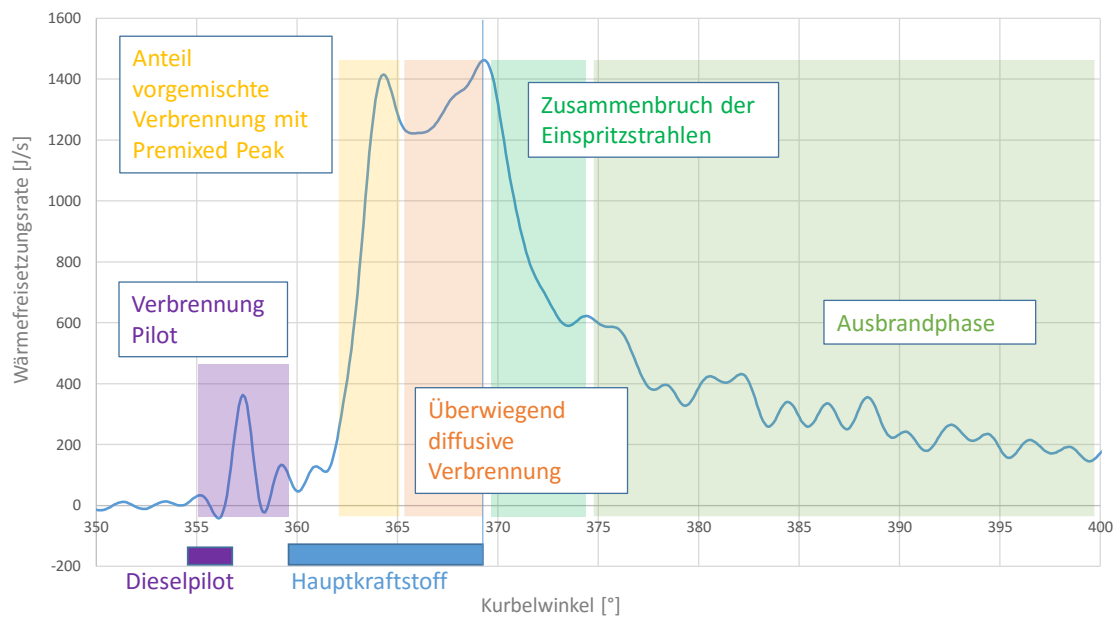


Abbildung 3: Phasen der HPDF-Verbrennung mit Piloteinspritzung vor Hauptkraftstoff-Einbringung

Die anteilige Zusammensetzung Pilot/Hauptkraftstoff ist variabel, wird aber meist optimiert auf die kleinstmögliche Menge an Pilotkraftstoff, da dieser maßgeblich an den Partikelemissionen beteiligt ist (12). Alternative Pilotkraftstoffe wie Oxymethylenether (OME) verbrennen nahezu partikelfrei (13), sind aber aktuell sehr teuer, weswegen auch hier ein Anreiz gegeben ist, die Pilotmenge möglichst klein zu halten. Je nach verwendetem Injektor sind aber trotzdem bis zu 100% Betrieb mit dem Pilot-Kraftstoff möglich (14, 15). Für Nutzfahrzeuganwendungen sowie 4-Takt Großmotoren gibt es speziell entwickelte Injektoren die zwei Kraftstoffe einspritzen können. Bei Zweitakt-Großmotoren ist im Zylinderkopf deutlich mehr Platz vorhanden und es werden Konzepte mit getrennten Gas- und Dieselinjektoren verfolgt (16).

2.2.1. Einspritzstrategien und Strahlanordnung

Durch die separate Einbringung der beiden Kraftstoffe entstehen zusätzliche Freiheitsgrade für die Optimierung der Verbrennung. Verschiedene Untersuchungen zeigen, dass sich bestimmte Interaktionen von Gas- und Dieselstrahlen negativ auf die Zündung und die Emissionen auswirken können. So führt beispielweise eine zu große zeitliche und räumliche Überlappung dazu, dass der Dieselstahl im Gasstrahl aufgenommen wird und keine Zündung stattfindet oder die Emissionen stark ansteigen. (17–21)

Bei der zeitlichen Abfolge von Pilot und Haupteinspritzung können grob drei Fälle unterschieden werden:

- Pilotzündung vor der Haupteinspritzung
- Pilotzündung gleichzeitig mit der Haupteinspritzung
- Pilotzündung nach Beginn der Haupteinspritzung

Wird die Piloteinspritzung so früh durchgeführt, dass die Zündung vor der Einbringung des Hauptkraftstoffes stattfindet zeigen Untersuchungen, dass ein Teil des Hauptkraftstoffes über die Lauflänge zwischen Düsenloch und Erreichen der heißen Verbrennungsprodukte vormischt und sich in der Wärmefreisetzungsrate ein deutlicher Premixed-Peak entwickelt. (22, 18, 23)

Wird der Hauptkraftstoff gleichzeitig mit der Pilotzündung eingebracht, so ist der Anteil an diffusivem Verbrennungsregime beim Hauptkraftstoff am größten. Der Strahl entzündet bereits kurz nach dem Eintritt in den Brennraum am brennenden Zündöl und hat keine Zeit große vorgemischte Anteile zu bilden. (24, 25)

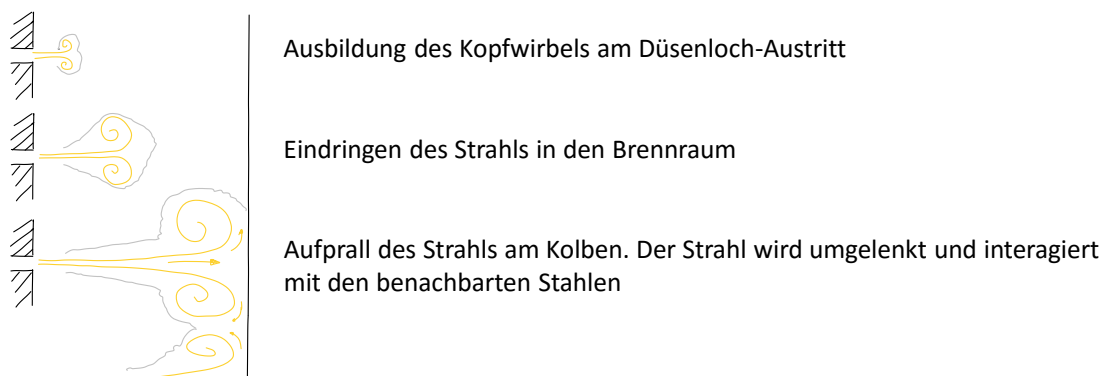


Abbildung 4: Eindring- und Mischungsverhalten eines Hochdruckgasstrahls

Wenn der Pilotkraftstoff erst nach Beginn der Haupteinspritzung zündet, erhöht sich der Vormischanteil an der Verbrennung rapide. Die Kraftstoffstrahlen des Hauptkraftstoffes werden von hinten entzündet, während der vordere Teil der Strahlen bereits weit in den Brennraum eindringen kann. Mit steigendem Vormischgrad steigen die Emissionen von Ruß und unverbrannten Kohlenwasserstoffen durch zu fette und unvollständige Verbrennung zunächst an. Das Brenngas sammelt sich, wie in Abbildung 4 gezeigt, am Kolben an und durch die Interaktion mit den Nachbarstrahlen wird die Mischung mit der umgebenden Luft erschwert. Wird der Vormischgrad durch noch spätere Pilotzündung weiter erhöht, sinken die Partikelemissionen durch den höheren Luftanteil im Gas wieder ab und die NO_x -Emissionen steigen an. (19, 6, 26, 27)

2.2.2. Haupt- und Pilotkraftstoffe

Generell eignet sich für das HPDF-Verfahren eine Vielzahl an Kraftstoffen. Als Hauptkraftstoffe sind vor allem günstige und möglichst regenerativ hergestellte Kraftstoffe wie Erdgas, Methan, oder Methanol von Interesse. Aber auch Kohlenstoff-freie Alternativen wie Wasserstoff und Ammoniak sind denkbar. Die bisherige Forschung konzentriert sich allerdings hauptsächlich auf Erdgas, Methan und Wasserstoffbeimischungen. Im Folgenden wird ein kurzer Überblick über den Stand der Technik für die in dieser Arbeit betrachteten Kraftstoffe mit Hinblick auf ihre Anwendung als potentielle HPDF-Kraftstoffe gegeben.

Erdgas und Methan

Erdgas ist ein gut verfügbarer, sowie günstiger Kraftstoff. Die Zusammensetzung variiert weltweit je nach Quelle, der Hauptbestandteil ist aber stets Methan. Methan wird aktuell immer größere Bedeutung als potentieller Energiespeicher zugemessen, da es sich mithilfe von regenerativer Energie und CO₂ aus Carbon-Capture-Quellen synthetisieren lässt (28, 29). Im Gegensatz zu Wasserstoff kann es nahezu ohne Verluste in großen Mengen in bestehenden Erdgasnetzen und Kavernen gespeichert werden. (30)

Zu Erdgas/Methan-HPDF finden sich die meisten Arbeiten in der Literatur. Bereits in den 1990er Jahren beschäftigt sich P. Oulette als einer der Ersten mit der Hochdruck-Direkteinblasung von Erdgas mit Pilot-Dieselizeündung für die Anwendung in Nutzfahrzeugen (31). In Zusammenarbeit mit der Firma Westport wird der erste High-Pressure-Dual-Injection (HPDI) Injektor entwickelt (32), der mit Diesel als Pilotkraftstoff und Erdgas als Hauptkraftstoff arbeitet.

Aufgrund der Tatsache, dass die ersten HPDF-Motoren mit Erdgas/Methan betrieben werden sollten, existiert viel Grundlagenforschung zum Eindring- und Mischungsverhalten von unterexpandierten Erdgas- und Methanstrahlen. Forschung mit Hinblick auf die Anwendung in einem Dual-Fuel Motor finden sich beispielsweise bei Hill & Oullette (33), Yu et.al. (34), Keskinen et.al. (35), Hemzehloo et. al (36) Bannholzer (37) und Sakellarakis et. al. (38). Von besonderem Interesse ist hier der Einfluss des Öffnungs- und Schließverhaltens des Injektors auf die Gemischbildung, welche maßgeblich die Emissionsbildung beeinflusst.

Untersuchungen von McTaggart-Cowan et al. zeigen den Einfluss des Gas-Einblase-drucks auf die Leistung und die Emissionen des HPDI-Motors. Bei verwendeten Gasdrü-

cken bis 300 bar zeigt sich, dass mit steigenden Einblasedrücken die gemessenen Partikelemissionen sinken und sich die Zündverzugszeiten verkürzen (39). Optische Versuche von Takasaki et al. und Imhof an einem Einhubtriebwerk mit bis zu 475 bar Einblasedruck zeigen eine deutliche Reduktion des Rußleuchtens gegenüber niedrigeren Drücken (40, 41).

Für die Anwendung in Zweitakt-Großmotoren (Langsamläufer) zeigen Liu Haifeng et al. (16), dass ein gewisser Anteil an Vormischgrad einen positiven Einfluss auf die Performance des Motors hat, sowie dass sich der klassische Ruß-NO_x-Tradeoff auch bei der diffusiven Gasverbrennung nachweisen lässt. Mithilfe von Abgasrückführung (AGR) kann die Stickoxidbildung deutlich reduziert werden (42).

Fink et. al. (43) untersuchen an einem Einhubtriebwerk den Einfluss der Strahlanordnung von Pilot- und Methanstrahl auf die Zündung und Verbrennung. Jud (44) erstellt mithilfe dieser Ergebnisse ein Simulationsmodell zur Interpretation dieser Untersuchungen. Sie stellen fest, dass durch bestimmte Winkelanordnungen der Dieselstrahl komplett in den Gasstrahl eingesaugt werden kann und durch den Sauerstoffmangel im Strahl Zündaussetzer auftreten.

Aktuelle Studien an optischen Einzylinderaggregaten konzentrieren sich auf die Rußbildungsmechanismen bei der motorischen Anwendung des Brennverfahrens mit der Kraftstoff-Kombination Erdgas-Dieselpilot. So finden sich optische Untersuchungen mit 2-Farb-Pyrometrie beispielsweise bei (45–47) und (48).

Wasserstoff

Als weiterer gasförmiger Hauptkraftstoff eignet sich Wasserstoff. Mit dem fortschreitenden Ausbau der regenerativen Energien wird Wasserstoff als potentieller Energiespeicher vor allem für Wind und Solarenergie behandelt. (49–51)

In Verbrennungsmotoren ist die Verwendung von Wasserstoff als Kraftstoff durch die rußfreie Verbrennung und die Vermeidung von CO₂-Emissionen interessant (52). Aus Versuchen mit gemischansaugenden Motoren ist bekannt, dass Wasserstoffanteile im Kraftstoff einen Einfluss auf die Klopfwilligkeit und die Selbstzündungsneigung haben (53, 54). Ein detaillierter Überblick über Wasserstoff-Direkteinspritzung bei Verbrennungsmotoren ist bei Yip et al. (55) zu finden. Durch die sehr geringe notwendige Zündenergie und die damit verbundenen Rückzündungen in den Ansaugtrakt, wird bei Wasserstoff verstärkt an Direkteinblasung geforscht.

Um den Strahlaufbruch und die Mischung von direkteingeblasenem Wasserstoff zu untersuchen werden Versuche in Einspritzkammern und optischen Einzylinderaggregaten durchgeführt, oft unterstützt durch numerische CFD-Modellierung. Einzelstrahluntersuchungen zur Mischung und Flammausbreitung an nicht vorgemischten Wasserstoffstrahlen finden sich beispielsweise bei Owston et al. (56), Kawanabe (57) und Mansor (58).

Im diffusiven Gasbrennverfahren verkürzen Beimischungen von Wasserstoff zu Erdgas die Zündverzugszeiten. Rogers et al. zeigen, dass sich Wasserstoff-Freistrahlen, verglichen mit Erdgas bei gleichem Druckverhältnis, schneller ausbreiten und der Strahlkegelwinkel breiter ausfällt. Dies spricht für eine schnellere Mischung mit der umgebenden Luft (59). Außerdem lässt sich zeigen, dass die Verbrennung bei niedrigen Lasten durch die chemischen Reaktionsraten limitiert ist, wohingegen bei hohen Lasten die physikalische Mischung die Kraftstoff-Umsetzung begrenzt. (59–61)

Gleis (62) zeigt, dass bei der Verwendung von reinem Wasserstoff im HPDF-Verfahren der Zündverzug, verglichen mit Methan und Methanol, deutlich kürzer ausfällt. Die Stickoxidemissionen bei der Verbrennung steigen durch die höheren Flammentemperaturen stark an. Die NO_x Emissionen bei diffusiver Wasserstoffverbrennung können dennoch niedriger ausfallen als bei vorgemischter Wasserstoffverbrennung mit Ladungsschichtung bei ungünstigem Einspritzzeitpunkt, wie Liu et al. in ihrer Studie zeigen (63). Eine Studie von Westport und AVL zeigt, dass ein im HPDF-Verfahren betriebener Wasserstoff-Motor einen ähnlichen thermischen Wirkungsgrad erreicht, wie ein vergleichbarer Dieselmotor (64).

Die größte Herausforderung bei der Anwendung von Wasserstoff als Brennstoff ist seine Lagerung und der Transport. Durch seine geringe Dichte muss Wasserstoff hoch verdichtet oder auf sehr tiefe Temperaturen gekühlt werden um ihn effizient transportieren zu können (65). Alternative Speichertechnologien sind beispielsweise Metall-Hydride oder chemische Speicherung in Form von Methan, Methanol oder Ammoniak (49).

Ammoniak

Aufgrund der schlechten Speicherbarkeit von Wasserstoff und des großen CO_2 -Äquivalents von Methan, stellt Ammoniak eine interessante Kraftstoff-Alternative dar (66–68).

Ammoniak wird weltweit im großen Stil, meist mithilfe des Haber-Bosch-Verfahrens, zur Verwendung als Düngemittel produziert (69). Allerdings können die Ausgangsstoffe

Wasserstoff und Stickstoff auch mithilfe von regenerativen Quellen aus Wasser und der Umgebungsluft erzeugt werden (28).

Ammoniak ist bereits bei geringen Drücken (ca. 4,3bar) unter Raumtemperatur flüssig (70), und daher leicht speicherbar – es kann daher auch als Wasserstoff-Speicher dienen (71–73).

Aufgrund der schlechten Zündeigenschaften (Selbstzündtemperatur ca. 650 °C, (74)) der geringen Flammgeschwindigkeiten (75) und der Toxizität durch unverbrannten Ammoniak im Abgas, ist die Anwendung komplex. Bei magerer bis stöchiometrischer Verbrennung von Ammoniak entstehen Stickoxidemissionen, weswegen sich fette Verbrennungsregime besser eignen da die Stickoxidbildung durch den Luftmangel zurückgeht. (76–78). Durch Beimischung von Kohlenstoffmonoxid oder Wasserstoff kann die laminare Flammgeschwindigkeit zwar erhöht werden, dies geht aber mit erhöhter Stickoxidbildung einher (79).

Erste Studien zu Ammoniak als Kraftstoff-Alternative finden sich bereits Mitte des 20. Jahrhunderts (80), in denen Ammoniak als Kraftstoff für Stadtbusse untersucht wurde. Pearsall und Garabedian führen Versuche mit Ammoniak in Dieselmotoren durch. Sie bringen gasförmigen Ammoniak in den Ansaugtrakt eines Dieselmotors ein und zünden das Gas-Luftgemisch mit einer Diesel-Piloteinspritzung. Eine Selbstzündung von Ammoniak konnte allerdings selbst bei einem Verdichtungsverhältnis von 30 nicht herbeiführt werden. (81)

Nachdem schon sehr kleine Beimischungen an Wasserstoff die laminare Flammgeschwindigkeit und die adiabate Flammentemperatur erhöhen, haben Frigo und Gentili ein Motorkonzept mit Zündung durch Zündkerze entwickelt, bei dem ein Teil des Ammoniaks in einem katalytischen Reaktor zu Wasserstoff und Stickstoff zerlegt und dann dem Motor wieder als Brenngas zugeführt wird. So konnte ein stabiler Motorbetrieb erreicht werden. (82)

Reiter und Kong untersuchen einen Diesel-Ammoniak Dual-Fuel Motor, und stellen fest, dass sich die besten Ergebnisse hinsichtlich Emissionen und Wirkungsgrad bei 40 % Dieselanteil erreichen ließen (83).

Aufgrund der ambitionierten Klimaziele der Internationalen Maritimen Organisation, in denen die Treibhausgase um 50 % des CO₂-Äquivalent bis 2050 reduziert werden sollen, untersuchen aktuell mehrere Großmotoren-Hersteller wie z.B. Wärtsilä und MAN/Mitsui die Anwendung von Ammoniak als Kraftstoff für Großmotoren. (84)

Unter dem Gesichtspunkt, dass Ammoniak bereits in kleinstmengen stark gewässer-gefährdend ist, sollte die Anwendung auf Schiffen gut durchdacht werden. Es sind Sicherheitskonzepte notwendig, welche selbst im Falle einer Havarie ein Austreten von Ammoniak ins Wasser vermeiden können. (85)

3. Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Grundlagen vorgestellt die für die für die Modellierung des HPDF-Brennverfahrens verwendet werden. Im weiteren Verlauf wird kurz auf die für die Validierung der Modellierung verwendeten optischen Messtechniken eingegangen.

3.1. Strömungsmechanische Grundlagen

Innermotorische Strömungen sind sehr komplex. Durch die hohen auftretenden Strömungsgeschwindigkeiten z.B. beim Ladungswechsel, sind die Strömungen turbulent. Durch das Öffnen und Schließen der Ein- und Auslassventile muss die Berechnung instationär erfolgen. Für Modellierung von Verbrennungsprozessen müssen zusätzliche Terme in der Energiegleichung berücksichtigt und Terme für den Speziestransport eingeführt werden. Erfolgt die Einbringung der Kraftstoffe in Flüssigphase, so entsteht zusätzlich eine Mehrphasenströmung. Im Folgenden werden daher alle notwendigen numerischen Grundlagen zum Verständnis des Hochdruck-Dual-Fuel-Verfahrens vorgestellt.

3.1.1. Erhaltungsgleichungen

Grundsätzlich lassen sich innermotorische Strömungen mithilfe der Navier-Stokes Gleichungen beschreiben. Die Massenerhaltung für das Volumen V mit der Oberfläche S wird in Form der Kontinuitätsgleichung beschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \, dV + \int_S \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = 0 \quad (1)$$

(ρ =Dichte, \mathbf{v} =Geschwindigkeitsvektor). Die zeitliche Änderung des auf ein Fluidelement wirkenden Impulses, entspricht der Änderung aller auf das Element wirkenden Kräfte \mathbf{f} und kann wie folgt formuliert werden:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \mathbf{v} \, dV + \int_S \rho \mathbf{v} \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = \sum \mathbf{f} \quad (2)$$

wobei sich \mathbf{f} aus Oberflächen- und Volumenkräften zusammensetzt. Die allgemeine Gleichung für eine skalare Größe φ lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \varphi \, dV + \int_S \rho \varphi \mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \, dS = \sum \mathbf{f}_\varphi \quad (3)$$

wobei es sich bei φ beispielsweise um die Energie oder eine chemische Spezies handeln kann. (86)

3.1.2. Zustandsgleichung

Für einen geschlossenen Satz Erhaltungsgleichungen werden die thermischen Zustandsgrößen Druck p , Temperatur T und die Dichte ρ für ein ideales Gas mithilfe der thermischen Zustandsgleichung verbunden:

$$p = \rho RT \quad (4)$$

wobei R der spezifischen Gaskonstante $R = R_m/M_i$ mit der universellen Gaskonstante $R_m=8,3145 \text{ J/molK}$ der Spezies M_i entspricht. Da bei den betrachteten Verbrennungsvorgängen im Motor große Druck- und Temperaturgradienten auftreten, ist die Annahme eines idealen Gases nicht mehr gerechtfertigt. In dieser Arbeit wird daher vorwiegend das Realgasmodell nach Redlich und Kwong verwendet (87):

$$p = \frac{RT}{V-b} - \frac{a}{\sqrt{TV}(V+b)} \quad (5)$$

mit

$$a = 0,42748 \frac{R^2 T_c^{2,5}}{p_c} \quad (6)$$

und

$$b = 0,08664 \frac{RT_c}{p_c} \quad (7)$$

wobei p_c und T_c den kritischen Druck und die kritische Temperatur eines Gases bezeichnen.

Für die kalorische Zustandsgleichung werden die spezifischen Wärmekapazitäten für die Änderung der spezifischen Enthalpie in dieser Arbeit mithilfe der NASA-Polynome (88) ermittelt. Die benötigten Parameter dafür werden aus den verwendeten Reaktionsmechanismen entnommen.

3.1.3. Reaktionskinetik

Die Verbrennung ist im Fall eines Verbrennungsmotors die exotherme Reaktion des Kraftstoffes mit dem in der Luft enthaltenen Sauerstoff. Im Spezialfall der des HPDF-Verfahrens handelt es sich um eine überwiegend diffusive Verbrennung, welche von einem selbstzündenden Kraftstoff initiiert wird.

Die Verwendung von klassischen Verbrennungsmodellen für Otto- oder Dieselmotoren ist für das HPDF-Brennverfahren aus mehreren Gründen schwierig. Zum einen müssen zwei unterschiedliche Kraftstoffe mit jeweils unterschiedlichen Eigenschaften berücksichtigt werden. Zum anderen können diese Kraftstoffe in nahezu allen denkbaren Mischungszuständen auftreten. Außerdem kommt es aufgrund der geometrischen Anordnung der Strahlen immer zu einer Teilvormischung des Hauptkraftstoffes. Dieser Anteil verbrennt vorgemischt, die restliche Verbrennung erfolgt diffusionsgetrieben.

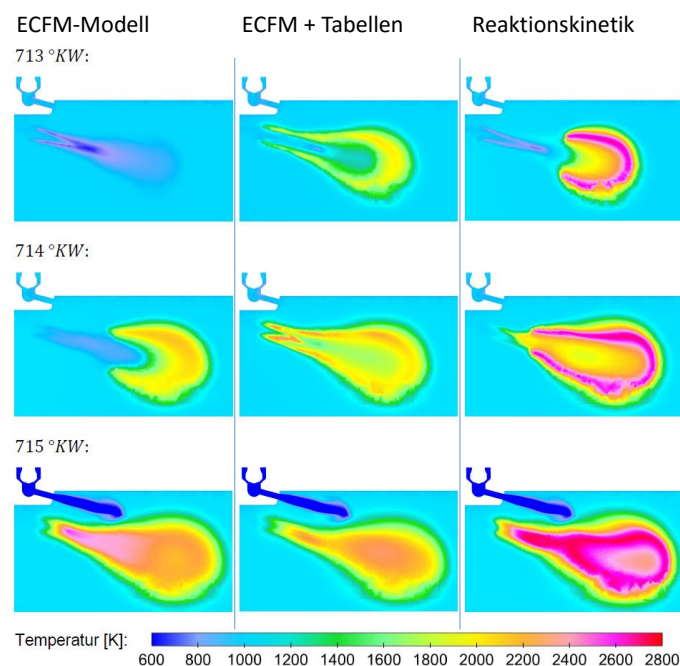
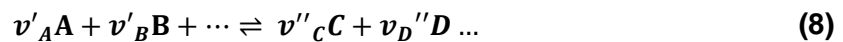


Abbildung 5: Vergleich der Dieselzündung bei Modellierung mittels ECFM-Verbrennungsmodell (links), mit Tabellen für die Zündung erweitertem ECFM (mitte) und Reaktionskinetik (rechts) (89)

Aufgrund dieser Komplexität wurde nach anfänglichen Studien mit etablierten Verbrennungsmodellen, wie z.B. dem ECFM Modell nach (90) dazu übergegangen, die Verbrennungsprozesse mithilfe von detaillierter Reaktionskinetik zu beschreiben. Die einzelnen Reaktionen und deren thermodynamische und stoffspezifische Größen werden mithilfe eines Reaktionsmechanismus hinterlegt und wie folgt in die Simulation integriert:

Nach (91) kann eine chemische Reaktion zwischen den Ausgangsstoffen und den Produkten allgemein beschrieben werden als



mit v_i als stöchiometrischen Koeffizienten vor (') und nach (") der Reaktion. Chemische Reaktionen streben immer nach einem Gleichgewichtszustand, der dadurch definiert ist, dass Hin- und Rückreaktion mit gleicher Geschwindigkeit stattfinden. Wie viele Mol einer Spezies S in einer Reaktion r produziert oder verbraucht werden, lässt sich durch $v_s = v'_s - v''_s$ beschreiben.

Die Produktionsrate w_s einer Spezies S über die Anzahl R an Reaktionen lässt sich definieren als

$$w_s = \frac{d[S]}{dt} = \sum_{r=1}^R v_{r,s} q_r \quad (9)$$

wobei

$$q_s = k_{f,r} \prod_S (s)^{v'_{r,s}} - k_{b,r} \prod_S (s)^{v''_{r,s}} \quad (10)$$

Mithilfe der Arrhenius-Gleichung werden die Vorwärts- und Rückwärts-Raten-Koeffizienten $k_{f,r}$ und $k_{b,r}$ definiert:

$$k = AT^n e^{-\frac{E_a}{R_0 T}} \quad (11)$$

Wobei A, n und E_a empirische Faktoren sind, welche spezifisch für jede Reaktionsgleichung im Reaktionsmechanismus angegeben werden. (92)

Mithilfe der beiden Hauptsätze der Thermodynamik wird die Stoffzusammensetzung im Gleichgewichtszustand bestimmt. Der erste Hauptsatz für ein ruhendes, geschlossenes und kompressibles System lautet wie folgt:

$$dU = dQ + dW \quad (12)$$

Die Änderung der inneren Energie dU des betrachteten Systems lässt sich beschreiben als die Summe der zu- oder abgeführten Wärmemenge dQ und der Änderung der am System verrichteten Arbeit dW . Der zweite Hauptsatz der Thermodynamik beschreibt die Zunahme der Entropie S im System durch Irreversibilitäten:

$$dS = \frac{dQ}{T} + dS_{irr} \quad (13)$$

Die freigesetzte Wärme einer Reaktion wird mithilfe der Reaktionsenthalpie angegeben. Diese lässt sich berechnen aus der Differenz der Enthalpien der Edukte und Produkte der an der Reaktion beteiligten Moleküle (93):

$$\Delta H_R^0 = \sum \Delta H_{Produkte}^0 - \sum \Delta H_{Edukte}^0 \quad (14)$$

Die einzelnen Enthalpien der an den Reaktionen beteiligten Spezies berechnet sich aus der Summe der Bindungsenthalpie zwischen den Atomen und der Enthalpie, die benötigt wird um von einem definierten Referenzzustand ($T=298,15$ K, $p=101\,325$ Pa), den aktuellen Zustand in der Reaktion zu erreichen.

Die Bildungsenthalpie lässt sich durch Angabe von Struktur (ein- oder mehratomig) und zwei Parametern, die sich aus Lennard-Jones-Potential, Boltzmann-Konstante, Dipol-Moment, Polarität und Z_{rot} errechnen, bestimmen.

3.1.4. Hochdruck - Gaseinblasung

Methan und Wasserstoff werden mit Drücken von bis zu 500bar gasförmig, bzw. in überkritischen Phasenzustand in den Brennraum eingebracht. Um die Komplexität der Hochdruck-Gaseinblasung verstehen zu können, wird im Folgenden kurz auf die zugrundeliegende Gasdynamik eingegangen. Vereinfachend wird hier eine quasi-eindimensionale, stationäre, reibungsfreie, kompressible und adiabate Strömung betrachtet. Der maxi-

male Massenstrom, mit der ein gasförmiger Kraftstoff durch ein Düsenloch in den Brennraum eingebracht werden kann, ist begrenzt durch den Düsen-Engstquerschnitt, die Schallgeschwindigkeit und den Druck der sich im Sackloch der Düse einstellt:

$$\dot{m} = A \frac{p_0}{\sqrt{T_0}} Ma \left(1 + \frac{\kappa - 1}{2} Ma^2 \right)^{-\frac{\kappa+1}{2(\kappa-1)}} \sqrt{\frac{\kappa}{R}} \quad (15)$$

mit der Machzahl Ma :

$$Ma = \frac{v}{\sqrt{\kappa RT}} \quad (16)$$

Für $Ma = 1$ erreicht der Massenstrom sein Maximum, der Massenstrom kann also nur noch durch Erhöhen des Druckes p_0 im Sackloch weiter erhöht werden. Das kritische Druckverhältnis, für das $Ma = 1$ erreicht wird, errechnet sich wie folgt:

$$\frac{p^*}{p_0} = \frac{1}{\left(1 + \frac{\kappa - 1}{2} \right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}}} \quad (17)$$

Für Methan liegt der Wert für den Isentropenexponent κ bei etwa 1,3 (70); damit ergibt sich für das kritische Druckverhältnis ein Wert von etwa 0,54. Vor Start der Einspritzung herrscht im Sackloch Brennraumdruck. Mit Anheben der Düsennadel steigt der Druck im Sackloch allmählich an – das Druckverhältnis sinkt ab. Gleichzeitig erhöht sich durch die Verbrennung der Druck im Brennraum, wodurch das Druckverhältnis am Ende der Einblasung wieder oberhalb des kritischen Druckverhältnisses liegen kann.

Abbildung 6 zeigt beispielhaft den Druckverlauf im Sackloch sowie den Brennraumdruck für einen repräsentativen Fall mit Methan-Einblasung bei 300bar Raildruck. Ist die Düsennadel geschlossen, so entspricht der Sacklochdruck dem Brennraumdruck. Durch die Drosseleffekte im Injektor und über die Düsennadel ergeben sich im Sackloch bei maximal geöffneter Düsennadel etwa 200bar Einspritzdruck. Der Druck im Brennraum liegt vor Start der Pilotverbrennung bei etwa 90bar und steigt durch die Verbrennung der beiden Kraftstoffe noch während der Gaseinblasung so weit an, dass während dem letzten Drittel der Einblasung das Düsenloch bereits nicht mehr kritisch durchströmt wird. Dies erschwert die Vermessung von motornahen Einspritzkennlinien, da in klassischen Einspritzverlaufsmessgeräten nur ein konstanter Gegendruck eingestellt werden kann.

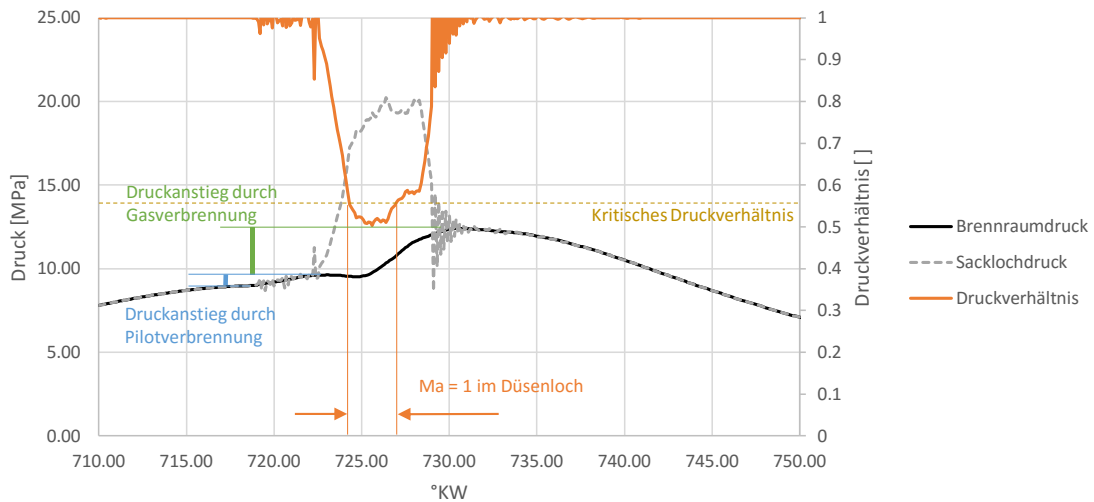


Abbildung 6: Druckverläufe und Druckverhältnis von Sackloch und Brennraum

Die in der Graphik sichtbaren Druckschwankungen im Düsenloch entstehen nach Schließen der Düsenadel durch das abrupte Entkoppeln des Sacklochs vom Brennraum in der Simulation und haben keinen Effekt auf die Verbrennungssimulation.

3.1.5. Flüssigstrahlen

Die in dieser Arbeit verwendeten Kraftstoffe Diesel, Methanol und Ammoniak werden in der Regel in flüssigem Zustand in den Brennraum eingebracht und verdampfen anschließend. Daher wird im Folgenden näher auf die physikalischen Effekte des Sprayaufbruchs eingegangen, welche die Grundlage für die nachfolgende numerische Modellierung bilden.

Der Sprayaufbruch lässt sich unterteilen in Primär- und Sekundäraufbruch (94). Der Primäraufbruch beschreibt den direkten Zerfall des Kraftstoffstrahls in Tropfen und Ligamente direkt nach dem Austritt aus dem Spritzloch (95). Er lässt sich abhängig von der Ohnesorgezahl

$$Oh = \frac{\eta}{\sqrt{d \rho \sigma}} \quad (18)$$

und der Reynoldszahl

$$Re = \frac{\rho v d}{\eta} \quad (19)$$

(d Tropfendurchmesser, σ Oberflächenspannung, η dynamische Viskosität) in vier Aufbruchsregime untergliedern:

- Rayleigh – Zerfall
- Erster wind-induzierter Zerfall
- Zweiter wind-induzierter Zerfall
- Atomisierung (auch Zerstäuben genannt)

Bei niedrigen Strahlgeschwindigkeiten, wie sie beispielsweise beim Öffnen und Schließen der Düsenadel auftreten, ist der Rayleigh-Zerfall maßgebend. Er lässt sich unter anderem mit einem tropfenden Wasserhahn visualisieren. Charakteristisch für den Rayleigh-Zerfall sind Tropfendurchmesser größer als der Düsendurchmesser. Ein klassisches, motorisches Beispiel für einen Rayleigh-Zerfall ist das Nachtropfen eines Injektors. (96)

Des Weiteren wird in zwei wind-induzierte Zerfälle unterteilt. Hier wirken zusätzlich aerodynamische Kräfte auf das Fluid. Hierdurch entstehen Schwingungen im Fluid, die dann letztendlich zum Zerfall führen. Außerdem können kleinere Tropfen und Ligamente aus dem Hauptstrahl herausgelöst werden.

Bei der Atomisierung ist die relative Geschwindigkeit zwischen Strahl und Umgebung so hoch, dass die Strahloberfläche beim Austritt aus dem Düsenloch zerstört wird und der Strahl direkt in kleinere Tropfen aufbricht.

Der Sekundäraufbruch beschäftigt sich mit dem weiteren Zerfall der entstandenen Tropfen und Ligamente stromabwärts. Hier spielen Effekte wie die Rayleigh-Taylor und die Kelvin-Helmholtz Instabilitäten eine große Rolle. Sie entstehen durch die Interaktion der Tropfen-Flüssigphase mit der umgebenden Luft. Während die Kelvin-Helmholtz Instabilität longitudinale Schwingungen auf der Tropfenoberfläche erzeugt, sorgt die Rayleigh-Taylor Instabilität für transversale Amplituden. Durch die Schwingungen lösen sich kleinere Tropfen aus dem Strahl und große Tropfen zerfallen. Das Verhältnis zwischen den

aerodynamischen Kräften, die auf die Tropfen wirken, und der Oberflächenspannung σ wird mithilfe der Weber-Zahl beschrieben:

$$We = \frac{\rho dv_{rel}^2}{\sigma} \quad (20)$$

Je höher die Weberzahl, desto instabiler sind die Tropfen.

Für die Bildung eines zündfähigen Kraftstoff-Luftgemisches müssen die flüssigen Tropfen verdampfen. Die dafür notwendige Verdampfungsenthalpie wird der Tropfenumgebung entzogen. Im Falle eines Motors stammt sie aus der umgebenden Luft im Brennraum. Je nach Menge des eingebrachten Kraftstoffes, kann hierdurch die Zylinderladung deutlich abgekühlt werden. Der dampfförmige Kraftstoff um den Tropfen mischt mit der umgebenden Luft. (26)

3.2. Numerische Methoden

Hier wird ein Überblick über die verwendeten numerischen Methoden gegeben. Für einen ganzheitlichen Überblick wird auf die gängige Literatur verwiesen, z.B. Ferziger & Peric (86). Die Herausforderung dieser Arbeit liegt in der kombinierten Verwendung der großen Anzahl an Modellen und deren Abstimmung und Validierung.

3.2.1. Simulation turbulenter Strömungen

Turbulente Strömungen, wie die in dieser Arbeit betrachteten, werden über ihre Reynoldszahl definiert. Die Reynoldszahl einer Strömung wird wie folgt berechnet:

$$Re = \frac{\rho v_0 L_0}{\eta} \quad (21)$$

mit v_0 Referenzgeschwindigkeit und L_0 Referenzlänge. Turbulente Strömungen werden durch den Prozess der Energiekaskade aufrechterhalten. Hierbei wird die Strömung in Skalen aufgeteilt. Die großen Skalen ergeben sich aus der Geometrie und den Randbedingungen des Problems. Bezogen auf die Geometrie sind die erzeugten Wirbelstruktu-

ren der Turbulenz sehr groß. Hierzu gehören beispielsweise Wirbel, die bei der Umströmung von scharfen Kanten, z.B. am Ausgang eines Düsenlochs des Gasinjektors, entstehen. Kleinskalige Wirbel entstehen aus den großen Skalen und sind nur noch indirekt von geometrischen Randbedingungen abhängig. Je größer die Reynoldszahlen einer Strömung, umso ausgeprägter ist die Skalen-Trennung in einer Strömung. (97, 92)

Aufgrund der hohen Komplexität der Turbulenz wäre es zu zeitaufwändig alle Skalen direkt numerisch zu simulieren, deshalb werden turbulente Phänomene durch Modellierung angenähert. Bei den verwendeten instationären Reynolds-averaged-Navier-Stokes Gleichungen (RANS) werden die Größen mittels Favre-Mittelung in einen Mittelwert und eine Fluktuation um diesen Wert aufgeteilt. Eine detaillierte Herleitungen der Gleichungen findet sich vielfach in der Fachliteratur und kann beispielsweise bei Ferziger & Peric (86) nachgeschlagen werden.

Durch die Mittelung entstehen in den Impulsgleichungen Terme der Form $\overline{\rho u'_j u'_i}$ (Reynolds-Spannungen) und $\overline{\rho u'_j \phi'}$ (turbulenter Skalarfluss), wodurch mehr Unbekannte als Gleichungen vorhanden sind. Zur Schließung der Gleichungssysteme werden Turbulenzmodelle eingeführt. In dieser Arbeit wird vorrangig das 2-Gleichungs k-ε-RNG Modell verwendet, welches auf dem Standard- k-ε- Modell basiert und eine sogenannte Renormalisierung-Gruppe enthält. (98–100)

Die Reynoldsspannungen können mit der turbulenten Wirbelviskosität μ_t

$$\mu_t = C_\mu \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (22)$$

und der turbulenten kinetischen Energie k nach (86) wie folgt definiert werden:

$$-\overline{\rho u'_j u'_i} = \mu_t \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \delta_{ij} k \quad (23)$$

Ähnlich gilt für den turbulenten Skalarfluss:

$$\overline{\rho u'_j \varphi'} = \Gamma_t \frac{\partial \bar{\varphi}}{\partial x_j} \quad (24)$$

Für den turbulenten Massentransport wird anstelle von Γ_t die turbulente Diffusion D_t

$$D_t = \frac{\mu_t}{\rho S c_t} \quad (25)$$

und für den turbulenten Energietransport die turbulente Wärmeleitfähigkeit K_t

$$K_t = \frac{\mu_t}{\rho Pr_t} c_p \quad (26)$$

verwendet. $S c_t$ ist hierbei die turbulente Schmidtzahl und Pr_t die turbulente Prandtlzahl. (101, 102)

Um Gleichung (22) lösen zu können werden für die turbulente Kinetische Energie k und die Dissipation ε eigene Transportgleichungen aufgestellt.

Für die turbulente kinetische Energie k lautet diese:

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i k}{\partial x_i} = \tau_{ij} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu + \mu_t}{Pr_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) - \rho \varepsilon + \frac{C_S}{1,5} S_s \quad (27)$$

Für die Dissipation ε kann formuliert werden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i \varepsilon)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\mu + \mu_t}{Pr_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{\varepsilon 3} \rho \varepsilon \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \\ &+ \left(C_{\varepsilon 1} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \tau_{ij} - C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon + C_S S_s \right) \frac{\varepsilon}{k} + S - \rho R_\varepsilon \end{aligned} \quad (28)$$

Hierbei sind $C_{\epsilon i}$ Modellkonstanten und S und S_s Quellterme – über letzteren wird die Interaktion z.B. mit flüssigem Spray modelliert. R_ϵ steht hierbei für die „Renormalisierungs-Gruppe (RNG), welche den Einfluss von kleinskaliger Strömungsstrukturen entfernt und in Form von modifizierter Viskosität abbildet. (100)

3.2.2. Simulation der Einspritzung flüssiger Kraftstoffe

Der als Pilotkraftstoff verwendete Diesel, sowie der als Hauptkraftstoff verwendete Ammoniak liegen unter den betrachteten Einspritzbedingungen flüssig vor. Sie müssen demnach auch als Flüssigphase modelliert werden, um die Strahlausbreitung, Verdampfungsphänomene, so wie die Mischung mit der umgebenden Brennraumluft korrekt darstellen zu können.

Für die Simulation der Flüssigeinspritzung wird eine Lagrange Methode verwendet, die Flüssigphase wird mithilfe stochastischer Partikel (Parcels) modelliert, welche Gruppen von Tropfen mit gleichen Eigenschaften repräsentieren. Um das Verhalten des Einspritzstrahls nachbilden zu können wird eine Reihe von Modellierungen benötigt wie in Abbildung 7 gezeigt.

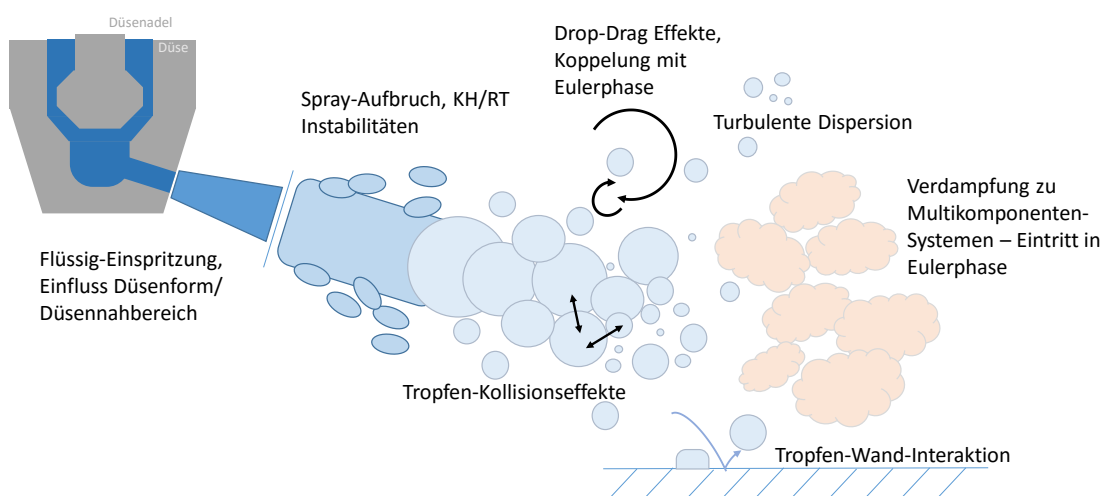


Abbildung 7: Modellierung von Einspritzstrahlen

Die Initialisierung der Parcels findet am Düsenlochaustritt statt. Mithilfe unterschiedlicher Modelle, kann der Einfluss von konischen Düsenformen oder Kavitation in der Initialisierung der Parcels berücksichtigt werden z.B. über eine initiale Geschwindigkeitsverteilung über den Düsenlochdurchmesser. Auch eine statische Verteilung der Parcels kann bei der Initialisierung berücksichtigt werden. Für die Geschwindigkeiten und Massen werden in der vorliegenden Arbeit gemessene Einspritzraten aus einem Einspritzverlaufsindikator verwendet. (103)

Mithilfe von Sprayaufbruchsmodellen werden die Phänomene des Tropfenzerfalls, wie beispielsweise die Kevin-Helmholtz oder Rayleigh-Taylor Instabilität, abgebildet. Für die Interaktion mit der umgebenden Brennraumströmung werden sogenannte Drag-Drop-Modelle, welche die Lagrange-Partikel mit der umgebenden Eulerphase koppeln, eingebunden. Mithilfe von Kollisionsmodellen können Tropfenzusammenstöße, -koaleszenz sowie -zerfall durch Stöße modelliert werden. Des Weiteren werden Modelle für die turbulente Dispersion, sowie für das Verhalten beim Auftreffen auf Wände verwendet. Verdampfungsmodelle beschreiben den Übergang in die gasförmige Eulerphase von Tropfen und Wandfilmen. Mit vollständiger Verdampfung aller Tropfen wird das Parcel aus dem Rechengebiet entfernt. (101)

3.2.3. Adaptives Gitternetz

Für die räumliche Diskretisierung von komplexen Strömungsproblemen ist die Finite-Volumen Methode die gebräuchlichste. Die in dieser Arbeit verwendete kommerzielle Software Converge CFD verwendet ein hexagonales Netz (orthogonales Gitter) (101).

In Regionen mit großen Gradienten in Geschwindigkeit, Temperatur oder skalaren Größen, wie z.B. Spezieskonzentration, können mittels adaptiver Gitteranpassung die Zellen geteilt werden, um die Auflösung in diesen Bereichen zu erhöhen. Dies wird beispielsweise für eindringenden Gasstrahl oder Bereiche der Flammenfront angewendet.

Da das Gitter während der Berechnung erstellt wird, wird in jedem Rechenschritt überprüft ob das Kriterium für eine Gitter-Teilung erfüllt ist. Unterschreitet ein Bereich im Rechengebiet das Kriterium für eine Gitter-Anpassung, so wird diese im nächsten Rechenschritt wieder zurückgenommen, z.B. nach Ende der Verbrennung. (104)

Für jede Simulation wird eine Ausgangszellgröße, die „Base Size“ Z definiert. Für die einzelnen Gradienten werden ganzzahlige Skalierungsfaktoren f definiert, mithilfe derer die resultierende Kantenlänge einer Zelle Z_{res} nach der Vorschrift

$$Z_{res} = \frac{Z}{2^f} \quad (29)$$

berechnet wird. Bei einer Base Size von 1 mm und Skalierungsfaktor $f=3$ besitzt demnach die kleinstmögliche resultierende Zelle eine Kantenlänge von 0.125mm.

Neben der adaptiven Netzanpassung besteht auch die Möglichkeit, feste Bereiche mit Skalierungsfaktoren zu beaufschlagen, beispielsweise Wandbereiche, Spaltvolumina oder auch Bereiche für Flüssigeinspritzung (sog „Fixed Embedding“). Abbildung 8 zeigt zwei Beispiele für die Anwendung von adaptiven Gitteranpassungen.

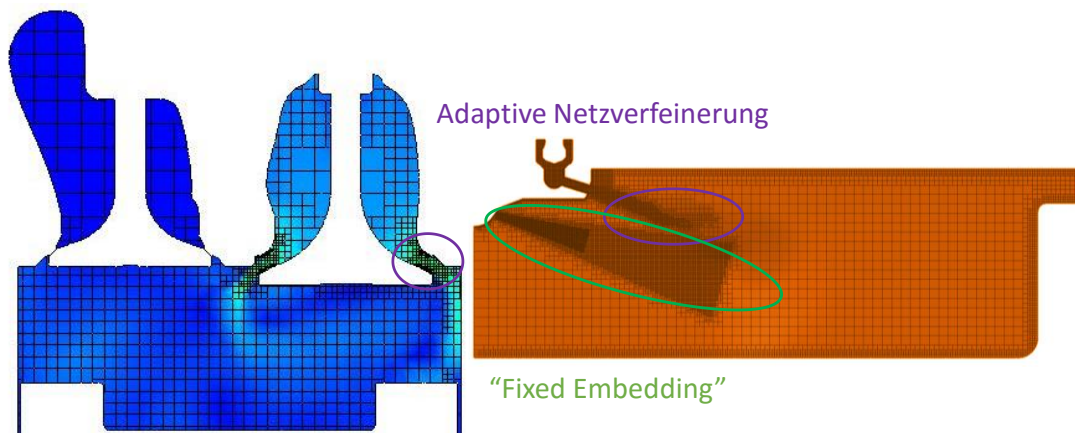


Abbildung 8: Beispiele für adaptive Gitterverfeinerung und "Fixed Embedding"

Im linken Fall wird während des Ladungswechsels vor allem der entstehende Spalt im Ventilsitz aufgrund der dort entstehenden hohen Geschwindigkeiten besser aufgelöst. Der oberhalb sichtbare Auslasskanal ist zu diesem Zeitpunkt nicht von besonderem Interesse – hier wird das Gitter ohne jede Verfeinerung dargestellt um Rechenzeit zu sparen. Im rechten Fall von Abbildung 8 sind sowohl adaptive Netzverfeinerung aufgrund des eindringenden Gasstrahls, sowie fest vordefinierte Bereiche für die Flüssigstrahlein-spritzung des Pilotkraftstoffes gezeigt.

Die Größe der Zeitschritte für die Berechnung des Strömungsfeldes wird mittels der Courant-Friedrich-Lewy (CFL) Zahl an das Rechennetz angepasst.

$$CFL = \frac{v\Delta t}{\Delta x} \leq CFL_{max} \quad (30)$$

wobei v der betragsmäßigen Geschwindigkeit Δt der aktuelle Zeitschritt und Δx der Zellgröße entspricht. Um ein physikalisch sinnvolles Ergebnis zu erhalten, sollte die CFL-Zahl maximal 1 entsprechen.

3.2.4. Solver

Für die Lösung der Gleichungssysteme wird ein sogenanntes Prädiktor-Korrektor-Verfahren verwendet. Prädiktor-Korrektor-Verfahren bestehen aus Kombinationen von impliziten und expliziten Diskretisierungsverfahren. Da explizite Verfahren zwar einfach implementierbar aber bei großen Zeitschritten zu Instabilität neigen und implizite Verfahren aufwendig aber stabil sind, bietet die Kombination aus beiden die Möglichkeit, die Vorteile beider Verfahren zu vereinen.

Detaillierte Beschreibungen des verwendeten PISO-Solvers (Pressure Implicit with Splitting of Operator) finden sich beispielsweise in (105, 86) und (101), daher wird in dieser Arbeit nicht im Detail darauf eingegangen.

Die reaktionskinetischen Gleichungen (siehe Kapitel 3.1.3) werden mithilfe des SAGE Solvers gelöst. (106) SAGE berechnet hierbei mithilfe der im Reaktionsmechanismus hinterlegten Elementargleichungen die Spezies-Produktionsraten und Temperaturen.

Durch die Verwendung der Kombination aus SAGE-Chemie-Solver und CFD-Solver, kann mithilfe von geeigneten Reaktionsmechanismen eine Vielzahl an Kraftstoff-Kombinationen berechnet werden. Außerdem ermöglicht diese Methode die parallele Berechnung von Zündung und Flammenausbreitung, sowohl in vorgemischten, teil-vorgemischten und mischungs-limitierten Bereichen, welche im untersuchten Brennverfahren gleichzeitig auftreten.

4. Experimente und Optische Aufnahmen

Für die Validierung des Simulationsmodells werden in einer parallelen experimentellen Forschungsarbeit mithilfe des volloptischen Einzylinder-Aggregats des Lehrstuhls für Verbrennungskraftmaschinen der Technischen Universität München (107) Versuche durchgeführt und ausgewertet (62, 108). Die Versuchsaufbauten und Durchführung der Experimente sind nicht Bestandteil der vorliegenden Arbeit, sondern zentraler Teil der parallelen Arbeit, welche in enger Zusammenarbeit durchgeführt wurde. Sie werden daher nur soweit vorgestellt, wie sie zum Verständnis dieser Arbeit notwendig sind. Für Details wird auf die Arbeiten von Stephan Gleis (8) verwiesen.

In Tabelle 1 sind die Eckdaten des optischen Einzylinder-Motors aufgelistet.

Tabelle 1: Motordaten

Verdichtungsverhältnis	17
Bohrung	170 mm
Hub	210 mm
Hubvolumen	4,77 l
Max Drehzahl (optischer Betrieb)	750 U/min

Abbildung 9 zeigt den schematischen Aufbau des Motors. Die beiden optischen Zugänge (seitlicher Zugang und Glaskolben) ermöglichen den Einsatz einer Vielzahl an optischen Technologien. Auf die zur Validierung verwendeten wird im Folgenden kurz eingegangen. Für detaillierte Beschreibungen des Prüfstands wird auf folgende Quellen verwiesen: (109, 62).

Zu Beginn der Arbeit ist der Prüfstand mit nur einer monochromen Phantom v2011 Highspeed-Kamera ausgestattet. Im späteren Verlauf wird der Messaufbau um einen Strahlteiler, Bildverstärker und eine Phantom v2012 Farbkamera erweitert – was die gleichzeitige Aufnahme von Flammeigenleuchten und OH*-Chemilumineszenz ermöglicht. (62)

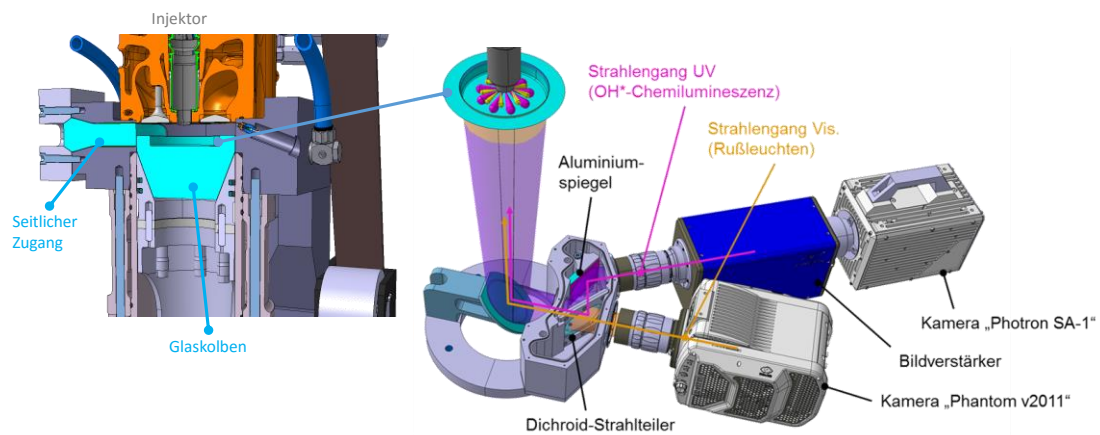


Abbildung 9: Schematische Darstellung des optischen Aufbaus mit Strahlteiler

4.1. Validierungsexperimente - Messdaten

Folgende Parameter wurden im Zuge der Experimente variiert und für die Validierung der Simulationen verwendet:

Tabelle 2: Untersuchte Einflussparameter im Experiment

Haupt-Kraftstoffe	Methan, Methanol, Wasserstoff
Pilot-Kraftstoffe	Diesel, OME 3
Druck Hauptkraftstoff	300 bar, 330 bar, 415 bar, 500 bar
Druck Pilotkraftstoff	750 bar, 1000 bar, 1200 bar, 1800 bar
Verdichtungsenddruck	70 bar, 90 bar, 150 bar, 180 bar
Düsenlochdurchmesser Injektor	1.1 mm, 0.9 mm, 0.75 mm
Ventilhubkurven	Max-F und Miller1 Nockenwelle
Drehzahl	600 U/min, 750 U/min
SOE Pilot	variabel
Haupteinspritzung	Einfach, Mehrfacheinspritzung
Sauerstoffgehalt Ansaugluft	21 %, 19 %

Der Versuchsplan ist hierbei nicht vollfaktoriell. Beispielsweise werden die Versuche mit Methanol und Wasserstoff nur mit den Miller-Steuerzeiten untersucht. Der Zeitpunkt der Haupteinspritzung wird über alle Versuchsreihen hinweg konstant gehalten, mit Ausnahme der Mehrfacheinspritzungen.

Als Messwerte dienen verschiedene Temperaturmessstellen im Ansaug- und Abgasstrakt. Später wurden zur Überwachung des seitlichen Glaseinsatzes zusätzliche Thermoelemente an der Klebestelle ergänzt, wodurch wertvolle Informationen über die Wandtemperaturen gewonnen werden können.

Der Brennraumdruck sowie Ansaug- und Abgasdruck werden in 0.1°Kurbelwinkel (KW) Schritten genau aufgelöst aufgenommen. Zusätzlich dazu befinden sich noch zwei langsame Drucksensoren im Plenum des Ansaugkanals, sowie im Abgasstrakt. Mittels einer Luftpumpe wird der mittlere Frischluftmassenstrom während dem Motorbetrieb gemessen.

4.2. Optische Aufnahmen

Im Folgenden wird kurz auf die optischen Aufnahmetechniken eingegangen, auf welche sich diese Arbeit stützt.

4.2.1. Analyse des Strömungsfeldes

Für einen Abgleich des simulierten Strömungsfeldes mit den tatsächlich im Brennraum vorherrschenden Strömungsbedingungen liegen „Particle-Imaging-Velocimetry“-Aufnahmen vor (62). Bei der Particle Image Velocimetry (PIV) werden mithilfe eines Aerosolgenerators Partikel in die Ansaugluft eingebracht. Durch den seitlichen Zugang des Motors wird an einer vordefinierten Stelle – in diesem Fall 15mm unterhalb des Feuerdecks – ein Lasersheet in den Motor platziert, durch welches die Partikel in dieser Ebene angestrahlt werden. Zum gewünschten Zeitpunkt werden in einem sehr kurzen Zeitintervall zwei Aufnahmen der Partikel in der Ebene gemacht. Mithilfe einer Software können dann die Richtungs- und Geschwindigkeitsvektoren der Partikel in der betrachteten Ebene berechnet und ein Geschwindigkeitsfeld der Strömung zum gewünschten Zeitpunkt erstellt werden. Durch die zeitliche Mittelung mehrerer Aufnahmen wird ein Vergleich mit den RANS-CFD Ergebnissen ermöglicht. (110)

4.2.2. Spraydiagnostik

Um die umfangreichen Spraymodelle abgleichen zu können, wurden mithilfe einer, am seitlichen optischen Zugang montierten, LED-Blitzlampe hochaufgelöste Mie-Streulicht Aufnahmen der Flüssigsprays im Brennraum gemacht. Das eingebrachte Licht wird an den Tropfen der Flüssigphase reflektiert. Das reflektierte Licht kann dann mithilfe der Kamera von unten durch den Glaskolben aufgenommen werden.

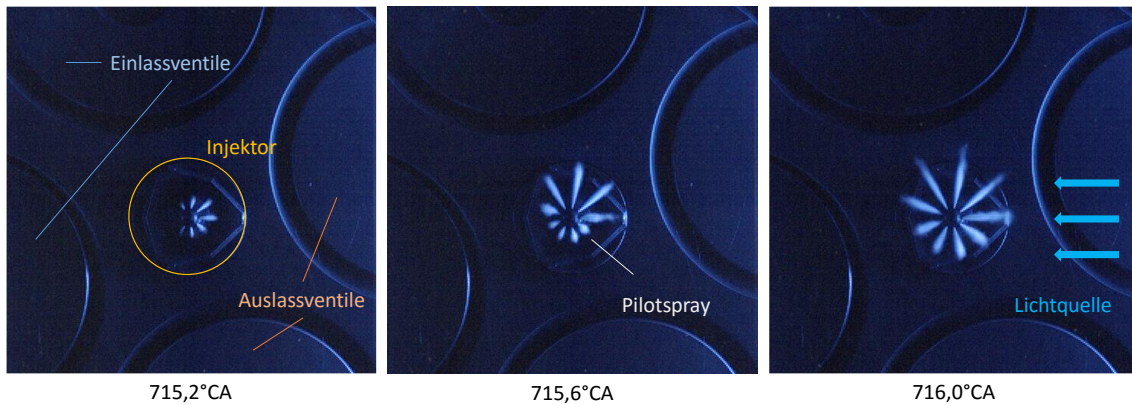


Abbildung 10: Mie-Streulicht-Aufnahmen des Dieselpilotsprays; deutlich erkennbar ist der Einfluss von Fertigungsabweichungen im Nadelsitz, durch welche sich die Strahlen nicht gleichmäßig ausbreiten.

Durch die Verwendung verschiedener Injektoren mit unterschiedlichen Fertigungstoleranzen bei der Spritzlochgeometrie ergeben sich teilweise ungleichmäßige Spraybilder wie in Abbildung 10 gezeigt.

4.2.3. Verbrennungsdiagnostik

Für die Verbrennungsdiagnostik werden zwei Messtechniken eingesetzt: die Aufnahme des Flammeigenleuchten und die OH^* -Chemilumineszenz.

Beim Flammeigenleuchten wird das sichtbare Licht aufgenommen, welches durch die Verbrennung entsteht. Meist ist dies breitbandiges Leuchten, welches durch heiße Rußteilchen erzeugt wird. Außerdem sind leuchtende Anteile des CO^* -Radikals und von CH^* -Radikalen enthalten. (111)

Mithilfe der Zwei-Farben-Methode können Rußtemperaturen im optischen Betrieb identifiziert werden. Diese Methode wurde bereits erfolgreich für eine diffusive Gasverbrennung eingesetzt (siehe (26) und (46)) und für die Optimierung von Rußbildungsmodellen in der CFD angewendet (45).

Bei der OH^* -Chemilumineszenz wird mithilfe eines Wellenlängen-Filters und einem Bildverstärker die Lichtemission des OH^* -Radikals aufgenommen. Das OH^* -Radikal entsteht hauptsächlich in der Flammenfront und ist daher ein Indikator für die Flamme bzw. Flammenfront (112, 113). Die Bilder sind integral, d.h. es ist keinerlei Tiefeninformation vorhanden.

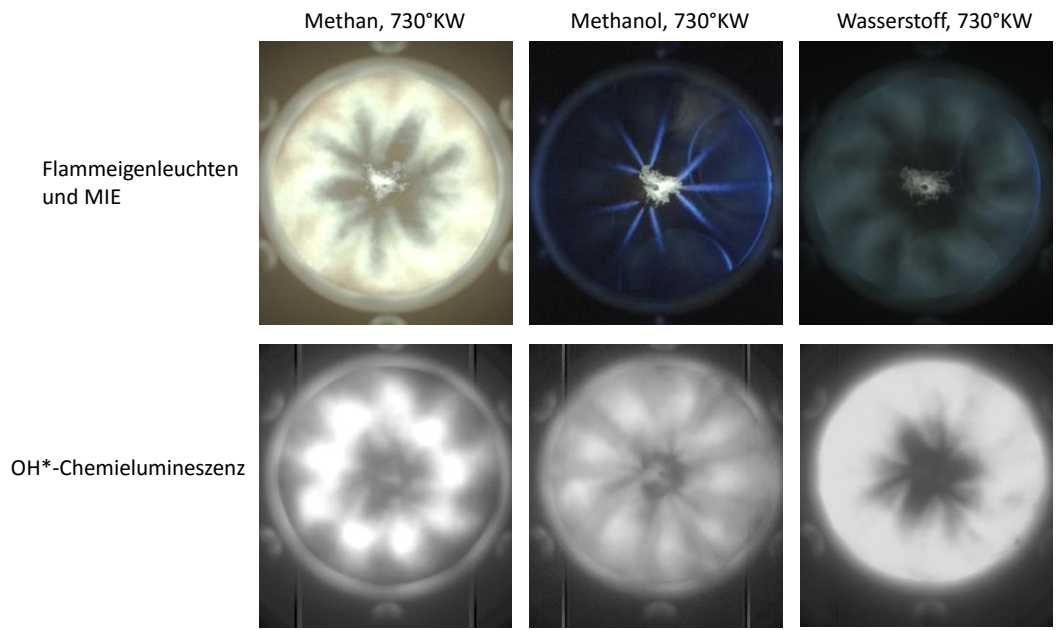


Abbildung 11: Flammeigenleuchten (oben) und OH*-Chemilumineszenz (unten) für Methan, Methanol und Wasserstoff bei 730°KW. Darstellung einer Mittelung von jeweils 25 Arbeitsspielen. Nur im OH*- Bild ist klar zu erkennen, dass in allen drei Fällen die Kraftstoffstrahlen voll entflammt sind.

5. Publikationen

In der ersten Publikation wird der Aufbau des numerischen Modells für Methan-Diesel HPDF vorgestellt (114). In der zweiten Veröffentlichung wird die Fähigkeit des Modells qualitative Vorhersagen zu machen präsentiert und mithilfe des Modells Versuchsergebnisse interpretiert (115). In der letzten Publikation wird das Modell auf die Kraftstoffkombination Wasserstoff-Diesel angepasst und mit Experimenten validiert (116). Aufgrund der guten Ergebnisse, wird daraufhin eine Studie mit einem vielversprechenden, zukunftsfähigen Kraftstoff, Ammoniak, durchgeführt und ausgewertet.

5.1. Modellentwicklung Methan-Diesel HPDF

Die Modellentwicklung wurde in folgender Veröffentlichung vorgestellt:

Frankl, Stephanie; Gleis, Stephan: Development of a 3D-CFD Model for a Full Optical High-Pressure Dual-Fuel Engine. *SAE International Journal of Engines* 13 (2), 2020

In dieser Arbeit wird die Methodik des Simulationsmodells für das Methan-Diesel HPDF Brennverfahren vorgestellt und die Modellierung mit experimentellen Ergebnissen validiert. Verwendet werden die RANS-Gleichungen mit einem $k-\epsilon$ RNG Modell für die Turbulenz, wie in Kapitel 3.2.1 vorgestellt. Die Verbrennung wird mithilfe von Reaktionskinetik berechnet (Kapitel 3.1.3).

Das Modell besteht aus zwei Teilen. Zum einen das Vollmodell, mit dem der Ladungswechsel simuliert wird, zum anderen ein 120° -Sektormodell für die Verbrennungsrechnung, welches die Rotationssymmetrie des Injektors ausnutzt um die Rechenzeit für die aufwändige Modellierung zu reduzieren. Das 120° -Modell wird

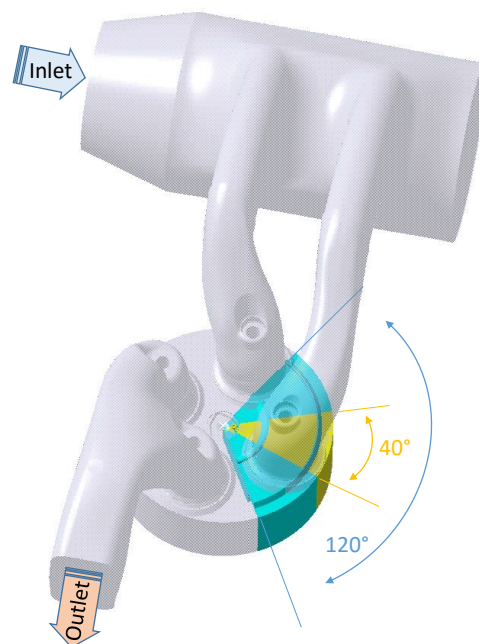


Abbildung 12: Rechengebiete

mit den Strömungsgrößen aus der Ladungswechselsimulation initialisiert. Zusätzlich wird für die Parametrierung der Dieseleinspritzung ein auf 40° reduziertes Sektormodell erstellt, was der Abbildung eines einzelnen Dieselstrahls entspricht (Abbildung 14).

Um den Ladungswechsel des optischen Einzylindermotors korrekt abbilden zu können, muss die Stauchung des verlängerten Optikkolbens in das Modell aufgenommen werden. Mithilfe eines Stauchungsfaktors wird daher die Bewegungsgleichung des Kolbens abhängig vom gemessenen Brennraumdruck modifiziert.

Des Weiteren entstehen durch die optischen Einbauten zusätzliche Spaltvolumina, welche das effektive Verdichtungsverhältnis des Motors verfälschen. Da es nicht praktikabel ist, diese Spalte in die Simulation aufzunehmen, diese aber durch ihre Oberfläche Anteil an der Wärmeübertragung an die Brennraumluft haben, werden die Spalte gesammelt und im Modell mithilfe eines verlängerten Feuerstegvolumens abgebildet. Das verlängerte Feuerstegvolumen findet auch bei den Sektormodellen Anwendung. Die Ergebnisse der Ladungswechselsimulationen werden mit global gemessenen Druckverläufen und lokal aufgelösten Strömungsfeldern aus PIV-Aufnahmen abgeglichen. Simulation und Experiment zeigen hierbei sehr gute Übereinstimmung, wie in Abbildung 13 gezeigt.

Um die flüssige Phase der Dieseleinspritzung mithilfe von Lagrange-Partikeln korrekt darstellen zu können, wird auf dem 40° -Sektormodell eine Netzstudie mit einer Variation der Partikelanzahl für die Flüssigphase durchgeführt (Abbildung 14). Das endgültige Berechnungsnetz besteht aus einer Kombination aus fest vordefinierter und adaptiver Netzverfeinerung mit einer, im Vergleich zu Literaturwerten reduzierten Partikelanzahl, um die Rechenzeit gering zu halten.

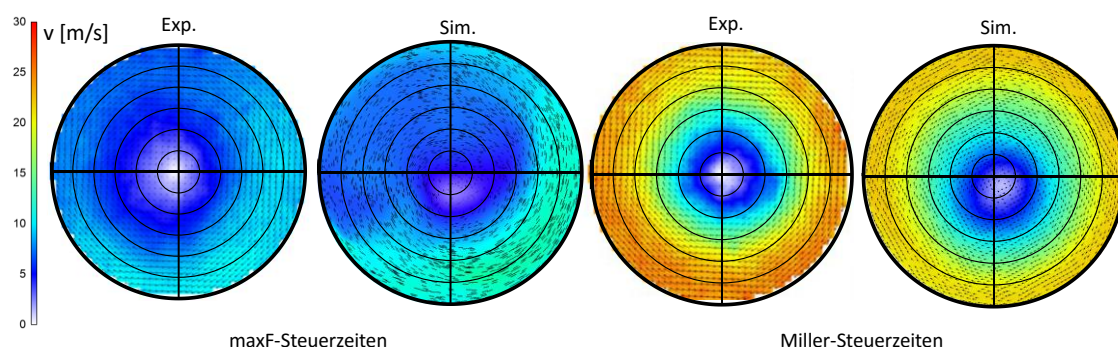


Abbildung 13: Vergleich PIV-Ergebnisse mit Simulationen für zwei unterschiedliche Einlass-Nockenwellen, bei 710°KW 15mm unterhalb des Zylinderkopfes aufgenommen

	Min cell size	Number of parcels
Mesh 1	0.5	128 000
Mesh 2	0.25	512 000
Mesh 3	0.125	2 048 000
Mesh 4	0.0625	8 192 000
Mesh 5	0.0625	2 048 000
Mesh 6	0.0625	64 000

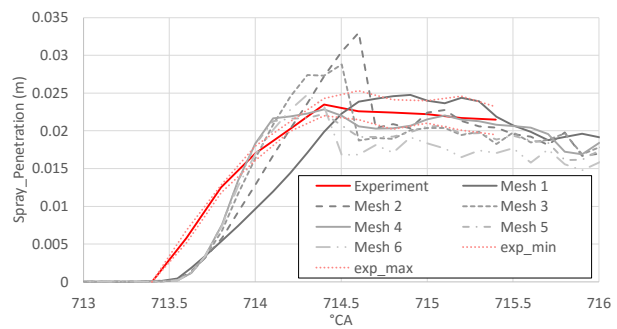


Abbildung 14: Ergebnisse der Netzstudie für die Dieseleinspritzung

Die Entscheidung wird zugunsten von „Mesh 6“ getroffen. Zwar liegt die Strahleindringtiefe in diesem Fall etwas unterhalb des gemessenen Wertes, jedoch kann im Vergleich zu „Mesh 4“ die Rechenzeit durch die geringe Partikelanzahl um einen Faktor 10 reduziert werden. Ein Abgleich mit OH*-Chemilumineszenz-Aufnahmen zeigt außerdem eine gute Übereinstimmung von OH*-Signal im Experiment und OH-Konzentration in der Simulation.

Um die Gaseinbringung zu realisieren, wird der unterste Teil der Düsengeometrie – vom Nadelsitz über das Sackloch bis hin zum Düsenloch - in das Rechengebiet integriert, um eine überkritische Einlass-Randbedingung für das Gas zu vermeiden. Die Gaseinblasung wird mithilfe einer Massenstrom-Randbedingung abgebildet, welche die Öffnungscharakteristik der Düsennadel imitiert.

Die Ergebnisse der Dual-Fuel-Einspritzung zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Hochgeschwindigkeitsaufnahmen des Flammeigenleuchtens (Abbildung 15). Die Orte der Dieselpilotzündung und -verbrennung können in guter Übereinstimmung wiedergegeben werden, wodurch auch die Zündung des Hauptkraftstoffes sowie die weitere Flammenausbreitung sinnvoll abgebildet werden.

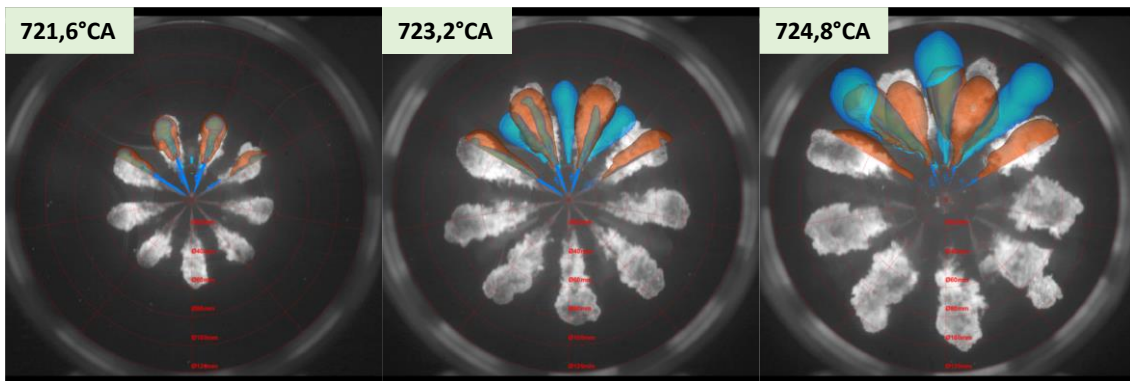


Abbildung 15: Abgleich der Simulation (farbig) mit Aufnahmen des Flammeigenleuchten (monochrom, Hintergrund). Orange Flächen markieren Temperaturbereiche von $T=1500\text{K}$, blaue Bereiche eine Methankonzentration von 2%

Wie in Kapitel 2 gezeigt, ist dies für schnelllaufende Schiffsmotoren dieser Motorgröße eines der ersten Modelle für Hochdruck-Gasdirekteinblasung mit diffusiver Verbrennung, welches mit optischen Messergebnissen validiert wurde.

Individueller Beitrag:

Die Autorin ist verantwortlich für die Erstellung und Validierung des Simulationsmodelles. Die notwendigen Anpassungen und Konstruktionen für den optischen Aufbau des Motors und die Aufnahmen wurden von Stephan Gleis durchgeführt. Der Versuchsplan für die Generierung der verwendeten Validierungsdaten wurde von beiden Autoren gemeinsam erstellt.

5.2. Validierung und Interpretation des HPDF Brennverfahrens

Beim Methan-Diesel HPDF-Verfahren lässt sich der Verlauf der Wärmefreisetzung, wie in Kapitel 2 vorgestellt, in einzelne Abschnitte unterscheiden.

In den meisten Fällen findet die Diesel-Pilotverbrennung vor der Gasverbrennung statt. Wenn die Gasstrahlen auf die heißen Produktgase der Pilotverbrennung treffen, entzünden sich diese. In der Zeit zwischen Start der Gaseinblasung und Auftreffen der Gasstrahlen auf die heißen Produkte, kann ein Teil des Methans mit der Brennraumluft vormischen. Diese vorgemischten Bereiche werden nach der Zündung schlagartig umgesetzt und bilden einen ausgeprägten Premixed Peak. Um dieses Phänomen näher zu untersuchen und die Zündgrenzen zu evaluieren, werden Experimente mit einer Variation des Diesel-Einspritzzeitpunktes durchgeführt.

Im folgenden Konferenzbeitrag werden mithilfe des Simulationsmodells die Ergebnisse der Timing-Variation des Pilotsprays im Details interpretiert und die Fähigkeit des numerischen Modells nachgewiesen, qualitativ richtige Vorhersagen für die Wärmefreisetzung und Brennraumdruckverläufe liefern zu können.

Frankl, Stephanie; Gleis, Stephan; Wachtmeister, Georg: Interpretation of Ignition and Combustion in a Full-Optical High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) Engine using 3D-CFD Methods. CIMAC CONGRESS 19, 29th CIMAC World Congress on Combustion Engine, Meeting the Future of Combustion Engines, Vancouver, BC, CA, Jun 10-14, 2019, 2019

Um die HPDF-Verbrennung zu untersuchen, werden Hochgeschwindigkeitsaufnahmen des Flammeigenleuchtens und der MIE-Streuung der Timingvariation gemacht. Sowohl die Einspritzung von flüssigem Diesel mit 1000 bar, als auch die Einblasung von gasförmigem Methan mit 300 bar Einspritzdruck, inklusive der Zündung und Verbrennung werden im CFD-Modell modelliert und validiert. Das Modell ist in der Lage, Tendenzen in Druckkurven und Wärmefreisetzungsraten vorherzusagen, die absoluten Werte aus den Messungen werden dabei etwas überschätzt (Abbildung 16).

Da das Modell gute Übereinstimmung mit den Experimenten zeigt, wird es im weiteren Verlauf als Interpretationshilfe für die experimentellen Aufnahmen verwendet und die Phänomene der Zündung und Verbrennung näher untersucht.

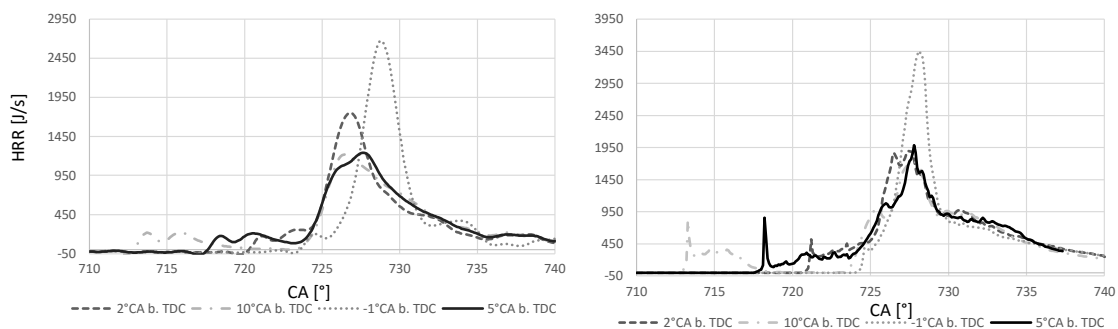
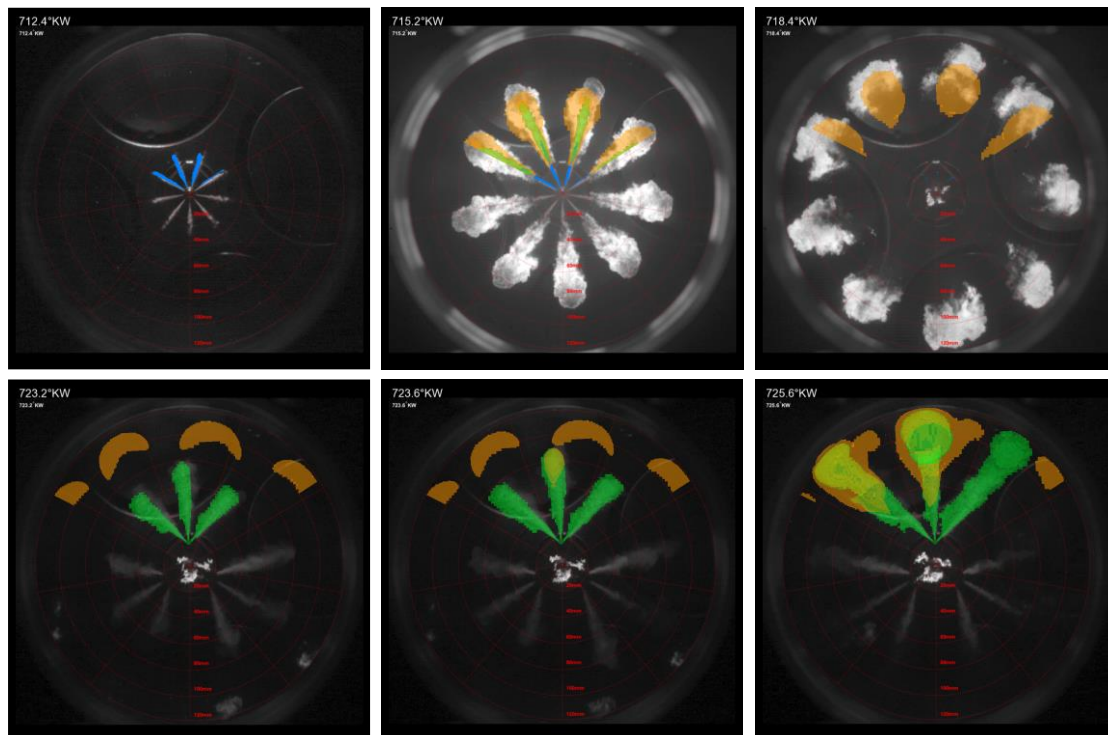


Abbildung 16: Vorhersage der Wärmefreisetzungsrates in Experiment (links) und Simulation (rechts) für verschiedene Pilot-Einspritzzeitpunkte

Für eine überwiegend diffusive Verbrennung, muss der Gasstrahl an der Strahlspitze durch eine frühe Piloteinspritzung gezündet werden, während eine Zündung von den Seiten oder von hinten zu einer unterschiedlich stark ausgeprägten Vormischverbrennung führt. Wenn der Gasstrahl beim Eindringen direkt auf die Verbrennungsprodukte



Blau: Flüssigphase Diesel, Orange: $T=2000K$, Grün: Massenanteil $CH_4=0,02$

Abbildung 17: Variation Diesel $-10^\circ v.OT$, die Gasstrahlen treffen auf die Verbrennungsprodukte der Pilotverbrennung und entzünden daran. Mithilfe der Simulation kann die Position der heißen Verbrennungsprodukte verfolgt werden

des Diesels trifft, breitet sich die Flamme von der Strahlspitze entlang des Strahls aus und hüllt diesen ein (Abbildung 17). Mithilfe der Simulation kann hierbei die Position der heißen Pilotverbrennungs-Produkte verfolgt werden, welche vom Drall im Brennraum vertrieben werden. Sie sind in den experimentellen Aufnahmen zu diesem Zeitpunkt nicht mehr sichtbar.

Je später der Zeitpunkt der Einspritzung des Diesels, desto größer wird der Premixed-Peak in der Wärmefreisetzungsrate, welche die Vormischverbrennung anzeigt. Findet die Zündung des Pilotdiesels gleichzeitig oder nach Beginn der Gaseinblasung statt, so wird der Strahl seitlich oder von hinten gezündet. Die eindringende Strahlspitze mischt währenddessen mit der umgebenden Luft weiter vor. Sobald die vorgemischten Bereiche von der Flamme erfasst werden, werden sie beinahe schlagartig umgesetzt.

Die Experimente zeigen außerdem, dass das Gas, welches sich am Rand der Kolbenmulde sammelt, bei der Verbrennung Ruß bildet. Um die Rußbildung zu verringern, muss die Vermischung der Gasstrahlen mit der Umgebungsluft optimiert werden. Dies kann beispielsweise entweder durch geometrische Modifikationen des Kolbens, erhöhten Gas-Raildruck oder Drallströmung realisiert werden.

Individueller Beitrag:

Die Idee und Konzeption des Papers, sowie der Abgleich von Simulation und Experiment stammen federführend von der Autorin. Die Interpretation der experimentellen Ergebnisse mithilfe der Simulation wurde in Zusammenarbeit mit Stephan Gleis erstellt. Die Auswertungsroutine der rein experimentellen Daten, sowie das Kapitel zum experimentellen Versuchsaufbau stammen von Stephan Gleis.

5.3. Untersuchung von Wasserstoff und Ammoniak als Kraftstoffalternativen

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, ist in Zukunft eine Defossilisierung der Schifffahrt für die Eindämmung des Klimawandels unumgänglich. Daher rücken als Kohlenstofffreie Kraftstoffe der Zukunft Wasserstoff und Ammoniak in den Fokus. Das Wasserstoff-HPDF-Verfahren wurde für die sichere Durchführung der Experimente am Prüfstand mithilfe des CFD-Modells vorausberechnet und mit den Ergebnissen nachträglich bestätigt.

Im folgenden Paper werden Untersuchungen zu Wasserstoff im HPDF-Verfahren numerisch und experimentell vorgestellt. Außerdem wird dem CFD-Modell eine Parameterstudie zu Ammoniak-HPDF durchgeführt und evaluiert.

Frankl, Stephanie; Gleis, Stephan; Karmann, Stephan; Prager, Maximilian; Wachtmeister, Georg: Investigation of ammonia and hydrogen as CO2-free fuels for heavy duty engines using a high pressure dual fuel combustion process. International Journal of Engine Research, 2020

Im ersten Teil dieser Studie wird gezeigt, dass das numerische Modell ohne große Anpassungen in der Lage ist, mit Wasserstoff als Hauptbrennstoff umzugehen. Die Ergebnisse des 120°-Sektormodells werden mit experimentellen Daten validiert und ein Vergleich mit Aufnahmen der OH*-Chemilumineszenz durchgeführt. Aufgrund der Verfügbarkeit eines optimierten Injektors sind nun Einspritzdrücke von 1200 bar auf der Pilotseite und 500 bar auf Seiten des Hauptkraftstoffes möglich. Die Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung von Simulation und Experiment.

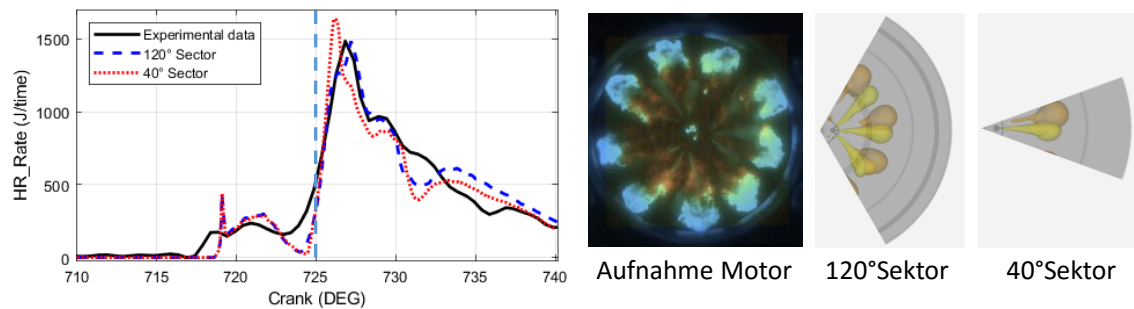


Abbildung 18: Reduktion des Modells von 120° auf 40°-Sektor

Aufgrund der im optimierten Injektor veränderten Strahlanordnung wird untersucht, ob eine Reduzierung des bisherigen 120°-Sektormodells möglich ist, um Rechenzeit einsparen zu können. Aus dem 120°-Modell wird daher ein 40°-Sektormodell abgeleitet. Für den Referenzfall Methan HPDF-Verbrennung wird ein Vergleich zwischen den beiden Sektormodellen und den gemessenen Werten aus dem Experiment gezogen. Wie in Abbildung 18 dargestellt, zeigen diese eine gute Übereinstimmung. Das 40°-Modell wird für den Vergleich von Wasserstoff- und Ammoniak-HPDF, sowie für die Parameterstudie verwendet.

Für die Abbildung der Ammoniak-Verbrennung wird der bisher verwendete Reaktionsmechanismus mit dem GRI-Mech 3.0 Mechanismus erweitert, um die Flammausbreitung im Ammoniakstrahl darstellen zu können. Da Ammoniak in den meisten untersuchten Betriebszuständen in flüssiger Form in den Brennraum eingespritzt wird, entfällt für diesen Fall die Sacklochgeometrie des Injektors im Rechenggebiet. Die Einspritzung von Ammoniak wird analog zu Dieselpiloteinspritzung mithilfe von Lagrangepartikeln modelliert.

Die Ergebnisse der Simulationen zeigen, dass die Wasserstoffflamme sehr nahe am Injektor brennt. Dies könnte, wegen der sehr hohen Flammentemperaturen, Probleme für die langfristige Haltbarkeit des Einspritzsystems verursachen. Wasserstoff brennt fast ausschließlich diffusiv und ist leicht entzündlich. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass sogar noch kleinere Mengen an Pilotdieselmasse für eine Zündung ausreichend wären, was die CO₂-Emissionen des Motors weiter reduzieren würde. Auch in diesem Fall wäre der Injektor das begrenzende Element zur Erzeugung dieser kleinen Einspritzmassen. Derzeit ist eine der Anforderungen an HPDF-Motoren der Vollast-Dieselbetrieb, um unabhängig von der Verfügbarkeit des Hauptkraftstoffes zu sein. Dies begrenzt die minimal möglichen Düsenlochdurchmesser, und damit auch die kleinstmögliche Pilotmenge.

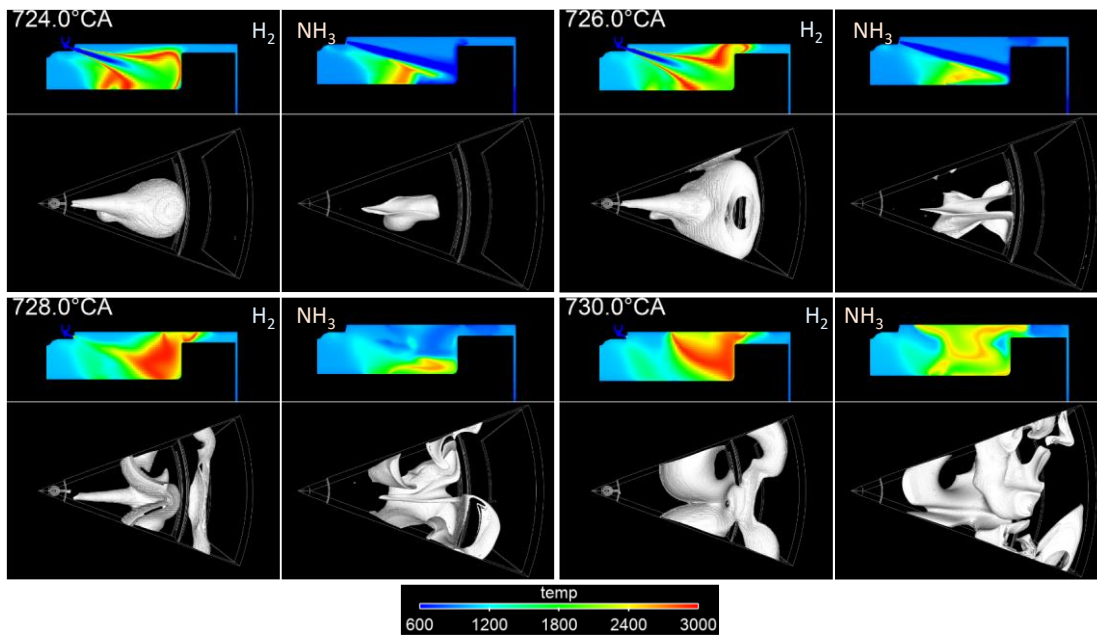


Abbildung 19: Vergleich der Flammenausbreitung bei Wasserstoff- und Ammoniak-Verbrennung. Gezeigt ist jeweils unter dem Temperaturprofil eine Draufsicht der Isofläche von OH bei einem Massenanteil von 0,001

Abbildung 19 zeigt den direkten Vergleich zwischen Wasserstoff und Ammoniakverbrennung. Verglichen mit Ammoniak, breitet sich die Flamme im Wasserstoff deutlich schneller aus als bei Ammoniak; letzterer erreicht fast überwiegend unverbrannt die Kolbenmulde. Während bei Wasserstoff die Verbrennung mit dem Ende der Einblasung endet, zeigt Ammoniak hingegen ein ausgeprägtes Nachbrennen.

Ammoniak benötigt mit 8mJ im Vergleich zu Wasserstoff mit 0,018mJ eine deutlich größere Mindestmenge an Aktivierungsenergie zur Zündung (82). Je geringer die verfügbare Energie im Brennraum, desto später beginnt daher die Wärmefreisetzung. Die durchgeführte Parameterstudie für Ammoniak zeigt, dass sich ein höherer Einspritzdruck und höhere Kraftstofftemperaturen positiv auf die freigesetzte Wärme der Ammoniakverbrennung auswirken. Eine erhöhte Pilotmasse führt zu einer früheren Zündung des Ammoniaks, aber nicht zu einer schnelleren Verbrennung.

Die untersuchten Brennstoffe sind beide für den Einsatz in HPDF-Verbrennungsprozessen geeignet. In ihrer Anwendung zeigen sie allerdings sehr unterschiedliche Herausforderungen. Zukünftig sollten die Abgasemissionen beider Brennstoffe im Detail untersucht werden. Dies ist in dieser Studie wegen des verwendeten Mechanismus im numerischen Modell nicht geschehen. Für den GRI Mech 3.0 ist bekannt, dass er keine korrekte NO_x-Vorhersage für Ammoniak/Luft-Flammen liefert. Er wurde trotzdem verwendet, da er gute Ergebnisse für die Brenngeschwindigkeiten über einen weiten Bereich

von Brennstoff/Luft-Verhältnissen liefert und der Schwerpunkt in dieser Arbeit auf der Zündung und Flammenausbreitung in der Ammoniakflamme liegt.

Individueller Beitrag:

Die Erweiterung des Modells auf den geänderten Versuchsaufbau und alle Simulationen, sowie deren Auswertung und Interpretation wurden von der Autorin durchgeführt. Die optischen Aufnahmen sowie die Auswerterroutinen für die experimentellen Datensätze zu Methan- und Wasserstoff-HPDF stammen von Herrn Gleis. Stephan Karmann hat bei der Erstellung der gemittelten Bilder beigetragen.

6. Diskussion der Ergebnisse

Das in dieser Arbeit entwickelte Modell ist in der Lage, den Ladungswechsel im volloptischen Einzylinder abzubilden und korrekte Strömungsfelder zu erzeugen, welche mit den PIV-Messungen übereinstimmen. Dies wurde für unterschiedliche Drehzahlen und Ventil-Steuerzeiten überprüft. Besondere Herausforderungen stellen hierbei die Vielzahl an engen Spalten durch die optischen Einbauten dar, welche mithilfe eines Ersatzspaltes und geeigneten Temperatur-Randbedingungen abgebildet werden können.

Für eine effiziente Verbrennungsrechnung wird das Motormodell mithilfe von Symmetrie-Randbedingungen auf ein Sektor-Modell reduziert. Hierbei konnte gezeigt werden, dass die Reduktion auf ein 120° Sektormodell gut mit den Experimenten übereinstimmende Lösungen liefert. Eine weitere Reduktion auf ein 40° Sektormodell ist für Optimierungszwecke mit kleineren Abweichungen in der Ergebnisgüte ebenfalls vertretbar und weniger rechenintensiv.

Obwohl das Modell für die Kraftstoffkombination Methan-Diesel entwickelt wurde, liefert es auch für die Kraftstoff Kombination Wasserstoff-Diesel gute Ergebnisse. Für den vielversprechenden kohlenstofffreien Kraftstoff Ammoniak wurde mit dem Modell eine Studie zur Zündung und Verbrennung durchgeführt, welche das Potential von Ammoniak als regenerativem Kraftstoff im HPDF-Brennverfahren aufzeigt.

Die Stärken des Modells sind:

- Modellierung von komplexen Zündvorgängen
- Qualitativ korrekte Vorhersage von Wärmefreisetzungsraten
- Unterstützung bei der Interpretation von experimentellen Ergebnissen
- Beliebige Kraftstoffkombinationen und -zusammensetzungen können untersucht werden
- Werkzeug zur Bildung von Verständnis von Vorgängen bei der HPDF-Verbrennung

Schwächen des Modells sind:

- Die Vorhersage von absoluten Emissionswerten ist aktuell nicht möglich

- Es sind Unsicherheiten vorhanden, da die korrekten Kraftstoffmassen der Hauptkraftstoffe für Validierungen nicht bekannt sind; die exakte Bestimmung der Massen wird zusätzlich durch Leckage aus Injektor-Sperröl erschwert.
- Das Modell ist rechenintensiv
- Mischungsbildung ist nur korrekt bei entsprechend hoher Netzauflösung

Weiterentwicklungen des Modells sollten beinhalten:

- Fokus auf Emissionsbildung für quantitative Vorhersagen
- Optimierung der Rechenzeit für effiziente Anwendung

Da zu erwarten ist, dass die Performance der CFD-Codes und die Rechenleistung weiter ansteigen werden, sollten zukünftige Arbeiten auch die Verwendung von Large Eddy Simulation (LES) anstelle von RANS für die Simulation in Erwägung ziehen, um noch detailliertere Aussagen über den Einfluss von Grobstrukturturbulenz auf die Verbrennung beurteilen zu können.

6.1. Abgrenzung zu ähnlichen Arbeiten

Die größten Überschneidungen dieser Arbeit finden sich mit der Dissertation von Jud (44), da hier über drei Jahre hinweg in enger Zusammenarbeit ein Forschungsprojekt bearbeitet wurde. Gegenüber den Arbeiten von Jud, der sich mit dem Brennverfahren an einem Einhub-Triebwerk beschäftigt hat, erweitert diese Arbeit den Anwendungsbereich des Modells für den motorischen Betrieb, höhere Einblasedrücke bis 500bar und zusätzliche Kraftstoff-Kombinationen.

Huang et al. zeigen in einer Machbarkeitsstudie eine LES einer Pilot-gezündeten diffusiven Gasverbrennung in einem Nutzfahrzeug-Motor und gleichen diese ebenfalls mit Messdaten ab. Die Ergebnisse zeigen sehr gute Übereinstimmung mit den Messdaten, aber die hohen Kosten für die LES verhindern eine Anwendung des Modells als Optimierungstool (117). Mit den in dieser Arbeit gewählten RANS Simulationen sind die Abweichungen von den Messwerten zwar vor allem in Bezug auf die Abbildung des unterexpandierten Gasstrahls im Düsenbereich größer, allerdings sind die Kosten für die Simulationen deutlich geringer.

Verglichen mit der Arbeit von Hatzipanagioutou (26), der sich mit Motoren aus dem Nutzfahrzeugsegment beschäftigt, handelt diese Arbeit von schnelllaufenden Marinemotoren. Eine Abgrenzung ist durch die Modellierung der Verbrennung gegeben. Hatzipanagioutou arbeitet mit einem 8-Spezies PDF-Timescale Modell, während in dieser Arbeit detaillierte Reaktionskinetik angewendet wird. Des Weiteren beschränkt sich Hatzipanagioutou nur auf die Kraftstoff-Kombination Erdgas-Diesel.

Neue Ergebnisse liefert diese Arbeit bezüglich der Simulation von Wasserstoff und Ammoniak-HPDF in einer großmotorischen Anwendung.

6.2. Alternativen zum HPDF-Brennverfahren

Eine Schwäche von Dual-Fuel Brennverfahren ist die Notwendigkeit des Zündöls, da diese zu einer Abhängigkeit von einem zweiten Kraftstoff führt. Es gibt verschiedene Ansätze, die klassischen Dual-Fuel Kraftstoffe ohne ein Zündöl in diffusiver Flamme zu verbrennen. Bei Kammel beispielsweise wird versucht, die mit Hochdruck eingeblasenen Gasstrahlen mithilfe von Fackelstrahlen zu entzünden. Hierfür wird eine ringförmige Vorkammer in den Injektor integriert. Das mit Niederdruck in die Vorkammer eingebrachte Gas wird mithilfe einer Zündkerze gezündet. (118)

Ein weiteres Konzept ist eine sogenannte „Hotspot-Zündung“. Pan verwendet ein „Zündschild“, auf welches einer der Gasstrahlen aufprallt, um sich dann an der heißen Oberfläche zu entzünden. Die Flamme des gezündeten Gasstrahls breitet sich anschließend auf die Nachbarstrahlen aus. (119)

Lee et al. hingegen verfolgen den Ansatz, durch Aufheizen der Ansaugluft des Motors bis auf Temperaturen von 420 °C (693 K) und einem Verdichtungsverhältnis von 15.5, eine Selbstzündung von Erdgas mit Diffusionsverbrennung zu erreichen. Die Verbrennung läuft jedoch überwiegend teil-vorgemischt und mit hoher Ruß- und Stickoxidproduktion ab (120). Einen ähnlichen Ansatz verfolgten Rottengruber et. al mit Wasserstoff, wobei für die Wasserstoff-Selbstzündung weitaus weniger hohe Ansaugluft-Temperaturen benötigt werden (121).

Abschließend bleibt zu sagen, dass das HPDF-Brennverfahren eine Brückentechnologie sein kann für die Dekarbonisierung der Schifffahrt. Durch die Retrofit-Möglichkeit können bestehende Motoren umgerüstet werden. Mittelfristig ist die Anwendung von LNG als

Kraftstoff sinnvoll. Sollte sich eine flächendeckende Verfügbarkeit von dekarbonisierten Kraftstoffen wie Wasserstoff und Ammoniak abzeichnen, so können HPDF- Motoren unkompliziert damit betrieben werden.

Das in dieser Arbeit entwickelte Simulationsmodell kann verwendet werden, um die Anforderungen verschiedener alternativer Kraftstoffe zu evaluieren und ihre Anwendung im Motor auszulegen – damit die Hafenschlepper auch in Zukunft ihr Ballett zum musikalischen Klang ihrer Antriebe tanzen können.

7. Literaturverzeichnis

1. International Maritime Organization. MARPOL: Consolidated edition, 2011 ; articles, protocols, annexes and unified interpretations of the International Convention for the Prevention of Pollution from Ships, 1973, as modified by the 1978 and 1997 protocols. 5th. ed. London: International Maritime Organization; 2011. (IMO Publication).
2. Adoption of the Initial IMO Strategy on Reduction of GHG Emissions from Ships and Existing IMO Activity Related to Reducing GHG Emissions in the Shipping Sector: MEPC.304(72); 2018. (vol 2018). Available from: URL: https://unfccc.int/sites/default/files/resource/250_IMO%20submission_Talanoa%20Dialogue_April%202018.pdf.
3. Pavlenko N, Comer B, Zhou Y, Clark N, Rutherford D. The climate implications of using LNG as a marine fuel; Working Paper 2020-02; 2020 Jan 28.
4. Karim GA. Dual-Fuel Diesel Engines. Hoboken: Taylor and Francis; 2015.
5. Barba C, Dyckmans J, Förster J, Schnekenburger T. Natural gas-Diesel dual fuel for commercial vehicle engines. In: Internationaler Motorenkongress 2017. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden; 2017. p. 391–407.
6. Boog M, Dumser F, Berger I, Fink G, Jud M, Gleis S et al. Entwicklung eines High Pressure Dual-Fuel-Konzepts für schnelllaufende drehzahlvariable Motoren in Schiffsantrieben. In: 11. Dessauer Gasmotorenkonferenz.
7. Troberg M, Delneri D. Roadmap zur Erfüllung der Tier-III-Abgasnorm für Schiffsmotoren. MTZ Motortech Z 2010; (06/2010):394–401.
8. Stephan Gleis. Optische Untersuchung eines diffusiven Dual-Fuel Brennverfahrens für Erdgas sowie alternative Kraftstoffe mit niedriger Zündwilligkeit (vorläufig) [Dissertation]. München: Technische Universität München; 2021.
9. Weber S, Stegmann R, Prager M, Wachtmeister G. The Effect of Inlet Valve Timing and Engine Speed on Dual Fuel NG-Diesel Combustion in a Large Bore Engine. SAE Int. J. Engines 2018; 11(2):229–46.
10. Intergovernmental Panel on Climate Change. Climate Change and Land: An IPCC Special Report on climate change, desertification, land degradation, sustainable land management, food security, and greenhouse gas fluxes in terrestrial ecosystems [Summary for Policymakers]; 2020.

11. Kamieniak J, Kelly PJ, Banks CE, Doyle AM. Methane emission management in a dual-fuel engine exhaust using Pd and Ni hydroxyapatite catalysts. *Fuel* 2017; 208:314–20.
12. Jones HL, McTaggart-Cowan GP, Rogak SN, Bushe WK, Munshi SR, Buchholz BA. Source Apportionment of Particulate Matter from a Diesel Pilot-Ignited Natural Gas Fuelled Heavy Duty DI Engine 2005.
13. Härtl M, Gaukel K, Pélerin D, Wachtmeister G, Jacob E, Härtl M et al. Oxymethylenether als potenziell CO₂-neutraler Kraftstoff für saubere Dieselmotoren Teil 1. *Motortech Z* 2017; 78(2):52–9.
14. Senghaas C, Willmann M, Berger I. New Injector Family for High Pressure Gas and Low Caloric Liquid Fuels. In: 29th CIMAC Congress Vancouver 2019.
15. Senghaas C, Willmann M, Berger I. Flexibler Hochdruck-Zweistoff-Injektor für zukünftige Kraftstoffe. *MTZ Motortech Z* 2020; 81(11):58–63.
16. Liu H, Li J, Wang J, Wu C, Liu B, Dong J et al. Effects of injection strategies on low-speed marine engines using the dual fuel of high-pressure direct-injection natural gas and diesel. *Energy Sci Eng* 2019; 7(5):1994–2010.
17. Fink G, Jud M, Sattelmayer T. Influence of the Spatial and Temporal Interaction Between Diesel Pilot and Directly Injected Natural Gas Jet on Ignition and Combustion Characteristics. *J. Eng. Gas Turbines Power* 2018; 140(10):102811.
18. Faghani E, Kheirkhah P, Mabson CWJ, McTaggart-Cowan G, Kirchen P, Rogak S. Effect of Injection Strategies on Emissions from a Pilot-Ignited Direct-Injection Natural-Gas Engine- Part I: Late Post Injection. *SAE Technical Paper* 2017; 2017.
19. Faghani E, Kheirkhah P, Mabson CWJ, McTaggart-Cowan G, Kirchen P, Rogak S. Effect of Injection Strategies on Emissions from a Pilot-Ignited Direct-Injection Natural-Gas Engine- Part II: Slightly Premixed Combustion. *SAE Technical Paper* 2017; 2017.
20. Jud M, Fink G, Sattelmayer T. Predicting Ignition and Combustion of a Pilot Ignited Natural Gas Jet Using Numerical Simulation Based on Detailed Chemistry. *Proceedings of the ASME 2017 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference* 2017; 2017.
21. Liu J, Ma B, Yu R, Guo Q. Optimization of the direct injection natural gas engine under different combustion modes. *Fuel* 2020; 272:117699.

22. Fink G, Jud M, Sattelmayer T. Fundamental Study of Diesel-Piloted Natural Gas Direct Injection Under Different Operating Conditions. *J. Eng. Gas Turbines Power* 2019; 141(9):91006.
23. Dong Y, Kaario O, Hassan G, Ranta O, Larmi M, Johansson B. High-pressure direct injection of methanol and pilot diesel: A non-premixed dual-fuel engine concept. *Fuel* 2020; 277:117932.
24. Jud M, Wieland C, Fink G, Sattelmayer T. Numerical Analysis of the Combustion Process in Dual-Fuel Engines With Direct Injection of Natural Gas. *Proceedings of the ASME 2018 Internal Combustion Fall Technical Conference* 2018.
25. Imhof D, Tsuru D, Tajima H, Takasaki K. High-pressure natural gas injection (GI) marine engine research with a Rapid Compression Expansion Machine. In: 13. CIMAC Shanghai.
26. Hatzipanagiotou A. 3D-CFD-Simulation der Gemischbildung, Verbrennung und Emissionsentstehung eines Hochdruck-Gas-Diesel-Brennverfahrens [Dissertation]. Karlsruhe: Karlsruher Institut für Technologie; 2018.
27. Ishibashi R, Tsuru D. An optical investigation of combustion process of a direct high-pressure injection of natural gas. *J Mar Sci Technol* 2017; 22(3):447–58.
28. Tremel A, Wasserscheid P, Baldauf M, Hammer T. Techno-economic analysis for the synthesis of liquid and gaseous fuels based on hydrogen production via electrolysis. *International Journal of Hydrogen Energy* 2015; 40(35):11457–64.
29. Schiebahn S, Grube T, Robinius M, Tietze V, Kumar B, Stolten D. Power to gas: Technological overview, systems analysis and economic assessment for a case study in Germany. *International Journal of Hydrogen Energy* 2015; 40(12):4285–94.
30. Held M, Tönges Y, Pélerin D, Härtl M, Wachtmeister G, Burger J. On the energetic efficiency of producing polyoxymethylene dimethyl ethers from CO₂ using electrical energy. *Energy Environ. Sci.* 2019; 12(3):1019–34.
31. Oullette P. Direct Injection of Natural Gas for Diesel Engine Fueling: A Thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy [Dissertation]. Vancouver, Canada: University of British Columbia; 1996.
32. Westport. HPDI 2.0 Injector; 2017 [cited 2017 Dec 13]. Available from: URL: <http://www.westport.com/is/core-technologies/hpdi-2#what-is-hpdi-2.0>.

33. Hill PG, Ouellette P. Transient Turbulent Gaseous Fuel Jets for Diesel Engines. *J. Fluids Eng.* 1999; 121(1):93.
34. Yu J, Vuorinen V, Kaario O, Sarjovaara T, Larmi M. Visualization and analysis of the characteristics of transitional underexpanded jets. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 2013; 44:140–54.
35. Keskinen K, Kaario O, Nuutinen M, Vuorinen V, Künsch Z, Liavåg LO et al. Mixture formation in a direct injection gas engine: Numerical study on nozzle type, injection pressure and injection timing effects. *Energy* 2016; 94:542–56.
36. Hamzehloo A, Aleiferis PG. Numerical modelling of transient under-expanded jets under different ambient thermodynamic conditions with adaptive mesh refinement. *International Journal of Heat and Fluid Flow* 2016; 61:711–29.
37. Banholzer M, Vera-Tudela W, Traxinger C, Pfitzner M, Wright Y, Boulouchos K. Numerical investigation of the flow characteristics of underexpanded methane jets. *Physics of Fluids* 2019; 31(5):56105.
38. Sakellarakis VD, Vera-Tudela W, Doll U, Ebi D, Wright YM, Boulouchos K. The effect of high-pressure injection variations on the mixing state of underexpanded methane jets. *International Journal of Engine Research* 2020; 25(1):146808742096089.
39. McTaggart-Cowan GP, Jones HL, Rogak SN, Bushe WK, Hill PG, Munshi SR. The Effects of High-Pressure Injection on a Compression–Ignition, Direct Injection of Natural Gas Engine. *J. Eng. Gas Turbines Power* 2007; 129(2):579.
40. Takasaki K, Tsuru D, Ueno R, Asano S, Shota Kikunaga, Ryo Sasaki, Junichi Hirata, Stefan Mayer. Visual study on GI (Gas high-pressure Injection) combustion for highly efficient gas engine. In: 15th Conference "The Working Process of the Internal Combustion Engine. p. 403–15.
41. Imhof D. Visual Combustion Studies for environmentally friendly marine diesel and gas engines [Dissertation]. Kyushu: Kyushu University, Japan; 2013.
42. McTaggart-Cowan GP, Mann K, Huang J, Wu N, Munshi SR. Particulate Matter Reduction From a Pilot-Ignited, Direct Injection of Natural Gas Engine. *Proceedings of the ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference* 2012; 2012:427.
43. Fink G, Jud M, Sattelmayer T. Influence of the Spatial and Temporal Interaction Between Diesel Pilot and Directly Injected Natural Gas Jet on Ignition and Combustion Characteristics:V001T03A004.

44. Jud M. Numerische Simulation der Zündung und Verbrennung von mit Diesel pilotierten Erdgasstrahlen [Dissertation]. München: Technische Universität München; 2019.
45. Hatzipanagiotou A, Wenzel P, Krueger C, Payri R, Garcia-Oliver JM, Vera-Tudela W et al. Soot Model Calibration Based on Laser Extinction Measurements.
46. Khosravi M, Kirchen P. Refinement of the two-color pyrometry method for application in a direct injection diesel and natural gas compression-ignition engine. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering 2019.
47. Khosravi M, McTaggart-Cowan G, Kirchen P. Pyrometric imaging of soot processes in a pilot ignited direct injected natural gas engine. International Journal of Engine Research 2020; (I-19).
48. Rochussen J, McTaggart-Cowan G, Kirchen P. Parametric study of pilot-ignited direct-injection natural gas combustion in an optically accessible heavy-duty engine. International Journal of Engine Research 2019; 121:146808741983687.
49. Dawood F, Anda M, Shafiullah GM. Hydrogen production for energy: An overview. International Journal of Hydrogen Energy 2020; 45(7):3847–69.
50. Jørg Aarnes, Marcel Eijgelaar, Erik A. Hektor. Hydrogen as an Energy Carrier: An evaluation of emerging hydrogen value chains. Hovik Norway; 11/2018 [cited 2020 Feb 20]. Available from: URL: <https://www.dnvgl.com/oilgas/download/thank-you/download-hydrogen-as-an-energy-noindex.html>.
51. Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi). Die Nationale Wasserstoffstrategie; 2020 [cited 2020 Nov 20]. Available from: URL: <https://www.bmbf.de/de/nationale-wasserstoffstrategie-9916.html>.
52. Fouquet MCT. Niedrigstmissionskonzept für einen wasserstoffbetriebenen Verbrennungsmotor. München: Technische Universität München; 2012.
53. Schultze M, Drexel C, Kollias-Pityrigkas G. Experimentelle und numerische Untersuchung von stark wasserstoffhaltigen Brenngasen in Gasgroßmotoren. In: 10. Desauer Gasmotoren-Konferenz. p. 307–18.
54. Herdin G, Gruber F, Klausner J, Robitschko R, Chvatal D. Hydrogen and Hydrogen Mixtures as Fuel in Stationary Gas Engines. SAE Technical Paper Series 2007.

55. Yip HL, Srna A, Yuen ACY, Kook S, Taylor RA, Yeoh GH et al. A Review of Hydrogen Direct Injection for Internal Combustion Engines: Towards Carbon-Free Combustion. *Applied Sciences* 2019; 9(22):4842.
56. Owston R, Magi V, Abraham J. Fuel-Air Mixing Characteristics of DI Hydrogen Jets. *SAE Int. J. Engines* 2009; 1(1):693–712.
57. Kawanabe H, Matsui Y, Kato A, Shioji M. Study on the Flame Propagation Process in an Ignited Hydrogen Jet.
58. Mansor MRA, Shioji M. Investigation of the combustion process of hydrogen jets under argon-circulated hydrogen-engine conditions. *Combustion and Flame* 2016; 173:245–57.
59. Rogers T, Petersen P, Koopmans L, Lappas P, Boretti A. Structural characteristics of hydrogen and compressed natural gas fuel jets. *International Journal of Hydrogen Energy* 2015; 40(3):1584–97.
60. McTaggart-Cowan GP, Rogak SN, Munshi SR, Hill PG, Bushe WK. Combustion in a heavy-duty direct-injection engine using hydrogen—methane blend fuels. *International Journal of Engine Research* 2009; 10(1):1–13.
61. Li M, Zhang Q, Li G, Li P. Effects of Hydrogen Addition on the Performance of a Pilot-Ignition Direct-Injection Natural Gas Engine: A Numerical Study. *Energy Fuels* 2017; 31(4):4407–23.
62. Gleis S, Frankl S, Prager M, Wachtmeister G. Optical analysis of the combustion of potential future E-Fuels with a high pressure dual fuel injection system. In: 14th International AVL Symposium on Propulsion Diagnostics.
63. Liu X, Srna A, Yip HL, Kook S, Chan QN, Hawkes ER. Performance and emissions of hydrogen-diesel dual direct injection (H₂DDI) in a single-cylinder compression-ignition engine. *International Journal of Hydrogen Energy* 2020.
64. Munshi SR, Garner G, Theissel H, Raser B. Total Cost of Ownership (TCO) Analysis for Heavy Duty Hydrogen Fueled Powertrains. Westport Fuel Systems; AVL List GmbH; 2021 Feb 25.
65. Dimitriou P, Tsujimura T. A review of hydrogen as a compression ignition engine fuel. *International Journal of Hydrogen Energy* 2017; 42(38):24470–86.

66. Thomas G, Parks G. Potential Roles of Ammonia in a Hydrogen Economy: A Study of Issues Related to the Use Ammonia for On-Board Vehicular Hydrogen Storage 2006.
67. Giddey S, Badwal SPS, Munnings C, Dolan M. Ammonia as a Renewable Energy Transportation Media. ACS Sustainable Chem. Eng. 2017; 5(11):10231–9.
68. Lamb KE, Dolan MD, Kennedy DF. Ammonia for hydrogen storage; A review of catalytic ammonia decomposition and hydrogen separation and purification. International Journal of Hydrogen Energy 2019; 44(7):3580–93.
69. Nielsen A, Aika K-i, editors. Ammonia: Catalysis and manufacture ; with 23 tables. Berlin: Springer; 1995. Available from: URL: <http://www.loc.gov/catdir/enhancements/fy1305/94036677-d.html>.
70. NIST Chemistry WebBook, SRD 69; 2018.
71. Lan R, Irvine JTS, Tao S. Ammonia and related chemicals as potential indirect hydrogen storage materials. International Journal of Hydrogen Energy 2012; 37(2):1482–94.
72. Armijo J, Philibert C. Flexible production of green hydrogen and ammonia from variable solar and wind energy: Case study of Chile and Argentina. International Journal of Hydrogen Energy 2020; 45(3):1541–58.
73. Frankl SG, Gelner AD, Gleis S, Härtl M, Wachtmeister G. Numerical Study on Renewable and Sustainable Fuels for HPDF Engines. In: Proceedings of the POWER 2020 Conference.
74. Kobayashi H, Hayakawa A, Somarathne KKAD, Okafor EC. Science and technology of ammonia combustion. Proceedings of the Combustion Institute 2019; 37(1):109–33.
75. Xia Y, Hashimoto G, Hadi K, Hashimoto N, Hayakawa A, Kobayashi H et al. Turbulent burning velocity of ammonia/oxygen/nitrogen premixed flame in O₂-enriched air condition. Fuel 2020; 268:117383.
76. Otomo J, Koshi M, Mitsumori T, Iwasaki H, Yamada K. Chemical kinetic modeling of ammonia oxidation with improved reaction mechanism for ammonia/air and ammonia/hydrogen/air combustion. International Journal of Hydrogen Energy 2018; 43(5):3004–14.

77. Han X, Wang Z, He Y, Liu Y, Zhu Y, Konnov AA. The temperature dependence of the laminar burning velocity and superadiabatic flame temperature phenomenon for NH₃/air flames. *Combustion and Flame* 2020; 217:314–20.
78. Li J, Huang H, Kobayashi N, He Z, Osaka Y, Zeng T. Numerical study on effect of oxygen content in combustion air on ammonia combustion. *Energy* 2015; 93:2053–68.
79. Wang S, Wang Z, Elbaz AM, Han X, He Y, Costa M et al. Experimental study and kinetic analysis of the laminar burning velocity of NH₃/syngas/air, NH₃/CO/air and NH₃/H₂/air premixed flames at elevated pressures. *Combustion and Flame* 2020; 221:270–87.
80. Kroch E. Ammonia - A fuel for motor buses. *Journal of the Institute of Petroleum* 1945; (31):213–23.
81. Pearsall TJ, Garabedian CG. Combustion of Anhydrous Ammonia in Diesel Engines.
82. Frigo S, Gentili R. Analysis of the behaviour of a 4-stroke Si engine fuelled with ammonia and hydrogen. *International Journal of Hydrogen Energy* 2013; 38(3):1607–15.
83. Reiter AJ, Kong S-C. Combustion and emissions characteristics of compression-ignition engine using dual ammonia-diesel fuel. *Fuel* 2011; 90(1):87–97.
84. Kim K, Roh G, Kim W, Chun K. A Preliminary Study on an Alternative Ship Propulsion System Fueled by Ammonia: Environmental and Economic Assessments. *JMSE* 2020; 8(3):183.
85. Linde Gas GmbH. Sicherheitsdatenblatt Ammoniak, wasserfrei; 2013 [cited 2020 Sep 17]. Available from: URL: https://produkte.linde-gas.at/sdb_konform/NH3_10021772DE.pdf.
86. Ferziger JH, Perić M. *Numerische Strömungsmechanik*. Berlin: Springer; 2008.
87. REDLICH O, KWONG JNS. On the thermodynamics of solutions; an equation of state; fugacities of gaseous solutions. *Chem Rev* 1949; 44(1):233–44.
88. Gordon S, McBride B. Computer Program for Calculation of Complex Chemical Equilibrium Compositions and Applications. Available from: URL: <https://www.grc.nasa.gov/www/CEAWeb/RP-1311.pdf>.
89. Seider T. CFD-Simulation eines Dual-Fuel Verbrennungsmotors [Masterarbeit]. München: Technische Universität München; 2016.

90. Colin O, Benkenida A. The 3-Zones Extended Coherent Flame Model (Ecfm3z) for Computing Premixed/Diffusion Combustion. *Oil & Gas Science and Technology - Rev. IFP* 2004; 59(6):593–609.
91. Merker G, Christian Schwarz, Gunnar Stiesch, Frank Otto, editors. *Verbrennungsmotoren: Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung*. Wiesbaden: Springer Fachmedien; 2007.
92. Gerlinger P. *Numerische Verbrennungssimulation*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2005.
93. Turns SR. *An introduction to combustion: Concepts and applications*. 3. ed., internat. ed. Boston: McGraw-Hill; 2012.
94. Hiroyasu H, Arai M. Structures of Fuel Sprays in Diesel Engines. *SAE Transactions Journal of Engines-V99-3* 1990.
95. Zeng P, Sarholz S, Iwainsky C, Binninger B, Peters N, Herrmann M. Simulation of Primary Breakup for Diesel Spray with Phase Transition. *Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface* 2009; 5759:313–20.
96. Blessing M. *Untersuchung und Charakterisierung von Zerstäubung, Strahlausbreitung und Gemischbildung aktueller Dieseldirekteinspritzsysteme*; 2004.
97. Pomraning E. *Development of Large Eddy Simulation Turbulence Models [Dissertation]*. Madison: University of Wisconsin; 2000.
98. Launder BE, Sharma BI. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Letters in Heat and Mass Transfer* 1974; 1(2):131–7.
99. Wang F, Reitz RD, Pera C, Wang Z, Wang J. Application of Generalized RNG Turbulence Model to Flow in Motored Single-Cylinder PFI Engine. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics* 2013; 7(4):486–95.
100. Wang B-L, Miles PC, Reitz RD, Han Z, Petersen B. Assessment of RNG Turbulence Modeling and the Development of a Generalized RNG Closure Model.
101. CONVERGE. Version 2.4. Convergent Science; 2018. Available from: URL: <https://convergecf.com/>.
102. Warnatz J, Maas U, Dibble RW. *Verbrennung*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg; 2001.

103. Som S, Aggarwal SK. Effects of primary breakup modeling on spray and combustion characteristics of compression ignition engines. *Combustion and Flame* 2010; 157(6):1179–93.
104. Senecal PK, Pomraning E, Richards KJ, Som S. Grid-Convergent Spray Models for Internal Combustion Engine CFD Simulations. *ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference 2012*; 2012:697.
105. Issa RI. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics* 1986; 62(1):40–65.
106. Senecal PK, Pomraning E, Richards KJ, Briggs TE, Choi CY, Mcdavid RM et al. Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length and Flame Lift-off Length using CFD and Parallel Detailed Chemistry. *SAE Technical Paper Series* 2003; 2003(2003-01).
107. Korb B, Prager M, Wachtmeister G. Ursachen und Reduzierung der CH₄-Emissionen in Biogasmotoren; Teilvorhaben 1: Abschlussbericht zum Forschungsprojekt. Technische Universität München; Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen; 2016 Jan 31.
108. Gleis S, Frankl S, Wachtmeister G. Flexible direkteinspritzende Motoren für die Schifffahrt : Abschlussbericht : Vorhaben: FlexDi-LVK : Laufzeit: 01.01.2015 - 30.06.2018; 2018.
109. Gleis S, Frankl S, Waligorski D, Prager M, Wachtmeister G, Prager D-IM et al. Investigation of the High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) combustion process of natural gas on a fully optically accessible research engine; *SAE Technical Paper*; 2019 // Investigation of the High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) combustion process of natural gas on a fully optically accessible research engine. *SAE Technical Paper* 2019.
110. Raffel M, Willert CE, Wereley ST, Kompenhans J. *Particle Image Velocimetry: A Practical Guide*. Dordrecht: Springer; 2007. (Experimental Fluid Mechanics).
111. Lauer MRW. Determination of the heat release distribution in turbulent flames by chemiluminescence imaging [Zugl.: München, Techn. Univ., Diss., 2011]. 1. Aufl. München: München; Verl. Dr. Hut; 2011. (Energietechnik).
112. Lauer M, Sattelmayer T. On the Adequacy of Chemiluminescence as a Measure for Heat Release in Turbulent Flames With Mixture Gradients:535–44.

113. Srna A, Bombach R, Herrmann K, Bruneaux G. Characterization of the spectral signature of dual-fuel combustion luminosity: Implications for evaluation of natural luminosity imaging. *Appl. Phys. B* 2019; 125(7):1174.
114. Frankl S, Gleis S. Development of a 3D-CFD Model for a Full Optical High-Pressure Dual-Fuel Engine. *SAE Int. J. Engines* 2020; 13(2):2020.
115. Frankl S, Gleis S, Wachtmeister G. Interpretation of Ignition and Combustion in a Full-Optical High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) Engine using 3D-CFD Methods. In: 29th CIMAC Congress Vancouver 2019.
116. Frankl S, Gleis S, Karmann S, Prager M, Wachtmeister G. Investigation of ammonia and hydrogen as CO₂-free fuels for heavy duty engines using a high pressure dual fuel combustion process. *International Journal of Engine Research* 2020; 31:146808742096787.
117. Huang J, McTaggart-Cowan G, Munshi S. Large-eddy simulation of direct injection natural gas combustion in a heavy-duty truck engine using modified conditional moment closure model with low-dimensional manifold method. *International Journal of Engine Research* 2018:146808741878285.
118. Kammel G, Mair F, Zelenka J, Lackner M, Wimmer A, Kogler G et al. Simulation Based Predesign and Experimental Validation of a Prechamber Ignited HPDI Gas Combustion Concept. *SAE Technical Paper* 2019.
119. Pan K, Wallace JS. Numerical studies of the ignition characteristics of a high-pressure gas jet in compression-ignition engines with glow plug ignition assist: Part 1—Operating condition study. *International Journal of Engine Research* 2017; 18(10):1035–54.
120. Lee TK, Park H, Hyun J, Lee C, Song HH. Applicability of high-pressure direct-injected methane jet for a pure compression-ignition engine operation. *Fuel* 2019; 251:428–37.
121. Rottengruber H, Wiebicke U, Woschni G, Zeilinger K. Wasserstoff-Dieselmotor mit Direkteinspritzung, hoher Leistungsdichte und geringer Abgasemission: Teil 3: Versuche und Berechnungen am Motor. *MTZ - Motortechnische Zeitschrift* 2000; 2000(Vol. 61):122–8. Available from: URL: <https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/BF03226557.pdf>.

Anhang

Paper in Originalform

A1: Development of a 3D-CFD Model for a Full Optical High-Pressure Dual-Fuel Engine

Reprinted with permission from International Journal of Engines © SAE International

Development of a 3D-CFD Model for a Full Optical High-Pressure Dual-Fuel Engine

Stephanie Frankl¹ and Stephan Gleis¹

¹Technical University of Munich, Germany

Abstract

In times of ever stricter exhaust emission regulations, the importance of alternative combustion processes in internal combustion engines continues to grow. One approach to create a combustion process which produces low CO₂, soot, and methane emissions is the “High-Pressure Dual-Fuel” (HPDF)-combustion. Here, the direct-injected methane is ignited by a small amount of pilot-diesel and burns in a diffusive combustion mode.

This study describes the development of a three-dimensional computational fluid dynamics (3D-CFD) model for the HPDF-combustion. A Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) approach with k-epsilon modelling for turbulence was chosen for the calculation of the flow field. The pilot fuel injection is implemented by using Lagrangian Particle Methods, whereas the gas injection is a mass flow boundary which is derived from measurements of the injector. The model is validated using data from a fully optically accessible single-cylinder research engine. The flow field is compared with particle image velocimetry (PIV) data taken before the start of injection (SOI). Concerning pilot injection, a grid convergence study is conducted and an optimization is developed to reduce computational costs. The penetration length of the liquid fuel spray is validated against Mie-scattering images which are taken during the “Pilot-Diesel-only” experiments in the fully optical single-cylinder research engine.

The ignition and combustion is modeled via detailed chemistry, which is solved using the commercial Software CONVERGE and the SAGE chemistry solver. The flame liftoff length of the pilot-diesel and the ignition and combustion of the underexpanded gas jets are validated using high-speed imaging of flame luminosity and OH* chemiluminescence. It can be shown that the used *n*-heptane mechanism is capable of correctly reproducing the trends in the ignition and combustion process.

History

Received: 26 Aug 2019
 Revised: 09 Dec 2019
 Accepted: 07 Jan 2020
 e-Available: 27 Jan 2020

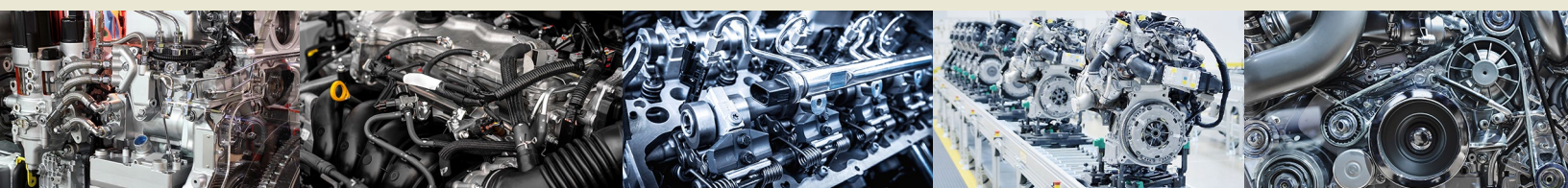
Keywords

Dual-Fuel, Gas-Direct-Injection, Optical-Engine, CFD-Simulation

Citation

Frankl, S. and Gleis, S., “Development of a 3D-CFD Model for a Full Optical High-Pressure Dual-Fuel Engine,” *SAE Int. J. Engines* 13(2):2020, doi:10.4271/03-13-02-0017.

ISSN: 1946-3936
 e-ISSN: 1946-3944



1. Introduction

In the common Dual-Fuel Engine concept, the main fuel is injected into the intake air and ignited by a small amount of diesel at the end of the compression stroke. Due to quenching effects and valve overlap, methane from the gaseous fuel slips into the exhaust gases. Worldwide unburned hydrocarbons (HC) are restricted by laws and international conventions, for example, the MARPOL [1] or the Non-Road Mobile Machinery regulations in the European Union (EU) [2]. Therefore it is a main goal to minimize the HC emissions. One possibility to reach the HC regulations is the high-pressure direct injection of natural gas short before the compression stroke top dead center (TDC) which is ignited by a small amount of pilot-diesel injection, the so-called High-Pressure Dual-Fuel (HPDF)-combustion.

1.1. State of the Art

In the 1990s, P. Oullette studied the high-pressure direct injection of natural gas for diesel engine fueling [3]. He concentrated on the jet penetration and the mixing of the underexpanded gas jets. A rudimentary simulation model, developed to investigate the dual-fuel combustion, used the KIVA Code for the 3D simulation. The results were validated against Schlieren images of cold methane gas jets [4]. The intended use was a dual-fuel application for heavy-duty vehicles. On basis of Oullette's work, Westport developed the first dual-fuel injector with concentric needles [5]. From thereon, a lot of experimental work was done to investigate the complex processes of ignition and combustion.

McTaggart-Cowan carried out studies about the influence of the gas injection pressure level and found a significant influence on the emissions [6]. Furthermore he surveyed the particle matter reduction [7], which was followed by Munshi [8] and Faghani [9, 10] through variations of the relative injection timings of the pilot and main fuel.

Barba et al. carried out experimental investigations with various gas pressures on a 2-liter (2l) heavy-duty engine. They found out that higher gas pressures lead to a shorter burning time and thus to increasingly diesel-like heat release rates (HRRs) [11].

One of the first optical measurements of the combustion of a high-pressure gas jet was conducted by Imhof [12]. In this work, a rapid compression-expansion machine (RCEM) with two separate injectors was used to simulate a large-bore marine engine. He found that, in comparison to a diesel engine, the HRR of the diffusive gas combustion is similar, but the NO_x and soot emissions are significantly lower [13]. His work was continued by Takasaki [14], who used the same machine to optically investigate methane-hydrogen mixtures.

Also using a RCEM, Fink and Jud investigated the influence of spatial and temporal interaction of a gas jet and the pilot-diesel on ignition and combustion using the shadowgraph technique [15]. They have found out that, at simultaneous injection, if the two fuel jets are arranged approximately

parallel, ignition can fail. This occurs because the gas jet sucks up the pilot-diesel so the diesel spray lies within the gas jets and does not mix with air. On the other hand, if the angle between the two fuels is too big, the gas jet does not ignite either because the gas jets do not reach the hot combustion products from the diesel. This data was used by Woodward L'Orange to develop spray targeting for a high-pressure dual-fuel injector [16], which is also used in this study (Figure 1).

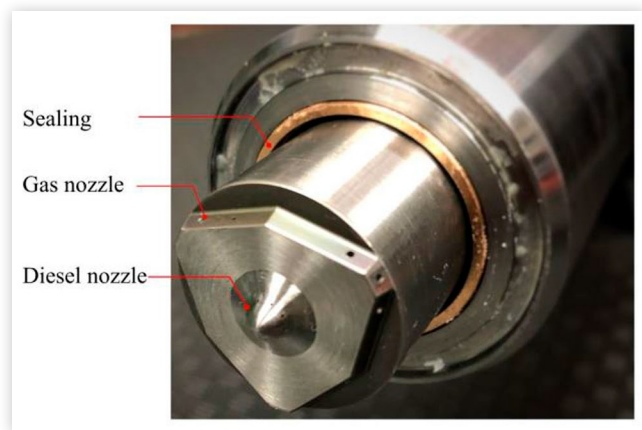
From the beginning, most of the mentioned investigations were accompanied by 3D-CFD simulations to facilitate the interpretation of the results (e.g., [17, 18, 19, 20, 21]). They are used to identify ignition locations and sources of emission and particle formation.

There are only a few sources in literature for the application of the combustion process in optically accessible engines. The first one to publish an optical study combined with CFD results was Hatzipanagiotou [22]. He carried out high-speed imaging on a heavy-duty engine using the Westport HPDI injector, comparing the results versus CFD calculations of the same engine. The latest study is from Rochussen, who did OH*-chemiluminescence and Natural Gas luminosity imaging on a 2l Ricardo Proteus engine [23]. Both studied the influence of the relative injection timing of the two fuels on ignition and reaction zone growth.

1.2. Present Work

The state of the art shows that there is a lack of well-validated CFD models for the HPDF-combustion in high-speed medium-sized engines. So in this work a multidimensional model of the experimental fully optically single-cylinder engine is built up and validated against the measured data and the high-speed imaging. This includes validation of the flow field with PIV as well as liquid penetration length of the pilot-diesel with Mie scattering. The flame liftoff length is compared to the high-speed flame luminosity images and

FIGURE 1 Nozzle with three concentric gas needles and one central diesel needle of the Woodward L'Orange HPDF-Injector.



© 2020 SAE International. All Rights Reserved

OH*-chemiluminescence shots. Afterwards further progression of the underexpanded gas jet is investigated in detail.

2. Methodology

2.1. Experimental Setup

2.1.1. Engine Parameters The test rig used for the experimental surveys is a fully optically accessible single-cylinder engine equipped with the HPDF-Injector from Woodward L'Orange, as shown in Figure 1. The injector uses a 3-1-needle design. There are three concentrically arranged gas needles, where each opens three gas holes. In the middle of the nozzle sits one diesel needle which controls nine holes for the pilot injection. The spray targeting is shown in Figure 2.

The engine has a large bore of 170 and 210 mm stroke. Further data is given in Table 1. The optical accesses of the engine are realized in the "Bowditch Design" [24]. It consists of an elongated piston and an additional lateral access, as shown in Figure 4. A detailed description of the structure can be found in [25, 26, 27, 28].

For the HPDF-combustion experiments, the compression ratio is set to 16.5. Two different inlet camshafts were used to investigate different swirl levels. Figure 3 displays the resulting valve lift curves, one optimized for a maximum fresh air charge and the other with a moderate Miller [29] timing.

The inlet and outlet channels are indicated by pressure sensors as well as temperature sensors. The combustion chamber pressure is measured in 0.1°CA increments.

2.1.2. Optical Setup To validate the flow field PIV images are taken 10°CA ATDC. The test rig is equipped with a Litron Nano TI 200-15-PIV laser for this purpose. The laser

TABLE 1 Engine data.

Displacement	4.77 l
Stroke 2r	210 mm
Bore d	170 mm
Connecting rod length l	480 mm
Compression ratio ϵ	16.5:1
Number of valves	4
Exhaust valve open	136.5°CA
Exhaust valve close	357°CA
Inlet valve open	341.2°CA
Inlet valve close	562°CA

© 2020 SAE International. All Rights Reserved

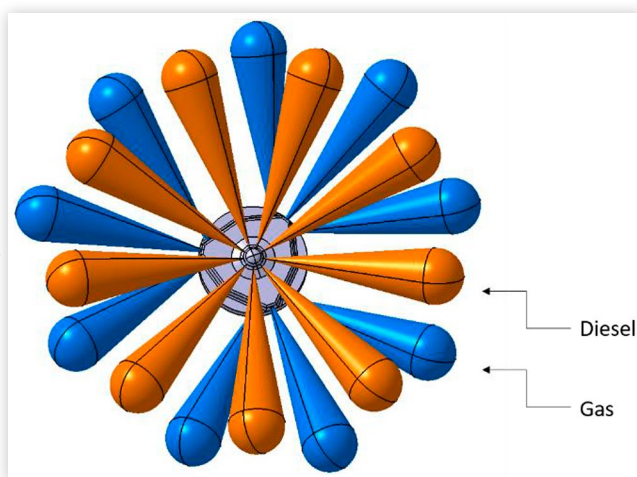
sheet is located 15 mm below the fire deck. For seeding particles titanium dioxide is used. Further details can be found in Gleis et al. [27].

The engine is able to take combined high-speed Mie-scattering and flame luminosity images. For the Mie-scattering images, there is a LED flash lamp at the lateral access beneath the cylinder head (see Figure 4). The used high-speed camera takes the images crank angle synchronous in 0.2°CA resolution through the glass insert in the optical piston.

In order to investigate the diesel ignition more closely, OH-chemiluminescence images were also taken. For these, the same high-speed camera with an additional image intensifier of 222 nm wavelength was used.

For the injection a high-pressure dual-fuel injector was used [16]. The nine gas jets are arranged in triplets around a regular nine-hole diesel injector. This design is enabled using three concentric gas needles and one central diesel needle. The experiments are performed with diesel as pilot fuel and

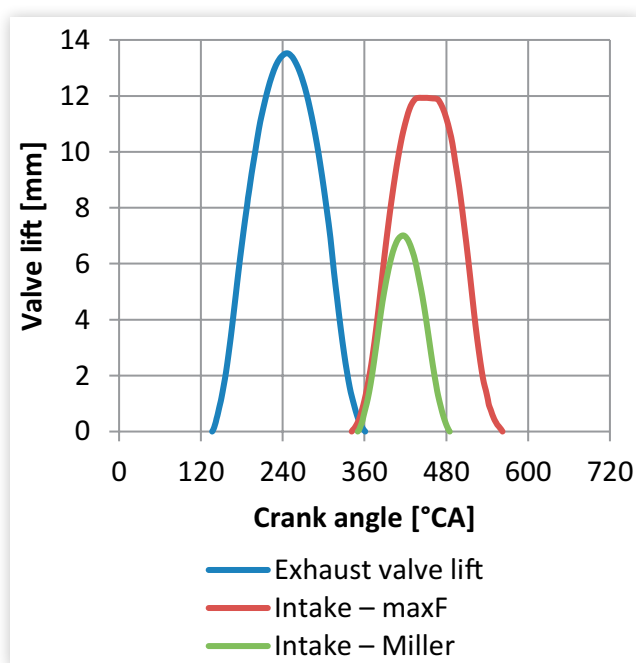
FIGURE 2 Spray targeting of the HPDF-Injector.



© 2020 SAE International. All Rights Reserved

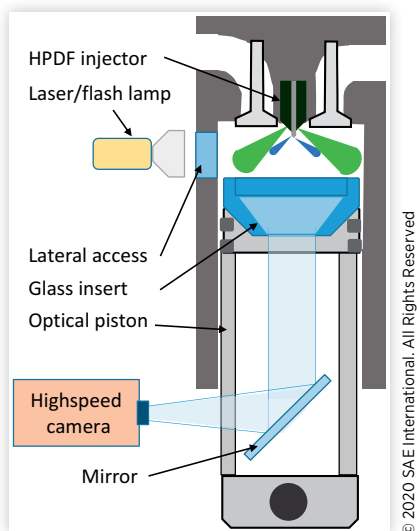
© 2020 SAE International. All Rights Reserved.

FIGURE 3 Valve lift curves.



© 2020 SAE International. All Rights Reserved

FIGURE 4 Schematic representation of the optical single-cylinder engine.



methane as main gaseous fuel. Due to the optical construction, the only cooling for the upper part of the piston is through air ventilation. In order not to overheat the construction, and prevent severe damage, the experiments are conducted in skip fire mode. This means there are 50 fired cycles followed by drag operation to cool down the glass inserts.

2.1.3. Reference Point for Dual-Fuel Operation

The reference point for the dual-fuel operation was chosen at an engine speed of 750 RPM with 2.3 bar inlet pressure. The exhaust pressure is kept at the same value for a better estimation of the charge air per cycle, which is measured via a Coriolis flow meter. The intake air is conditioned to a constant temperature of 318 K.

To avoid severe damage of the optical setup through large pressure gradients, the gas injection takes place short after the piston reaches TDC. The start of energizing (SOE) of the pilot-diesel results from the ignition delay of the diesel; it is chosen in a way that the propagating gas jets hit the igniting diesel cones so the diffusive combustion mode is dominating the combustion of the methane. [Table 2](#) gives the resulting values as well as the injected masses and the injection pressures. The fuel ratio is chosen in a way that the pilot fuel is 10% of the whole energy content. These settings reach an indicated effective mean pressure of 12 bar.

TABLE 2 Injection parameters.

SOE pilot-diesel	-2°CA
SOE gas main injection	-5°CA
m_diesel	31 mg
m_gas	320 mg
p_diesel	1000 bar
p_gas	300 bar

© 2020 SAE International. All Rights Reserved

2.2. Numerical Setup

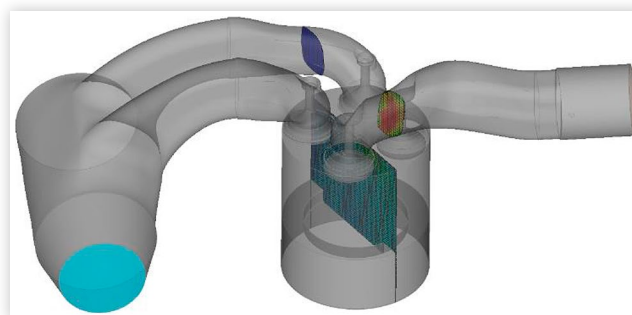
For the 3D-CFD simulations of the described experimental setup, the commercial software package CONVERGE CFD is used. The Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) equations including the k -epsilon-RNG turbulence model [30] describe the flow field of the gas-exchange cycle and combustion simulations. The “pressure implicit with splitting of operator” (PISO) algorithm from Issa [31] is used to solve the time dependent fluid flow equations. The Peng-Robinson model represents the real gas behavior [32] of the gas phase. The combustion is modelled via the detailed chemistry solver SAGE [33]. In order to keep the computational cost low, the HC mixture diesel is substituted by n -heptane in the simulations. n -Heptane is often used as reference fuel for diesel for it has a similar LHV of 44.7 MJ/kg [34] and cetane number of approximately 56 [35].

The kinetics is described by the reduced Chalmers 53 n -heptane mechanism, which was validated for use for dual-fuel combustion by Jud in [36, 37]. Since methane is an intermediate product of n -heptane combustion, reactions for the oxidation of methane are contained in this mechanism.

2.2.1. Charge Exchange Simulation The chosen domain for the gas-exchange simulation includes the plenum and ends at the beginning of the exhaust system, as shown in [Figure 5](#). Due to the optical engine’s design, the crevice volume is increased compared to the all metal engine. It would be too complex to consider them in detail, so they are collected and represented in an extended piston junk volume to retain the correct compression ratio. It is assumed that the flow within the crevices has very low influence on the charge movement [38]. Since this is a direct injection of the gas, there are no unburned HC emissions from crevices as in pre-mixed configurations expected [39].

The experimental pressure measurements are used for the inlet and exhaust boundaries, as well as for initial conditions to reach maximum consistency with experiments. The motion of the piston results from the experimental pressure curves, and the following presumption of the optical piston

FIGURE 5 Domain for charge-exchange simulations.



© 2020 SAE International. All Rights Reserved

© 2020 SAE International. All Rights Reserved.

and connecting rod deformation is taken into account. With the deformation

$$\frac{dz}{dp} = 0.7 \frac{\mu\text{m}}{\text{bar}} \quad \text{Eq. (1)}$$

the piston motion results in the equation:

$$s(\varphi, p) = -\frac{dz}{dp} + r \left[1 - \cos(\varphi) + \frac{r}{4l} (1 - \cos(2\varphi)) \right] \quad \text{Eq. (2)}$$

The deformation is a result from a finite elements simulation of the optical piston. CONVERGE uses an orthogonal grid for the discretization of the computational domain [40]. The Base Size of the mesh is 4 mm, with several fixed embedding (FE) refinements, as listed in Table 3. In addition an adaptive mesh refinement (AMR) is in use for the whole domain except the plenum, exhaust, and crevice regions while valves are open. FE and AMR refine or coarsen the grid with embedding scales as follows [40]:

$$\text{Scaled grid size} = \frac{\text{Basesize}}{2^{\text{embed. scale}}} \quad \text{Eq. (3)}$$

Due to the optical engine's lateral access, the temperature wall boundary for the liner is not uniform. The glass heats up to higher temperatures than the steel liner. This is taken into account through a locally defined temperature profile which is 600 K in the area of the lateral glass access and 420 K on the rest of the liner surface. All other walls are assumed to have constant temperature values.

For a reliable result, three consecutive gas exchange cycles are calculated. The initialization of the combustion simulation uses the results from the third cycle.

2.2.2. Pilot-Diesel Simulation Due to the symmetry of the used dual-fuel injector-regular nine-hole diesel injector (see Figure 2), the tuning of the diesel injection parameters is made on a 40° sector mesh. It is initialized by the result of the gas-exchange cycle simulation 10°CA before SOI. The combustion chamber pressure is 36 bar and 850 K of temperature. The diesel injection pressure is 1000 bar, the fuel temperature 350 K, and the injected mass 3.69 mg.

TABLE 3 Fixed embeddings.

Name	FE scale
Crevice	2
Inlet ports	2
Receiver	1
Cylinder	1
Valve seats	3

© 2020 SAE International. All Rights Reserved

© 2020 SAE International. All Rights Reserved.

The diesel injection uses the Lagrangian droplets method to simulate the fluid phase of the fuel with the O'Rourke model for turbulent dispersion and Frossling model for evaporation [40]. The Kelvin-Helmholtz-Aerodynamic Cavitation Turbulence [41] breakup model describes the primary breakup whereas the Rayleigh-Taylor breakup model is used for secondary spray breakup [33, 40]. The discharge coefficient for the nozzle is set to 0.8. Droplet collision is modelled via NTC collision model [42]. The liquid fuel is modelled using the default fuel "DIESEL2" from Converge CFD, which evaporates to n-heptane in gas phase. The injection rate derives from measurements of the injector in an injection rate analyzer. A mesh study based on the results of Senecal et al. [43] was made to determine the values for the mesh size. For this mesh study only the diesel injection was of interest, so it was made on a 40° sector mesh without the sac hole of the gas injector (Section 2.2.3). The determined mesh sizes and related parcel numbers are given in Table 4. The meshes 1-4 and parcel numbers are analog to the study of Senecal et al., but using the geometry of the optical engine and validated with the experimental Mie-scattering images of the liquid diesel phase.

Figure 6 shows the resulting penetration length of the mesh study. Mesh 1 has a too-low rise in the beginning of the injection. The Parcels enter the domain to slow, and the injection does not reach a constant behavior. Meshes 2 and 3 overestimate the penetration length around 714.5°CA by ca. 45% and 18%, whereas they show least deviation while the injection rate is constant.

Mesh 4 shows the best accordance to the measured penetration length in the experiment. The peaks in the penetration length, as in meshes 2 and 3, are eliminated and the constant value of the penetration length has a maximum deviation of 10% from the measurements. Mesh 4 had the highest computational time. To decrease the calculation time, in mesh 5, the parcel number of mesh 3 was used. This divided the calculation time by half, it still avoids the overshoot in the penetration length, but in the constant part of the injection, the penetration deviates 14.3% from the experiment.

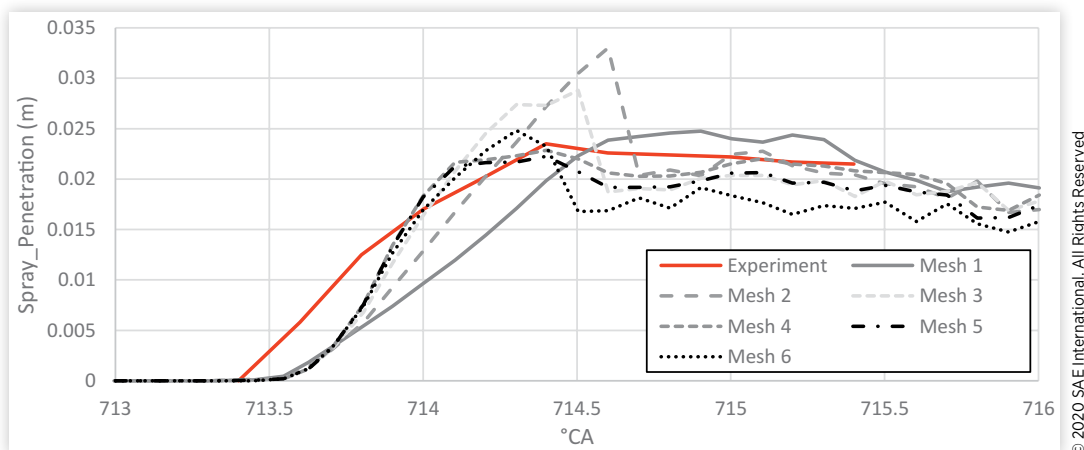
A further reduction of the parcel number in mesh 6 led to even shorter calculation times. The maximal deviation results then in 25.6%, and the mean deviation is about 17.5%. This inaccuracy was tolerated for the fact that the computational times could be reduced further to a tenth of mesh 4.

The final mesh for the diesel injection has a two-step cone-shaped embedding for each nozzle. The embedded

TABLE 4 Resulting minimum cell sizes and used parcel numbers of the mesh study.

	Min. cell size	Number of parcels
Mesh 1	0.5	128,000
Mesh 2	0.25	512,000
Mesh 3	0.125	2,048,000
Mesh 4	0.0625	8,192,000
Mesh 5	0.0625	2,048,000
Mesh 6	0.0625	64,000

© 2020 SAE International. All Rights Reserved

FIGURE 6 Comparison of the influence of mesh size and parcel number on spray penetration.

© 2020 SAE International. All Rights Reserved

regions overlap and can be seen in [Figure 7](#). The inner cone is a scale 4 embedding, which results in a minimum cell size of 0.0625 mm, and its length is 10 mm. The outer cone is a scale 3 embedding of 25 mm length.

2.2.3. Gas Main Injection The simulations for the gas injection and the dual-fuel combustion is made on 120° sector meshes, as shown in [Figure 8](#).

The gas injection takes part via a mass flow boundary at the cross section 1 mm above of the gas needle seat. The mass flow rate for the gas derives from flow measurement in an IAV Injection Analyzer Gas using nitrogen as medium, which is translated to the characteristics of methane. Because of vorticity effects in the sac hole, it is necessary to lay the boundary short above the seat of the gas needle, as shown in [Figure 9](#).

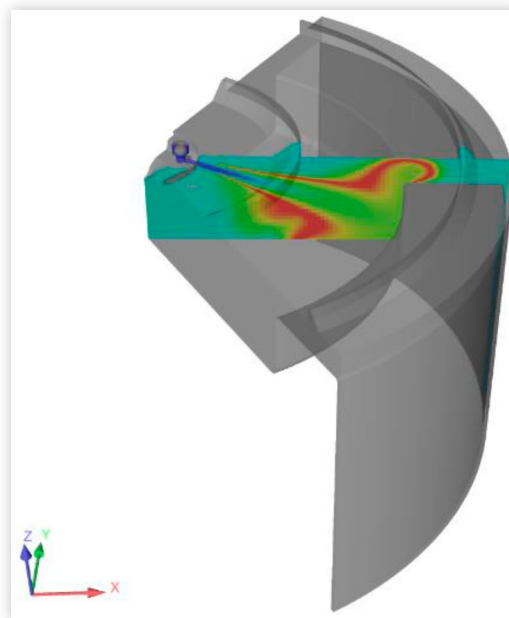
For the gas injector, a FE scale 3 refines the cells within the sac hole and the nozzle holes. The gas jet itself is refined via temperature and velocity of AMR scale 3 as well. The gas needle of the injector is permanently open for the whole simulation - without any movement. The seat of the gas needle

divides the domain into two separate regions, which are connected at the moment when the gas injection starts.

3. Results and Discussion

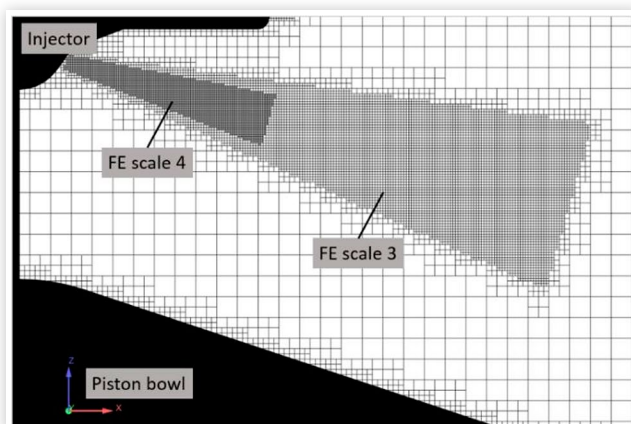
3.1. Results of the Charge Exchange Simulations

The mesh parameters for the gas exchange simulation were optimized for the reference point. Afterwards it was used for cold flow simulations of different charging air

FIGURE 8 Simulation domain for gas injection and dual-fuel combustion.

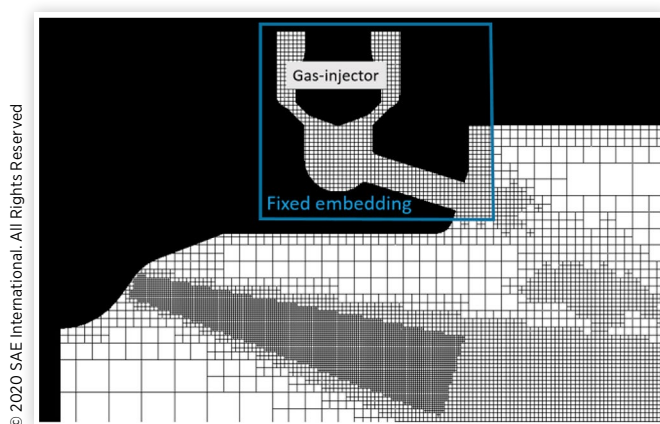
© 2020 SAE International. All Rights Reserved

© 2020 SAE International. All Rights Reserved.

FIGURE 7 Mesh refinements for the liquid diesel injection.

© 2020 SAE International. All Rights Reserved

FIGURE 9 Mesh while gas injection is active. Due to vorticity effects the sac hole of the gas injector has to be integrated into the domain.



pressures, rotational speed, and valve timings. Comparisons with the measured pressure curves (average of 50 curves) show a very good agreement within plus-minus 10% deviation from the pressure, as in Figure 10. The only exception is at the charge exchange TDC where the reference point has a deviation of 37% for a few crank angles, which is 0.6 bar. The measurement accuracy of the pressure sensor is ± 0.2 bar. Therefore, the deviation probably results from the incorrect represented crevice volumes. The deviation from the measured curves is at minimum around the firing TDC, which is ca. 1 bar.

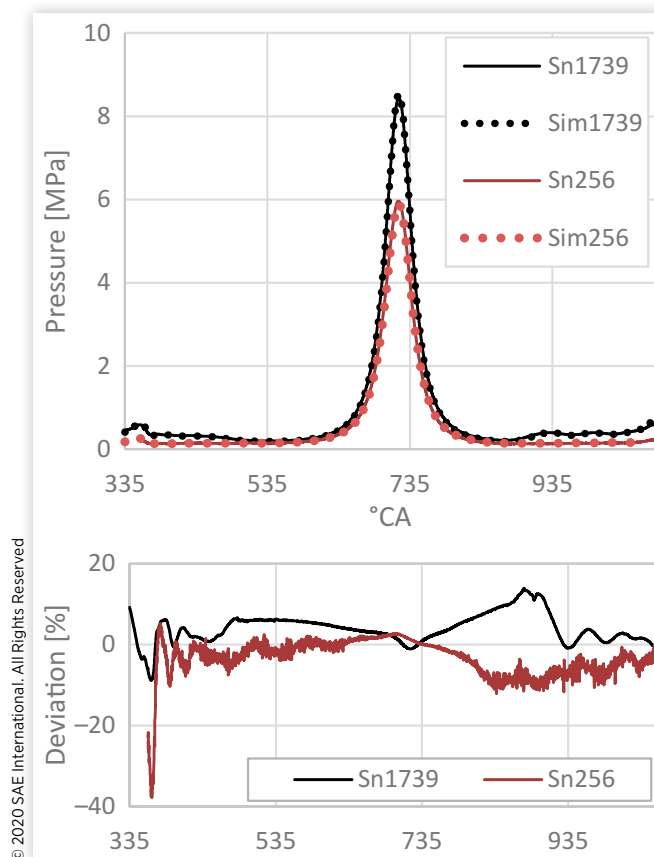
To determine the influence of the fluid flow in the cylinder bowl on the combustion, the fluid flow around the TDC firing is validated against the PIV measurements, as shown in Figure 11. The simulation results show good agreement with the measured data. The absolute values of the velocity are of the same range, and the center of the swirl is dislocated relative to the cylinder axis and rotating.

A closer look at the fluid flow at 710°CA shows that the flow evens as the pistons approach the TDC. The swirl axis lies almost in the center of the cylinder; therefore, the 40° for the diesel combustion and the 120° symmetry for the gas-diesel combustion simulations are justified.

3.2. Results of the Combustion Simulations

3.2.1. Diesel Combustion To validate the combustion simulation, the results of the combustion simulation are compared against the pressure measurements of the experiments. Afterwards they are overlaid with the images of the high-speed cameras. To validate the diesel ignition, the OH-isosurfaces are compared to the OH*-chemiluminescence images. The comparison uses an average of images of 50 cycles at every crank angle to get a valuable result to compare to the simulation.

FIGURE 10 Pressure curves of simulation (dots) and experiment (line) for the reference case (Sn256) and a comparison case with different valve timings (Sn1739).



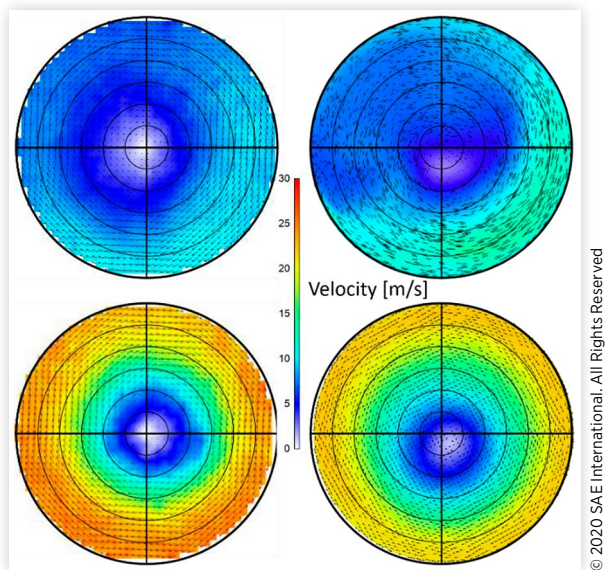
The result shows a good agreement of the simulated OH with the local distribution of the OH* in the experiment. The ignition, as can be seen in Figure 12 at 715.8°CA , starts at the flanks of the diesel spray cones and spreads to the head of the jet at 717.4°CA . When the combustion continues, the OH region broadens, as it does in the experiment. The flames in combustion and in simulation simultaneously reach the piston bowl wall, which is another sign for the good quality of the CFD model.

Due to the fact that the OH*-chemiluminescence imaging technology produces integral images of the natural activated OH*, which does not equal the full quantity of OH in the simulation [44], no quantitative comparison is possible.

3.2.2. Dual-Fuel Combustion For the Dual-Fuel Combustion, the resulting pressure curves in the cylinder are compared with the measured pressures in the experiment. Furthermore the HRRs from pressure rate analysis are compared with the heat release from the simulation to get a better understanding of the quality of the CFD model (Figure 13).

For the pilot-diesel combustion, the resulting in-cylinder pressure of the simulation is close to the measured pressure in the combustion chamber. At the beginning of the gas

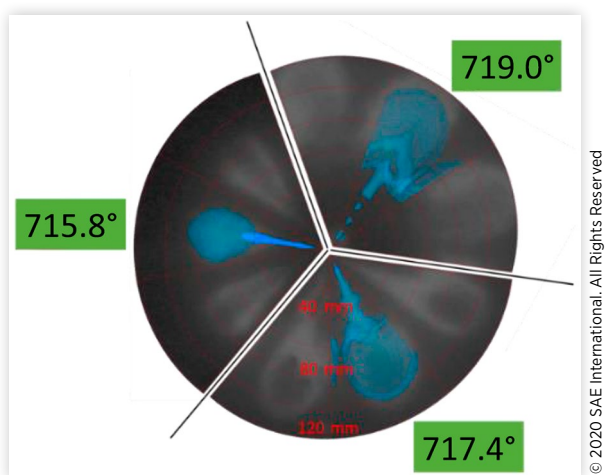
FIGURE 11 Comparison of the PIV measurements (right) and the simulation (left) for the maxF (upper)- and Miller(lower)-valve timing at 710°CA 15 mm below the fire deck.



injection, the pressure in the simulation is just 1 bar above the experiment. This is a result of the slightly higher HRR.

The maximum pressure in the experiment is 134 bar at 729°CA whereas the simulation reaches almost the same value of 134 bar, but at 734°CA. With a look at the HRR, it can be seen that the gas in the simulation starts to release heat at the same time as in the experiment, but the peaks are about 250 J/s lower. This changes from 730° to 737°CA; the heat release in the simulation is higher, so the pressure rises above the measured values. From 750°CA the simulated HRR value falls below that from the experiment.

FIGURE 12 Comparison of the OH*-chemiluminescence images and the isosurface of mass fraction of OH (blue) from the CFD results at the beginning of the pilot-diesel ignition.



For further insight into the HPDF-combustion, isosurfaces of methane and temperature are compared with the high-speed images. The temperature isosurfaces value is 1500 K for the fact that soot luminosity is within the visible range above this temperature. The methane isosurface lies at 0.02% mass fraction.

Figure 14 shows the overlaid pictures from the experiment (background) and simulation. At 721.6°CA the pilot-diesel ignites and the gas injection starts. There is also a small amount of methane visible within the diesel combustion, for the fact that CH₄ is produced as decomposition product of the heptane combustion. In the next step shown at 723.2°CA, the gas injection has started to expand. It can be detected in the experiment as the small bright areas between the burning diesel cones. In the simulation the methane injection can be observed via the three blue cones emerging from the gas injector holes.

As the gas further emerges into the combustion chamber, it can be seen that the penetration length fits quite good. When the tips of the gas jets shoot past the burning diesel, parts of the

FIGURE 13 Comparison of simulation (red line) and experiment (gray); measured pressure curves and derived HRRs.

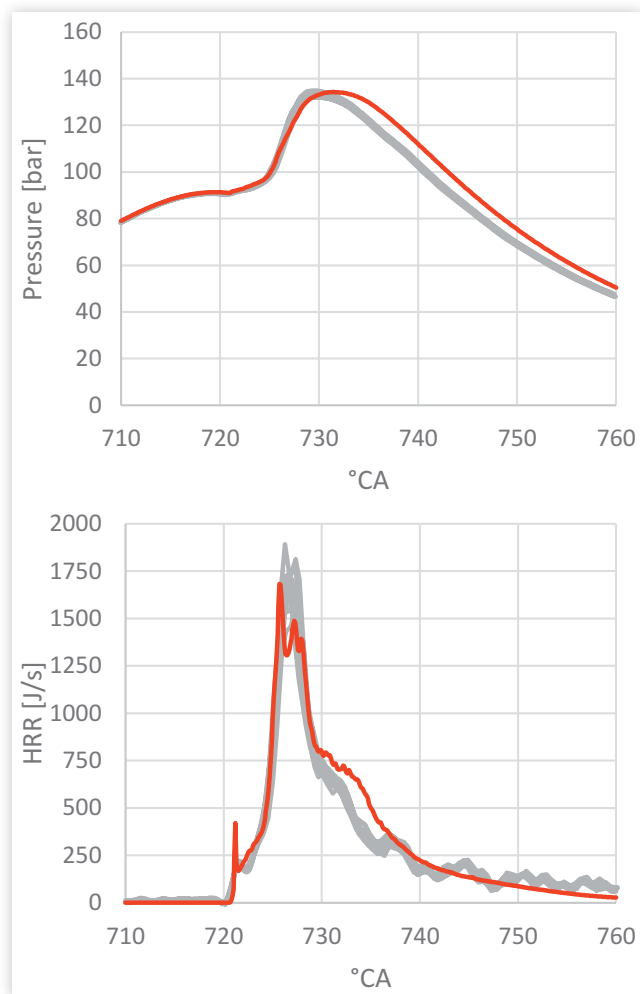
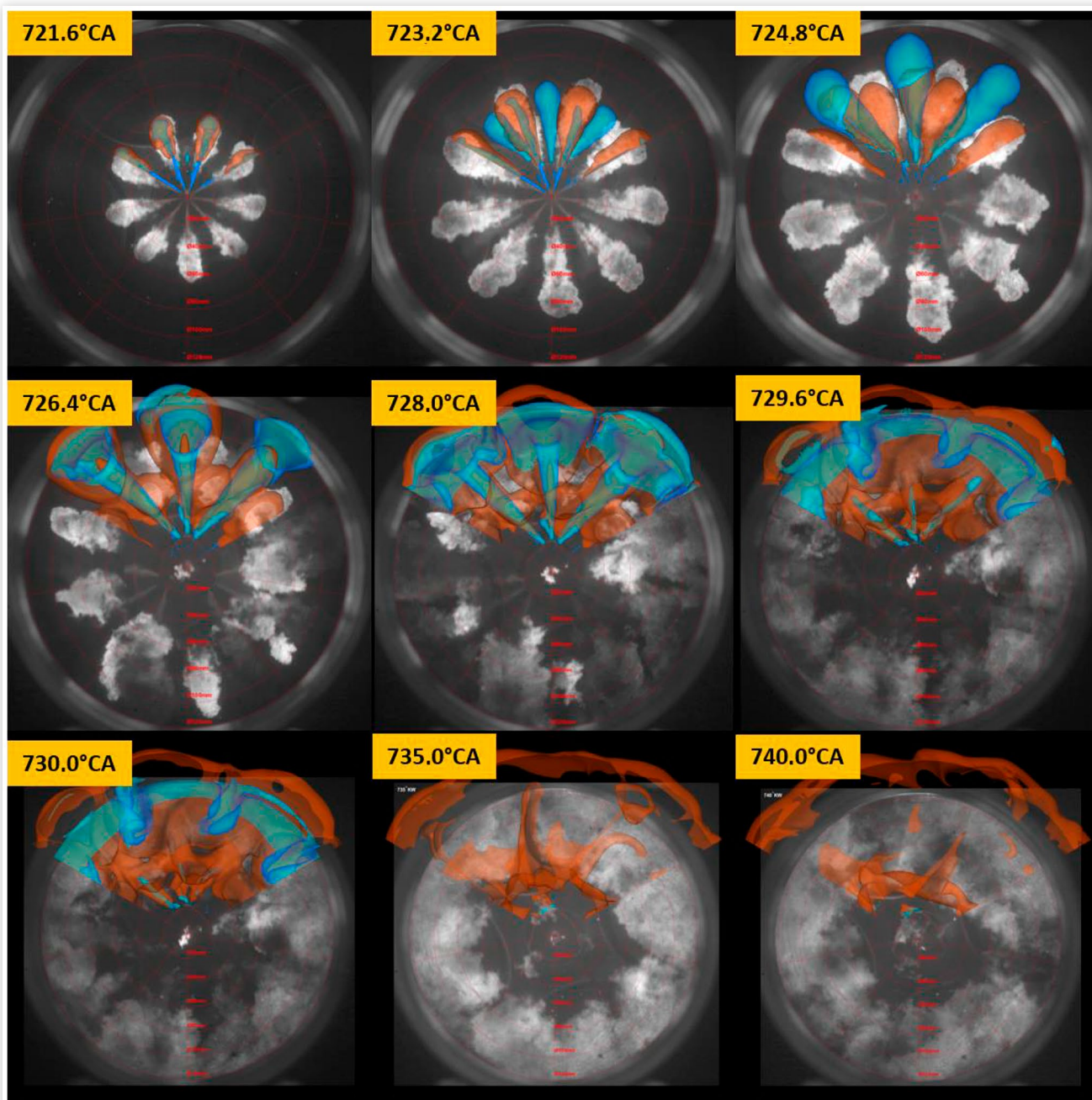


FIGURE 14 Comparison of simulation isosurfaces (orange $T = 1500$ K, blue $\text{CH}_4 = 2\%$) and experiment (gray, background).

© 2020 SAE International. All Rights Reserved

hot combustion gases are entrained. In the experiment this can only be guessed by the blurriness of the diesel luminosity (724.8°CA) - which does not happen in the diesel-only pictures. In the simulation, on the other hand, it can be clearly seen that the temperature isosurfaces extend into the gas jets. In the following pictures it can be seen that the methane ignites from behind. The gas jets reach the piston bowl walls before igniting completely. Therefore, they form a very rich mixture at the piston bowl walls. This is accompanied by soot illumination in the gas combustion (726.4° - 729.6°CA) and the high values in the HRR in Figure 13. In the lower part of Figure 14, it can

be seen that there is a big amount of CH_4 at the piston bowl wall which vanishes until 735°CA . In the experiment the soot illumination from the gas combustion intensifies and slows down again until 740°CA , where most of the combustion is over.

3.3. Discussion of the Results

The charge exchange shows good agreement to the measurements. This was achieved by a modified stroke, temporal wall boundary for the liner, and an additional crevice volume for

the optical accesses. For the mesh FEs on the boundaries and AMR are used. There is a chance that the experiment is influenced by blow-by rates. The engine is equipped with PTFE piston rings which last about three hours of operation until they get worn and the blow-by rises. For comparison with the CFD results, the experiments taken short after changing the rings are preferred to minimize the influence of blow-by. Nevertheless, the measured and the simulated velocity fields 15 mm below the cylinder deck show a good agreement for both of the considered points. The velocity magnitudes are of the same range, and the areas of higher and lower gas motion are represented well in the simulation.

Simulating the pilot-diesel, it is obvious that the initial spray penetration length in the simulation is always underestimated compared to the Mie-scatter imaging. One reason for this could be inaccuracies in the measured injection rate. Improvement of this will be part of future optimization of the model. In order to optimize the computing time, the number of particles was reduced while the cell size was kept at constant values. A mean deviation of 17.5% in the liquid penetration length was accepted in order to reduce the calculation time by factor 10. The location and timing of the pilot ignition are still in good agreement with the experimental recordings, which enable a locally correct ignition source for the main gas fuel.

The gas combustion also shows good agreement with the measured values. The ignition delay of the methane ignition fits the experiments quite well. The increase in the HRR is steeper in the simulation than in the experiment. One reason for this could be that in the experiment not all gas needles open exactly the same (within microseconds) and therefore a small part of the fuel gas ignites later, whereas in the simulation, due to the symmetry boundaries, the injections are assumed identical.

3.4. Conclusion and Outlook

In this work a simulation model for the high-pressure dual-fuel combustion was developed and validated.

To properly simulate the liquid phase of the diesel injection a mesh study was conducted. The final computational mesh consists of a combination of FEs and AMR.

In order to realize the gas injection, the lowest part of the nozzle geometry is included in the simulation to avoid a supercritical boundary condition at the gas inlet.

The results of the dual-fuel injection show good agreement with the high-speed flame luminosity images.

Further development of the model is still necessary, to better match the liquid spray penetration length of the diesel injection and the HRRs of the experiments.

The knowledge of the actual wall temperatures has to be optimized. Therefore the engine will be equipped with additional thermocouples in the cylinder head and at the optical accesses in the future.

Furthermore the simulation model has to be tested against various speeds and loads. In order to simulate real gas qualities with amounts of propane and ethane, it could

be necessary to include additional reactions and species to the used reaction mechanism.

As shown in the [Section 1.1](#), for marine high-speed engines these are one of the first researches which was done in this engine size and displacement with high-pressure gas direct injection and diffusive combustion.

Abbreviations

AMR - Adaptive mesh refinement

CA - Crank angle

FE - Fixed embedding

HPDF - High-pressure dual-fuel

SOE - Start of energizing

SOI - Start of injection

TDC - Top dead center

References

1. International Maritime Organization, MARPOL: Consolidated Edition, 2011; Articles, Protocols, Annexes and Unified Interpretations of the International Convention for the Prevention of Pollution from Ships, 1973, as Modified by the 1978 and 1997 Protocols, Fifth edition. London: International Maritime Organization, 2011.
2. Parliament Office, "REGULATION (EU) 2016/ 1628 OF THE EUROPEAN PARLIAMENT AND OF THE COUNCIL - of 14 September 2016 - On Requirements Relating to Gaseous and Particulate Pollutant Emission Limits and Type-Approval for Internal Combustion Engines for Non-Road Mobile Machinery, Amending Regulations (EU) No. 1024/2012 and (EU) No. 167/2013, and Amending and Repealing Directive 97/68/EC: EU 2016/1628," *Official Journal of the European Union*, 2016, 53-117.
3. Ouellette, P., "Direct Injection of Natural Gas for Diesel Engine Fueling: A Thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy," Dissertation, Department of Mechanical Engineering, University of British Columbia, Vancouver, 1996.
4. Hill, P.G. and Ouellette, P., "Transient Turbulent Gaseous Fuel Jets for Diesel Engines," *J. Fluids Eng.* 121(1):93, 1999.
5. Westport, "HPDI 2.0 Injector," <http://www.westport.com/is/core-technologies/hpdi-2#what-is-hpdi-2.0>, accessed December 13, 2017.
6. McTaggart-Cowan, G.P. et al., "The Effects of High-Pressure Injection on a Compression-Ignition, Direct Injection of Natural Gas Engine," *J. Eng. Gas Turbines Power* 129(2):579, 2007.
7. McTaggart-Cowan G.P., Mann K., Huang J., Wu N. et al., "Particulate Matter Reduction from a Pilot-Ignited, Direct Injection of Natural Gas Engine," in *Proceedings of the ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, Vancouver, 2012, 427.

8. Munshi S.R., McTaggart-Cowan G.P., Huang J., and Hill P.G., "Development of a Partially-Premixed Combustion Strategy for a Low-Emission, Direct Injection High Efficiency Natural Gas Engine," in *Proceedings of the ASME 2011 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, Detroit, 2011, 515-528.
9. Faghani, E., Kheirkhah, P., Mabson, C., McTaggart-Cowan, G. et al., "Effect of Injection Strategies on Emissions from a Pilot-Ignited Direct-Injection Natural-Gas Engine - Part I: Late Post Injection," SAE Technical Paper 2017-01-0774, 2017, <https://doi.org/10.4271/2017-01-0774>.
10. Faghani, E., Kheirkhah, P., Mabson, C., McTaggart-Cowan, G. et al., "Effect of Injection Strategies on Emissions from a Pilot-Ignited Direct-Injection Natural-Gas Engine - Part II: Slightly Premixed Combustion," SAE Technical Paper 2017-01-0763, 2017, <https://doi.org/10.4271/2017-01-0763>.
11. Barba, C., Dyckmans, J., Förster, J., and Schnekenburger, T., "Natural Gas-Diesel Dual Fuel for Commercial Vehicle Engines," in *Internationaler Motorenkongress 2017*, Baden-Baden, Germany, 2017, 391-407.
12. Imhof, D., "Visual Combustion Studies for Environmentally Friendly Marine Diesel and Gas Engines," Dissertation, Laboratory of Energy and Combustion (ECO), Kyushu University, Japan, Kyushu, 2013.
13. Imhof, D., Tsuru, D., Tajima, H., and Takasaki, K., "High-Pressure Natural Gas Injection (GI) Marine Engine Research with a Rapid Compression Expansion Machine," in *13. CIMAC*, Shanghai, 2013.
14. Takasaki, K., Tsuru, D., Ueno, R., Asano, S. et al., "Visual Study on GI (Gas High-Pressure Injection) Combustion for Highly Efficient Gas Engine," in *15th Conference "The Working Process of the Internal Combustion Engine"*, Graz, 2015, 403-415.
15. Fink, G., Jud, M., and Sattelmayer, T., "Influence of the Spatial and Temporal Interaction Between Diesel Pilot and Directly Injected Natural Gas Jet on Ignition and Combustion Characteristics," *J. Eng. Gas Turbines Power* 140(10):102811, 2018.
16. Senghaas, C., Willmann, M., and Berger, I., "New Injector Family for High Pressure Gas and Low Caloric Liquid Fuels," in *29th CIMAC Congress*, Vancouver, 2019.
17. Keskinen, K., "Numerical Studies for Charge Formation in Combustion Engines," Dissertation, Department of Mechanical Engineering, Thermodynamics and Combustion Technology, Aalto University, Aalto, Finland, 2018.
18. Choi, M., Lee, S., and Park, S., "Numerical and Experimental Study of Gaseous Fuel Injection for CNG Direct Injection," *Fuel* 140:693-700, 2015.
19. Hamzehloo, A. and Aleiferis, P.G., "Numerical Modelling of Transient Under-Expanded Jets under Different Ambient Thermodynamic Conditions with Adaptive Mesh Refinement," *International Journal of Heat and Fluid Flow* 61:711-729, 2016.
20. Li, M., Zhang, Q., Li, G., and Li, P., "Effects of Hydrogen Addition on the Performance of a Pilot-Ignition Direct-Injection Natural Gas Engine: A Numerical Study," *Energy Fuels* 31(4):4407-4423, 2017.
21. Huang J., McTaggart-Cowan G., and Munshi S., "Large-Eddy Simulation of Direct Injection Natural Gas Combustion in a Heavy-Duty Truck Engine Using Modified Conditional Moment Closure Model with Low-Dimensional Manifold Method," *International Journal of Engine Research*, 1-14, 146808741878285, 2018.
22. Hatzipanagiotou A. et al., "Numerische und optische Analyse der Gas-Diffusionsverbrennung mit Diesel-Pilotzündung in NFZ-Motoren," *International Journal of Engine Research*, 109-119, 146808741773891, 2017.
23. Rochussen, J., McTaggart-Cowan, G., and Kirchen, P., "Parametric Study of Pilot-Ignited Direct-Injection Natural Gas Combustion in an Optically Accessible Heavy-Duty Engine," *International Journal of Engine Research* 121:1-17, 2019.
24. Bowditch, F.W., "A New Tool for Combustion Research A Quartz Piston Engine," SAE Technical Paper 610002, 1961, <https://doi.org/10.4271/610002>.
25. Korb B., Prager M., and Wachtmeister G., "Ursachen und Reduzierung der CH₄-Emissionen in Biogasmotoren; Teilvorhaben I: Abschlussbericht zum Forschungsprojekt," Technische Universität München, Jan. 2016.
26. Frankl S., Gleis S., and Wachtmeister G., "Interpretation of Ignition and Combustion in a Full-Optical High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) Engine Using 3D-CFD Methods," in *29th CIMAC Congress*, Vancouver, 2019.
27. Gleis, S., Frankl, S., Waligorski, D., Prager, M. et al., "Investigation of the High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) Combustion Process of Natural Gas on a Fully Optically Accessible Research Engine," SAE Technical Paper 2019-01-2172, 2019, <https://doi.org/10.4271/2019-01-2172>.
28. Karmann, S.B., Prager, M., and Wachtmeister, G., "Conceptual Investigations on Full Optical Accessibility to Large-Bore Medium-Speed Engines," *SAE Int. J. Engines* 12(3):291-308, 2019, <https://doi.org/10.4271/03-12-03-0020>.
29. Miller, R., "High-Pressure Supercharging System," U.S. Patent 2670595, Application no. US12216749A, March 2, 1954.
30. Han, Z. and Reitz, R.D., "Turbulence Modeling of Internal Combustion Engines Using RNG k-ε Models," *Combustion Science and Technology* 106(4-6):267-295, 1995.
31. Issa, R.I., "Solution of the Implicitly Discretised Fluid Flow Equations by Operator-Splitting," *Journal of Computational Physics* 62(1):40-65, 1986.
32. Peng, D.-Y. and Robinson, D.B., "A New Two-Constant Equation of State," *Ind. Eng. Chem. Fund.* 15(1):59-64, 1976.
33. Senecal, P., Pomraning, E., Richards, K., Briggs, T. et al., "Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length and Flame Lift-Off Length Using CFD and Parallel Detailed Chemistry," SAE Technical Paper 2003-01-1043, 2003, <https://doi.org/10.4271/2003-01-1043>.
34. Tao, F., Reitz, R.D., and Foster, D.E., "Revisit of Diesel Reference Fuel (*n*-Heptane) Mechanism Applied to Multi-Dimensional Engine Simulation," in *Seventeenth International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting at the SAE Congress*, Detroit, MI, April 15, 2007.

35. Curran, H.J., Gaffuri, P., Pitz, W.J., and Westbrook, C.K., "A Comprehensive Modeling Study of *n*-Heptane Oxidation," *Combustion and Flame* 114(1-2):149-177, 1998.
36. Jud, M., Fink, G., and Sattelmayer, T., "Predicting Ignition and Combustion of a Pilot Ignited Natural Gas Jet Using Numerical Simulation Based on Detailed Chemistry," in *Proceedings of the ASME 2017 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, Seattle, 2017.
37. Jud, M., Wieland, C., Fink, G., and Sattelmayer, T., "Numerical Analysis of the Combustion Process in Dual-Fuel Engines with Direct Injection of Natural Gas," in *Proceedings of the ASME 2018 Internal Combustion Fall Technical Conference*, San Diego, 2018.
38. Stocchi, I., Liu, J., Dumitrescu, C.E., Battistoni, M. et al., "Effect of Piston Crevices on the Numerical Simulation of a Heavy-Duty Diesel Engine Retrofitted to Natural-Gas Spark-Ignition Operation," *Journal of Energy Resources Technology* 141(11):2159, 2019.
39. Ambrogi, L., Liu, J., Battistoni, M., Dumitrescu, C. et al., "CFD Investigation of the Effects of Gas' Methane Number on the Performance of a Heavy-Duty Natural-Gas Spark-Ignition Engine," SAE Technical Paper 2019-24-0008, 2019, <https://doi.org/10.4271/2019-24-0008>.
40. CONVERGE Manual, "CONVERGE: Convergent Science," 2018.
41. Som, S. and Aggarwal, S.K., "Effects of Primary Breakup Modeling on Spray and Combustion Characteristics of Compression Ignition Engines," *Combustion and Flame* 157(6):1179-1193, 2010.
42. Schmidt, D.P. and Rutland, C.J., "A New Droplet Collision Algorithm," *Journal of Computational Physics* 164(1):62-80, 2000.
43. Senecal, P.K., Pomraning, E., Richards, K.J., and Som, S., "Grid-Convergent Spray Models for Internal Combustion Engine CFD Simulations," in *ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, Vancouver, 2012, vol. 2012, 697.
44. Lauer, M.R.W., "Determination of the Heat Release Distribution in Turbulent Flames by Chemiluminescence Imaging," München, Techn. Univ., Diss., Munich, 2011, 1st ed. München: München; Verl. Dr. Hut, 2011.

A2: Interpretation of Ignition and Combustion in a Full-Optical High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) Engine using 3D-CFD Methods

Dear Ms. Frankl,

Yes, we are always happy to let the CIMAC papers, presentations and other publications to be republished. We request that you to provide due acknowledgements to CIMAC stating that the copyright of the content is with CIMAC as well as if there are any corresponding source of the content mentioned in the paper.

Secondly, you will have to inform us where the content is being published, or where this is being used such that we are informed and may also circulate this also from our side if necessary.
(In this case you have, but I would be happy if you can just send me a link once published.)

I hope this clarifies your request, and in case you may have any questions, please do not hesitate to write back to me. I wish you a good second half to your week.

Best regards,
Anirudh Purayil

Project Manager - Technical
CIMAC e.V.
Lyoner Straße 18
60528 Frankfurt am Main, Germany

Phone: +49 69 6603-1149; Fax: +49 69 6603-2149
E-Mail: <mailto:anirudh.purayil@vdtma.org>; Internet: <https://www.cimac.com/>
Information on CIMAC Congress: <https://www.cimaccongress.com/>



<https://www.linkedin.com/company/cimac-international-council-on-combustion-engines>

https://twitter.com/CIMAC_Central

Register of Associations at the Local Court Frankfurt am Main No. VR 16353
President: Prof. Dr. Jin, Donghan
Secretary General: Peter Müller-Baum

This email may contain material that is confidential, privileged and for the sole use of the intended recipient. Any review, reliance or distribution by others or forwarding without express permission is strictly prohibited. If you are not the intended recipient, please contact the sender and delete all copies. CIMAC herewith excludes any liability for third-party information recognizably contained in this e-mail or its attachments. Third-party information does not necessarily reflect the opinion of CIMAC.
We take the protection of your personal data and its confidential treatment very seriously. We process your personal data as part of your association membership and/or your business relationship with us. General information on the extent of the processing of your personal data and your data protection rights is available at cimac.com/privacy-policy.html.

2019 | 166

Interpretation of Ignition and Combustion in a Full-Optical High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) Engine using 3D-CFD Methods

11 - Basic Research & Advanced Engineering - Technologies, Materials & Tools for Future Engines

Stephanie Frankl, Technical University of Munich

Stephan Gleis, Technical University of Munich
Georg Wachtmeister, Technical University of Munich

This paper has been presented and published at the 29th CIMAC World Congress 2019 in Vancouver, Canada. The CIMAC Congress is held every three years, each time in a different member country. The Congress program centres around the presentation of Technical Papers on engine research and development, application engineering on the original equipment side and engine operation and maintenance on the end-user side. The themes of the 2019 event included Digitalization & Connectivity for different applications, System Integration, Electrification & Hybridization, Emission Reduction Technologies, Low Carbon Combustion including Global Sulphur Cap 2020, Case Studies from Operators, Product Development of Gas and Diesel Engines, Components & Tribology, Turbochargers, Controls & Automation, Fuels & Lubricants as well as Basic Research & Advanced Engineering. The copyright of this paper is with CIMAC. For further information please visit <https://www.cimac.com>.

ABSTRACT

In times of global climate change, reducing the CO₂ and methane emissions is a main goal of internal combustion engine research. Because of the better C to H-atom ratio compared to diesel, the use of natural gas as main fuel seems a good way to lower the CO₂ emissions. Mid-size marine engines therefore often operate in a dual fuel combustion mode, where the port fuel injected gas is ignited by a small amount of direct injected diesel. This classic dual fuel mode leads to extended methane emissions due to flame quenching effects in lean combustion. One way to avoid this is direct injection of the natural gas at high pressures and burn it in a diffusive combustion mode, similar to diesel combustion. Additionally, this operating mode allows compression ratios as high as used in diesel engines because there is no danger of knocking or glow ignition.

In a 42-month research project, a high-pressure dual-fuel combustion was developed for high-speed marine engines using the new high-pressure gas-diesel injector of Woodward L'Orange. The investigations were conducted on a fully optical accessible 4.8l displacement single-cylinder research engine that was developed at the chair of internal combustion engines (LVK) of the Technical University of Munich. The engine has an optical access from the bottom of the combustion chamber through an elongated optical piston (Bowdich-design), as well as a lateral optical access in the upper part of the cylinder liner. In order to have the possibility to examine engine combustion processes under conditions relevant for modern combustion engines, the engine design enables high cylinder peak pressures. Until now, operating points with peak pressures above 190bar and indicated mean effective pressures above 20bar are possible.

The engine uses natural gas as main fuel, injected just before top dead center at high pressures up to 350bar and ignites by a diesel pilot spray. The combustion development took place supported by experiments in a full-optical, one-cylinder engine. To minimize the experimental efforts a CFD-model was set up which was validated using measurements of the in-cylinder pressure, Particle-Image-Velocimetry (PIV) data of the flow field as well as high-speed-recordings of the soot luminescence.

For the HPDF combustion, the influence of the diesel pilot injection timing relative to the gas injection was examined. With a highspeed camera, the soot luminescence of the diesel pilot as well as the diffusive gas combustion was recorded. Furthermore, the combustion chamber was illuminated through the lateral optical access with a flashlamp in order to visualize the liquid phase of the diesel pilot injection. Through fine dispersed droplets of sealing oil (used to prevent gas leakage inside the injector) the gas jet is also visible through the illumination with the flashlamp.

In order to describe the fuel injection and combustion in the simulation, the CFD-model uses a Lagrange-droplet approach to model the liquid spray injection of the Diesel-pilot and detailed chemistry to model the combustion on a 120-degree sector of the cylinder. The Chalmers-53 mechanism for N-Heptane is used to describe the ignition and combustion for both fuels. The natural gas enters the computational domain via mass flow boundary. The injection rate is the result of measurement of the Dual-Fuel injector.

This work shows the influence of the diesel pilot injection timing relative to the gas injection in the experiment and how the validated CFD-model is used to interpret the high-speed images of the HPDF-Combustion in order to understand the mechanisms of the ignition of the gas jets and the following flame propagation. This is important at the edges of the optical measurement techniques, for example at a very early pilot ignition where no soot-light emissions are visible no more or at stratified charge combustion, where the gas burns almost premixed with very low production of soot.

1 INTRODUCTION

In times of global climate change, reducing the CO₂ and methane emissions is a main goal of internal combustion engine research. The higher hydrogen to carbon ratio compared to diesel fuel makes natural gas - as a primary fuel - seem to be a promising way of lowering CO₂ emissions. Mid-size marine engines therefore often operate in a dual-fuel combustion mode, where port fuel injected gas is ignited by a small amount of direct injected diesel (Otto-Gas Dual-Fuel Engine). The compression ratio of these engines is limited due to knocking effects. This classical dual-fuel mode also results in extended methane emissions due to flame-quenching effects in lean combustion. Especially in lean-burn Otto-gas-engines with low exhaust gas temperatures, the methane aftertreatment is difficult. [1]

One way to avoid methane emissions is the direct injection of natural gas at high pressures. The diffusive combustion mode has no such restrictions and also allows compression ratios as high as in diesel engines, because there is no danger of knocking or glow ignition, so that a greater engine efficiency and specific power is permitted. [2]

In this work, a diffusive high-pressure dual-fuel (HPDF) combustion is investigated in a single-cylinder optical engine using a newly developed dual-fuel injector [3]. Methane is used as main fuel and diesel for the pilot ignition. There are many degrees of freedom for the combustion tuning. For example:

- Amount, pressure of the pilot and gas injection
- Relative timing between the gas and diesel injections
- Cylinder flow field available air mass, temperature and maximum compression pressures
- Orientation of the pilot and the gas nozzles

In this paper, the influence of the relative timings of the fuel injections on HPDF ignition and combustion are investigated, supported by a new built up computational fluid dynamic (CFD)-model.

2 STATE OF THE ART

Due to the necessarily high injection pressures, the gas jets are highly under-expanded as they enter the combustion chamber. In the mid-1990s Patric Ouellette was one of the first to research into high-pressure gas injection for heavy-duty vehicle engines. He carried out optical spray-chamber experiments with Schlieren imaging and numerical studies with the KIVA-II code on under-expanded gas jets and their ignition behaviour [4]. Yu et al.

investigated under-expanded gas jets using planar-laser-induced-fluorescence techniques [5]. Both of them showed, that under-expanded jets build a complex shock structure in the core, which influences break-up and mixing subject to the cylinder pressure.

One of the first high-speed combustion images of an under-expanded gas jet ignited by pilot diesel was made by Imhof, using a rapid compression expansion machine. He used two separate single-hole injectors for gas and diesel, and then measured exhaust gas emissions. Compared to diesel combustion, the high-pressure gas dual-fuel combustion yields less NO_x and soot while the heat-release rates are similar. [6–8]

Based on Ouellette's work, McTaggart-Cowan's group developed a "high-pressure direct injection" dual-fuel injector for diesel and high pressurised gas in collaboration with Westport Power Inc. for heavy duty vehicle applications [9]. Several studies were conducted using this injector, regarding particle matter reduction, premixed combustion and injection strategies [10, 11, 12].

A similar form of this injector was used in the optical and numerical study by Hatzipanagiotou et al. [13]. Here, high-pressure dual-fuel combustion was monitored in an optical single-cylinder engine using simultaneous soot luminescence and OH*-chemiluminescence imaging. The results were also used to develop a CFD model for the engine, using a PDF-CO ignition model. The phenomenological steps in the dual-fuel combustion were shown, as well as the fact that the developed CFD model was capable of supporting the combustion system development [13].

The requirements for CFD simulations of a dual-fuel combustion are manifold. The liquid injection of the pilot diesel and the combustion of the two fuels have to be modelled. The complex supersonic flow of the gas injection has to be correctly described, because it influences the mixing and consequently the ignition.

There are many works that deal only with high-pressure gas jets, such as [13–15], most of them using Large Eddy Simulation (LES) for fundamental research. Huang et al. [16] have developed LES methods for simulating a pilot-ignited directly injected gas engine. Although they were able to obtain a good level of agreement with the experiments, the computational costs were enormous.

Consequently, the authors of this present work prefer a Reynolds-averaged Navier-Stokes (RANS) approach, which is far less resource-

consuming. The text below gives an overview of the experimental and numerical setups, describes the validation of the CFD model and discusses the results of a study of various pilot diesel injection timings

3 EXPERIMENTAL AND NUMERICAL SETUP

This work investigates the timing of the pilot fuel's influence on HPDF combustion in a high-speed marine engine. To investigate combustion, a fully optically accessible research engine was developed and constructed at the Chair of Internal Combustion Engines (LVK) of the Technical University of Munich [1].

This engine is further optimised and partly re-constructed to fulfil the requirements of HPDF combustion, such as the provision of the high-pressure gas and the second fuel system for the pilot diesel.

The experimental data is further used to develop, verify and validate a CFD model of the HPDF combustion. This provides the opportunity for optimising the combustion further at low costs and helping to interpret the more complex combustion modes.

3.1 The optical single-cylinder engine

The optically accessible 4.8 litre single-cylinder engine at the Institute of Internal Combustion Engines of the Technical University of Munich was initially developed and built in a project dealing with the causes of methane emissions in lean-burn gas engines [1]. The engine's bore and stroke are 170 x 210 mm respectively, and the main optical access to the combustion chamber is through an elongated optical piston based on the well-known "Bowditch design" [17] (Figure 1). A lateral optical access to the combustion chamber directly below the cylinder head was created in order to enable the in-coupling of a laser light sheet or the illumination of the combustion chamber with a torch (flash lamp).

A new version of the optical piston was developed, and the goal of a fatigue-resistant design of all the metal parts up to a cylinder peak pressure of 300 bar was achieved by extensive design optimisation using FEM simulation. The cup-shaped piston bowl is machined directly in the quartz glass insert that provides optical access to the combustion chamber, so that the volume inside the piston bowl is also accessible for laser sheet or illumination by torch (flash lamp). The cylindrical shape of the piston bowl was chosen because it was considered to be the best compromise between obtaining a realistic combustion chamber volume and undistorted optical access to the measurements.

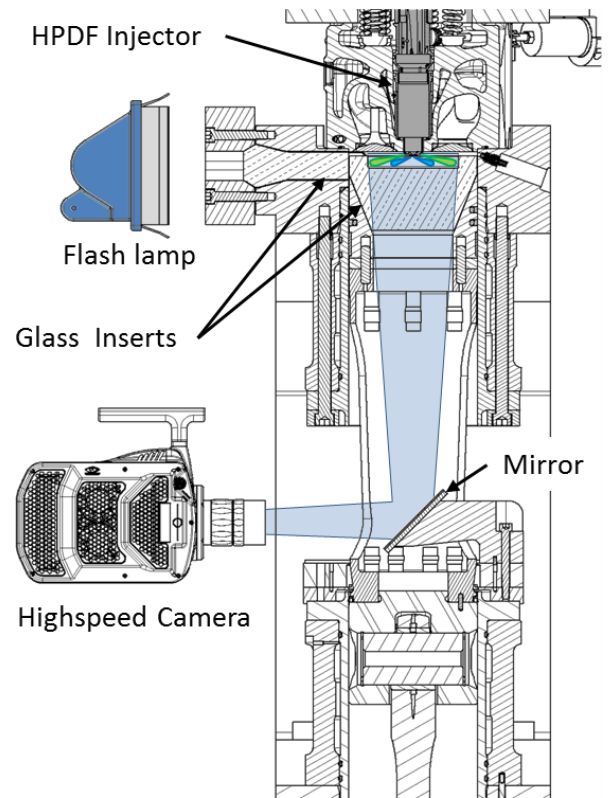


Figure 1: Schematic description of the optical engine

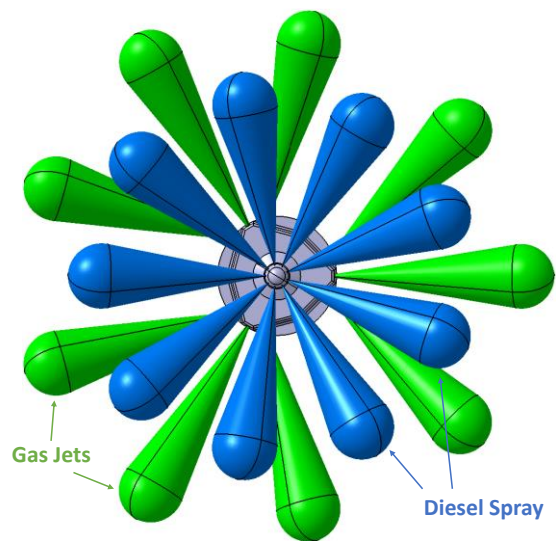


Figure 2: Spray targeting of the nozzle used in the HPDF injector; the gas jets (green) are arranged in triplets

The geometric compression ratio in the HPDF configuration is 17:1, including the crevice volumes, which are larger than with a conventional metal engine.

The injector used for the HPDF experiments is a newly developed dual-fuel injector from Woodward l'Orange [3]. This injector combines a standard

common-rail diesel injector with an independent electro-hydraulically actuated high-pressure gas injector. It is designed as a multi-needle injector, employing one needle for the diesel injection and three gas needles. The gas holes are arranged around the pilot diesel as triplets. The jet layout can also be seen in Figure 2. The injector is placed at the centre of the cylinder axis.

For the experiments shown here, the gas pressure was set to 300 bar, and the diesel rail pressure to 1000 bar. The gas mass was kept constant at 320mg per injection for all points, and the diesel pilot injection was set to a mass of 30mg per injection. These settings result in an indicated mean effective pressure of 12 bar, and the pilot diesel accounts for almost 8% of the heat release in this part-load operating point. The engine is operated at a speed of 750 rpm in the experiments. As in most optical accessible engines, the number of continuous fired working cycles is restricted due to window soiling and the lack of cooling in the upper part of the optical piston. In this case, 50 continuously fired cycles are recorded at an imaging frequency of 22.5 kHz (\cong image distance of 0.2° CA between two images) using a CMOS high-speed camera (Phantom v2011). The combustion chamber volume is illuminated by a flash lamp in order to visualise the liquid fuel spray.

In order to validate the results of the CFD charge exchange simulation and to evaluate the influence of the in-cylinder flow field on the HPDF combustion, the flow field was examined using the PIV (Particle Image Velocimetry) measurement technique. The flow field was examined at 10°CA before ignition top dead centre in a horizontal light-sheet plane 15 mm below the cylinder head, which is at about half the height of the piston bowl.

The light sheet from the double-pulse-laser (Litron Nano x.y) is directed into the combustion chamber through the lateral optical access, and the particle images are taken from the bottom using a CMOS double-frame camera (PCO x.y) (see Figure 1). Titanium dioxide particles with a diameter of approx. 6 μm (d_{50}) performed best as seeding particles. The particles are dispersed into pressurised air using a fluidised-bed type aerosol generator, and the aerosol is mixed into the charge air about two metres before the engine. The measured velocity fields lie in the centre of the piston bowl, 15 mm below the fire deck and are taken 10°CA before top dead centre (TDC). In Figure 3, a typical raw image is shown. The contours of the cylinder head in the background of the light-sheet plane are clearly visible and complicate the evaluation of particle shift. In order to eliminate these background contours, a background image obtained by simply averaging

the particle images of 100 consecutive recorded cycles was subtracted from the raw image.

The resulting image contained only the particle information and almost no background intensities, and was therefore well suited for calculating the velocity field using a standard PIV evaluation routine using the cross-correlation algorithm as described in [18].

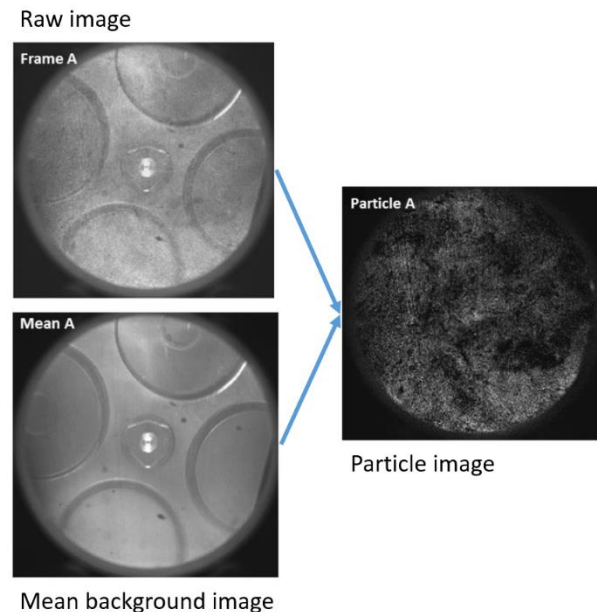


Figure 3: Procedure for preparing images for PIV

3.2 CFD modelling

The CONVERGE CFD commercial software package is used for CFD modelling. The model consists of two parts:

- Complete cylinder geometry, including intake and exhaust channels for the gas-exchange simulation (cold flow)
- Sector model, one third of the combustion chamber including a third of the injection nozzle for the simulation of the injection, ignition and combustion (hot flow)

To validate the CFD model, the cold flow gas exchange is simulated first, then the results of the gas-exchange simulations are mapped onto the sector model as the initial conditions of the combustion simulation.

CONVERGE uses orthogonal grids of a user defined base size, which can be either automatically refined via “automated mesh refinement” (AMR) or by so-called “fixed embeddings” (FE). This enhances the efficiency and accuracy of the calculations. [19]

Both models use the k-epsilon turbulence modelling for the Reynolds-averaged Navier-Stokes equations [20]. The Peng-Robinson gas model describes the real gas behaviour [21]. The “pressure implicit with splitting of operator”-algorithm (PISO) is used [22] to solve the transport equations.

The glass inserts of the lateral access and the piston cause many crevice volumes. These are too small to be modelled in detail. Therefore, their collective volumes are represented in an elongated piston junk volume to maintain the correct compression ratio and wall heat transfer areas.

3.2.1 Gas-exchange simulation

For the gas-exchange simulations the inlet and exhaust pressures (experimentally measured and averaged over the 50 cycles) are used for boundary conditions. These are resolved in 0.1°CA steps; for smaller timesteps, values are automatically calculated via linear interpolation. [19]. The elongated piston and the connecting rod deform under the high pressures that arise due to the Bowditch split piston design of the optical access. This influences the effective compression ratio. To consider this, a simple model for the piston motion is introduced:

$$s(\varphi, p) = \left[1 - \cos(\varphi) + \frac{r}{4l} (1 - \cos(2\varphi)) \right] \cdot r - \frac{dz}{dp} \quad (1)$$

with

$$\frac{dz}{dp} = 0,7 \frac{\mu\text{m}}{\text{bar}} \quad (2)$$

being the deformation of piston and connecting rod.

The base size of the computational grid is 4mm for the gas exchange simulations with FEs for the intake and cylinder and additional temporary AMRs during valve motion. The AMR is triggered by gradients of velocity and temperature. The resulting minimum cell size for the gas change simulation is 0.5mm.

At least three cycles are calculated for each point in order to obtain a result independent of the initial conditions. The third cycle is used for comparisons with measurements and for generating mapping files for the combustion simulation.

3.2.2 Combustion simulation

For combustion simulation, the model takes advantage of the 120° symmetry of the

configuration. The flow field is mapped from the cold flow as mentioned above and shown in Fehler! Verweisquelle konnte nicht gefunden werden..

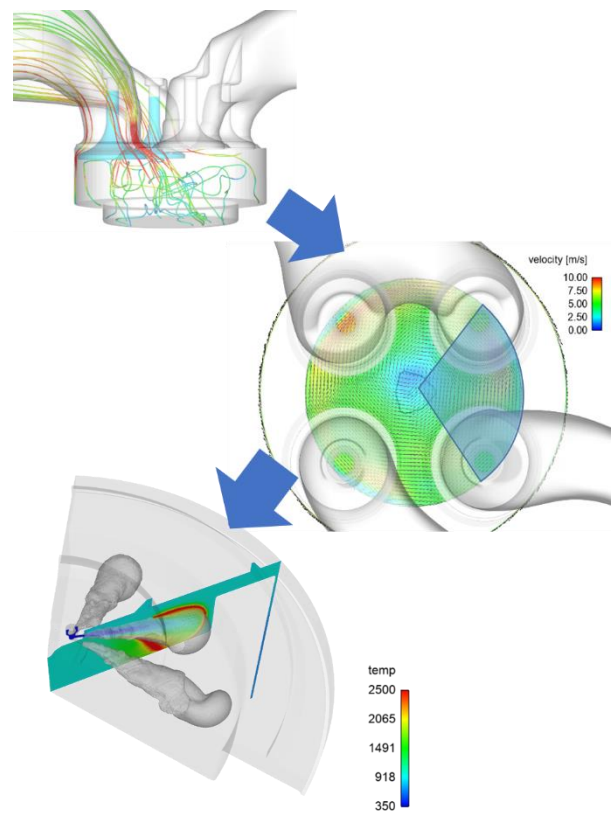


Figure 4: Process description of the model

For the combustion itself, the detailed chemistry solver SAGE [23] is employed. As reaction mechanism, the Chalmers n-heptane mechanism with 42 species and 168 reactions is used; this has been proven to provide good results for diesel combustion in previous studies [24, 25]. Jud has also shown that it provides acceptable results for methane ignition and combustion [26].

A Lagrangian-Eulerian method is used to model the diesel injection. Here, the liquid phase is approached via computational droplets in a Lagrangian frame, which evaporate into an Eulerian gas-phase. Kelvin-Helmholtz-Aerodynamic-Cavitation-Turbulence (KH-ACT) and Rayleigh-Taylor models are used for the primary and secondary spray break-up [23, 27]. Collision is considered using the no-time-counter (NTC) model described in [28].

To ease the combustion modelling, the gaseous fuel used is pure methane (CH₄). It is injected via a mass flow boundary placed 1mm above the seat of the gas needle. This is necessary due to vorticity effects in the sack hole of the gas injector.

The base size for the combustion modelling grid is 1mm while the smallest resulting computational cell has an edge length of 0.0625mm due to the active use of AMR and FE during injection and combustion. The AMR is triggered by gradients of velocity, temperature and methane concentration. FEs are used for the wall boundaries, the diesel spray and the gas injector.

4 VALIDATION OF THE CFD MODEL

The measured pressure curves and the PIV-measured flow field are used to validate and verify the cold flow simulations. To ensure the model works independently from inlet pressures, valve timings, etc., cases of various engine speeds and valve timings were simulated and compared to the measurements. In Figure 5 two measurements (so called snapshots (Sn)) are compared; Sn1739, with 750rpm and a Miller valve timing, and Sn 256, 600rpm and valve timing for maximum filling of the cylinder volume (maxF).

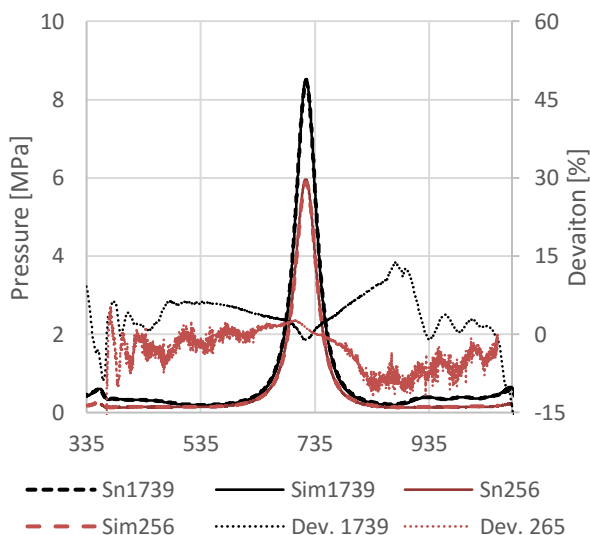


Figure 5: Comparison of two configurations: Sn1739, 750rpm and a Miller valve timing, and Sn 256, 600rpm and maxF valve timing

As shown in Figure 5, the deviation between simulation and experiment is very low over most of the cycle. As the piston approaches the closed-cycle TDC the pressure difference is within 2%. The maximum deviation is only apparent at the gas-exchange TDC. For the fact that the pressures are low at that point it could be an effect of the not correctly represented crevice flows due to the geometry simplification or uncertainties of the pressure sensor at low pressures.

For the PIV measurement comparison with the simulation, 100 measured velocity fields of the same operating point were averaged and plotted against the CFD result (Figure 6). It can be seen

that the simulation model provides very good results. The values of the velocities in simulation and experiment lie within the same range. The centre of the swirl can be seen as it deviates slightly from the geometric centre of the cylinder.

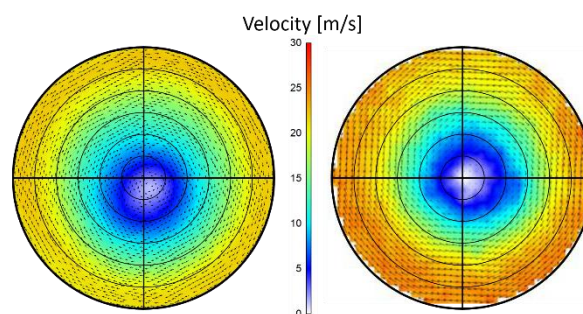


Figure 6: Comparison of PIV experimental (right) and CFD results (left) of a Miller Valve Timing 10°CA before TDC, 15mm below the fire deck

To show the combustion model's ability to predict various configurations, a study of the influence of the relative timing of gas and diesel injections on combustion was performed.

The resulting pressure curves and the heat-release rates (HRR) of the experiment and the simulation are compared in Figure 7. For the experiments, the last 30 of each 50 fired cycles were averaged for comparison. The cases are named after the start of energising (SOE) times of the pilot diesel injection.

The ignition delay times of the pilot diesel in the HRR match very well. The ignition times of the gas jets also fit the experimental data, whereas the absolute values of the HRR are overestimated.

Hence, the simulated pressure values are higher than the measurements. One possible explanation lies in the measured gas injection rates, which are measured using gaseous nitrogen against a constant pressure. The methane injection faces a variable backpressure in the engine. The mass flow through the injector depends on the cylinder pressure, particularly at the beginning and end of the injection, when the pressure ratio is below the critical pressure ratio.

Although the absolute values differ in terms of peak pressures and absolute heat-release rates, the simulation predicts the tendencies very well.

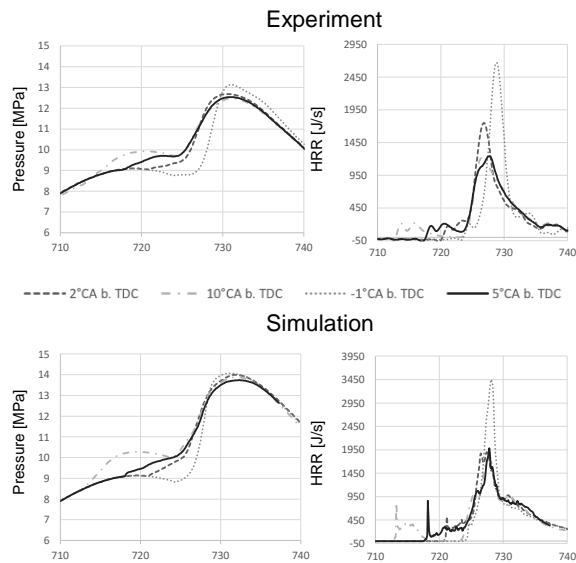


Figure 7: Pressure curves and heat release rates of the SOI variation in experiment and simulation. The cases are named after the SOE times of the diesel pilot

5 RESULTS

As shown in the previous chapter, the CFD model is able to predict the gas exchange and the flow field, as well as display the HPDF combustion and ignition.

The used injector nozzle has 9 holes for the gas injection and another 9 holes for the liquid Diesel injection. The gas jets are arranged in triplets; each triplet has a “left-hand”, a “middle” and a “right-hand” jet. The left and the right-hand jets are referred to as “outer” jets. In the injector nozzle used, the diesel holes are evenly distributed, so that they direct between the gas jets.

For the evaluation, the highspeed-images from the experiment are overlaid with isosurfaces from the simulation results.

5.1 The reference point

The reference point (SOE 2°b.TDC in Figure 7) is chosen so that gas is injected in at roughly the moment when the full diesel spray has ignited, as can be seen in the upper part of Figure 8. The diesel injection starts at 719.7°CA and the gas follows at 721.5°CA. When spreading, the gas jets are captured by the diesel flame and start burning. This can be seen in the middle of Figure 8. To make it easier to evaluate the recordings, they are overlaid with isosurfaces of temperature at 1800K (orange) and methane concentration at 0.02 (green) from the simulation results. The liquid phase of the diesel is shown in the images as blue droplets.

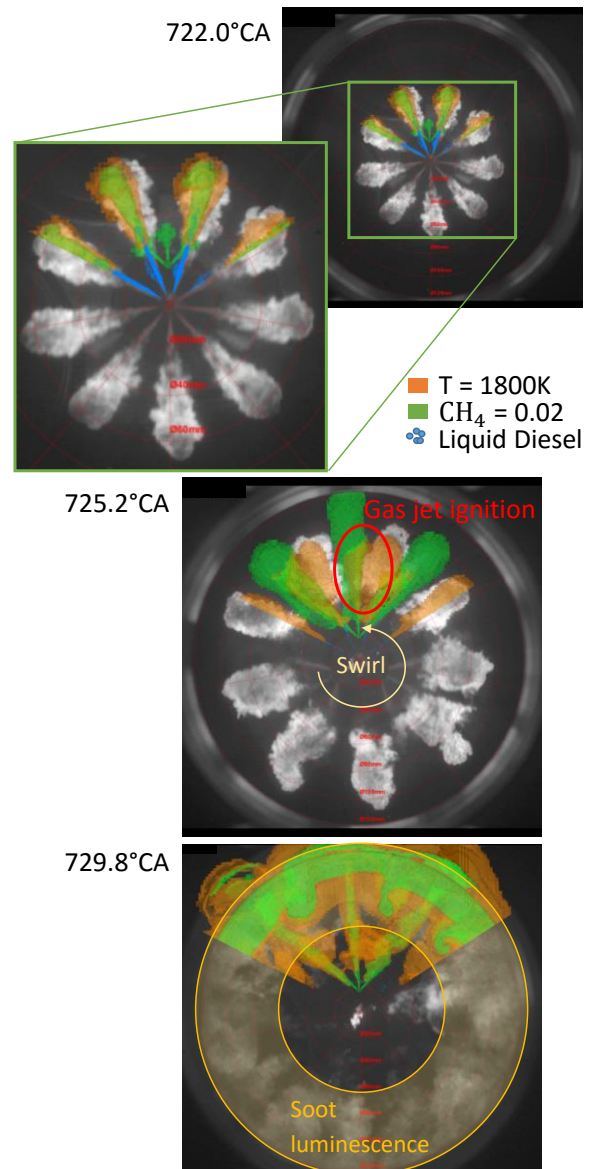


Figure 8: Experimental and simulation results of the reference point

The ignition of the gas jets is not uniform, due to the fact that the swirl in the piston bowl (see also Figure 6) twists the combustion products from diesel combustion in a counter-clockwise direction into the middle and the left-hand gas jet. Consequently, these two jets ignite earlier than the right-hand one. The ignition is located at the flanks of the gas jets. Therefore, the tips of the jets build up some amount of gas-air mixture until they become captured by the flame from behind. When the gas jets ignite, the flame spreads through the premixed areas first, which results in a small “premixed peak” in the HRR. Then the diffusive combustion dominates.

The shape of the HRR (2°b.TDC in Figure 7) supports the assumption that the main combustion regime is diffusive. The HRR of the gas combustion

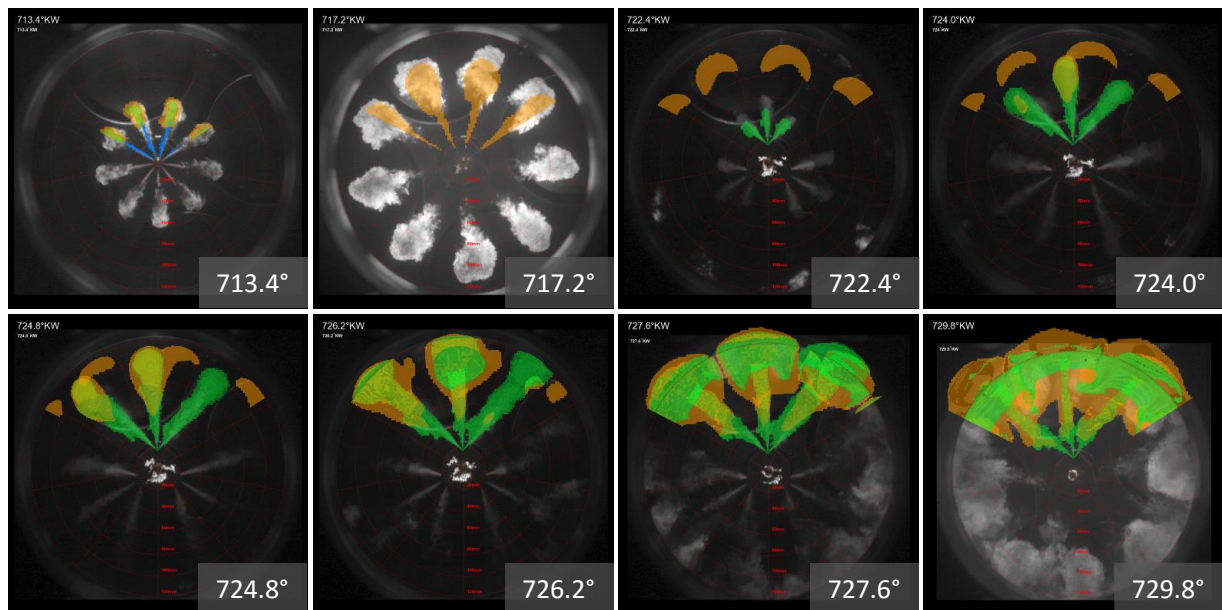


Figure 9: Early pilot combustion at various crank angles, Diesel pilot SOE 10°CA b. TDC

is in the form of two “camel humps”. The first hump is the slightly premixed combustion of the gas-air mixture mentioned above, the second one is a result of the diffusive gas combustion. The latter is accompanied by a bright soot illumination in the high-speed images (marked in the lower part of Figure 8). In order to increase the percentage of diffusive combustion, the SOE of the diesel pilot is shifted to earlier times in the following. An ignition of the tips of the gas jets has been proven to lead to predominantly diffusive combustion, as shown in [29].

5.2 Early pilot injection – diffusive combustion

Experiments with the pilot spray only have shown that the combustion products of the diesel accumulate at the outer radius of the piston bowl and are rotated by the swirl. In order to ignite the tips of the gas jets, the start of injection (SOI) of the pilot diesel is set in such a way that the diesel combustion ends before gas injection starts (Figure 9). This is defined via the soot luminescence in the high-speed images.

When the gas jets reach the combustion products, the tips of the two outer jets directly target on the gaps between the combustion products. The middle jets directly hit the remains of the diesel jets which had been oriented to the right of them and enflame. The next gas jet igniting is the left jet, 0.8°CA later. Through the counter-clockwise rotating swirl and the geometric layout, the hot products from the diesel combustion are blown in direction of the left-hand jets and away from the right-hand ones

The right-hand jets have the longest time to mix with the surrounding air, their combustion starts at 726°CA, which is 2.6°CA later than the middle jets.

In the simulation, can be seen that the mixing rates of gas with air - as combustion further progresses - are not high enough to establish a steady state diffusive flame. Therefore, the gas accumulates at the edge of the piston bowl, from where it deflagrates quite slowly after the gas injection stops; this can also be seen in the HRR. After the “gas peak”, it has the smallest falling gradient of all compared cases (Figure 9). This very diffusive combustion leads to high soot production.

5.3 Late pilot injection – slightly premixed combustion

McTaggart-Cowan et al. and Faghani et al. have shown in their studies that “slightly premixed combustion” reduces particle matter emission for heavy-duty truck engines [10, 12]. Consequently, the goal in this case is to achieve some amount of premixed gas combustion that produces less soot.

One possibility for obtaining a degree of premixed combustion is to ignite the gas jets from behind. As Ouellette has already shown in his work [4], the tip vortex of the gas jet benefits the mixing of gas and air. The high-speed images show that the tip vortices are very stable and keep facilitating air into the gas when the jets reach the piston bowl wall.

To use this effect, the pilot injection is shifted 2.5°CA after the start of the gas injection so the tip vortices gain the time to penetrate far into the combustion chamber before ignition. The diesel jets ignite the moment the gas jets hit the piston

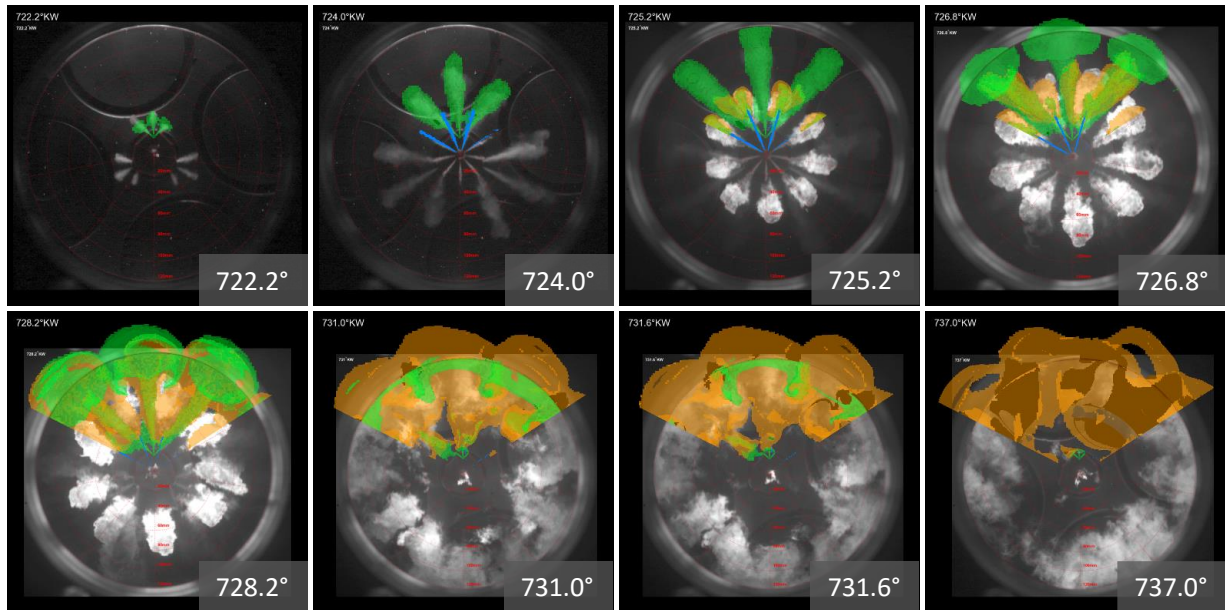


Figure 10: Late pilot injection, Diesel pilot SOE 1°CA after TDC

bowl wall (Figure 10). Through the geometry of the spray targeting, the diesel jets between the outer and the middle gas jets are closer to the outer ones. Simulation and experiment show that the diesel jets are dragged even closer to the outer gas jets through the suction effect of the fast flow. Therefore, the middle gas jets enflame 1°CA after the outer ones.

The shape of the heat release mostly consists of one high peak. This is characteristic of a premixed combustion.

The images also show less gas accumulation at the piston walls than in the previous cases. Nevertheless, the burnout is similarly low. This indicates that there is still some combustion which is dependent on diffusive mixing effects.

6 CONCLUSION AND OUTLOOK

6.1 Conclusion

A fully optical single-cylinder engine was modified in order to study HPDF combustion and parallel a 3D-CFD model for the single-cylinder engine was developed. To examine the flow field and validate the CFD simulations, high quality PIV-images were taken. The simulation model of the charge exchange shows good accordance with the PIV measurements.

To investigate the HPDF combustion, high-speed recordings of the soot luminosity and MIE-Scattering were made. Liquid diesel injection, gaseous methane injection, ignition and combustion were modelled and validated in the CFD model. Its results were compared against a

SOI-study of the diesel pilot timing. The model can predict tendencies in pressure curves and heat-release rates, though it overestimates the absolute values from the measurements. Nonetheless, it is suitable for simulating conditions that lie beyond the cases investigated in the experiment.

For a predominantly diffusive combustion, the gas jet has to be ignited at the tip of the jet by means of very early pilot injection, whereas an ignition from the sides or behind leads to varying amounts of premixed combustion. The later the SOI of the diesel, the bigger becomes the peak in the HRR which indicates the premixed combustion.

The experiments show that the gas that collects on the piston bowl walls forms soot when combusted. To avoid this, the mixing of the gas jets and surrounding air has to be optimised, either through geometrical modifications, increased gas injection pressure or swirl flow. This can be done using the validated CFD model and will be the subject of future investigations.

6.2 Application for future HPDF engine development

Unlike the classical Otto-Gas engines the HPDF combustion process works with diesel-typical compression ratios and therefore has a similar degree of efficiency as usual diesel engines. Using the Woodward L'Orange injector, the possibility to run on 100% Diesel remains [3]. Through the diffusive or load stratification combustion modes, the combustion is very robust (at high and low speeds) and produces (almost) no unburned carbon hydrate emissions at low rounds per minute for there is no lean extinction. Exemplary exhaust

gas measurements in a thermodynamically engine have shown that in HPDF mode, the IMO3 greenhouse gas emission limits can be met at all points based on the E3 cycle and can reach up to 27bar indicated mean effective pressure [30].

Due to the many degrees of freedom a pure experimental design of the combustion development gets very expensive. The validated CFD model reduces these efforts beforehand, supporting the design of experiments. The in-cylinder-flow of existing (diesel) engines can be analysed and fitting spray targeting as well as injection timings can be developed in order to get high fuel efficiency and low pollutant and CO₂ emissions. This for example enables “retro-fitting” of existing diesel engines without any restrictions due to knocking or glow ignition effects. With the aid of the validated CFD model the HPDF combustion can also easily be adapted to other engine sizes with reduced expensive experimental efforts.

7 DEFINITIONS, ACRONYMS AND ABBREVIATIONS

AMR	Adaptive Mesh Refinement
CA	Crank Angle
FE	Fixed Embedding
HPDF	High-Pressure Dual-Fuel
HRR	Heat-Release Rate
KH-ACT	Kevin-Helmholtz-Aerodynamic-Cavitation-Turbulence
LES	Large Eddy Simulation
NTC	No-Time-Counter method
PISO	Pressure Implicit with Splitting of Operator
PIV	Particle Image Velocimetry
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes
SOE	Start Of Energising

SOI	Start Of Injection
TDC	Top Dead Centre

8 ACKNOWLEDGEMENTS

This study formed part of the “FlexDi-Flexible Antriebe für die Schifffahrt” project, which was funded by the German Federal Ministry of Economic Affairs and Energy in the framework of “Maritime Research Programme”. The project was carried out in collaboration with Woodward L’Orange, MTU Friedrichshafen, and the Chair of Thermodynamics of the Technical University of Munich. Their support is gratefully acknowledged. The author also wants to thank CONVERGE CFD for providing the software, licences and technical support necessary for conducting the simulations.

9 CONTACT

Stephanie Frankl, M.Sc.
Technical University of Munich
Department of Mechanical Engineering
Chair of Internal Combustion Engines
Schragerhofstraße 31, 80992 Munich, Germany
frankl@ljk.mw.tum.de

10 REFERENCES

- [1] B. Korb, M. Prager, and G. Wachtmeister, “Ursachen und Reduzierung der CH₄-Emissionen in Biogasmotoren; Teilvorhaben 1: Abschlussbericht zum Forschungsprojekt,” Technische Universität München; Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen, Jan. 2016.
- [2] Forschungszentrum Jülich GmbH, Ed., *STATUSTAGUNG MARITIME TECHNOLOGIEN: Tagungsband der Statustagung 2018*. Jülich, 2018.
- [3] C. Senghaas, M. Willmann, and I. Berger, “New Injector Family for High Pressure Gas and Low Caloric Liquid Fuels,” in *29th CIMAC Congress Vancouver 2019*.
- [4] P. Oullette, “Direct Injection of Natural Gas for Diesel Engine Fueling: A Thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of doctor of philosophy,” Dissertation, Department of Mechanical Engineering, University of British Columbia, Vancouver, Canada, 1996.
- [5] J. Yu, V. Vuorinen, O. Kaario, T. Sarjovaara, and M. Larmi, “Visualization and analysis of

- the characteristics of transitional underexpanded jets,” *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 44, pp. 140–154, 2013.
- [6] D. Imhof, “Visual Combustion Studies for environmentally friendly marine diesel and gas engines,” Dissertation, Laboratory of Energy and Combustion (ECO), Kyushu University, Japan, Kyushu, 2013.
- [7] D. Imhof, D. Tsuru, H. Tajima, and K. Takasaki, “High-pressure natural gas injection (GI) marine engine research with a Rapid Compression Expansion Machine,” in *13. CIMAC Shanghai*.
- [8] K. Takasaki, D. Tsuru, R. Ueno, S. Asano, and Shota Kikunaga, Ryo Sasaki, Junichi Hirata, Stefan Mayer, “Visual study on GI (Gas high-pressure Injection) combustion for highly efficient gas engine,” in *15th Conference “The Working Process of the Internal Combustion Engine*, pp. 403–415.
- [9] Westport, *HPDI 2.0 Injector*. [Online] Available: <http://www.westport.com/is/core-technologies/hpdi-2#what-is-hpdi-2.0>. Accessed on: Dec. 13 2017.
- [10] G. P. McTaggart-Cowan, K. Mann, J. Huang, N. Wu, and S. R. Munshi, “Particulate Matter Reduction From a Pilot-Ignited, Direct Injection of Natural Gas Engine,” *Proceedings of the ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, vol. 2012, p. 427, 2012.
- [11] S. R. Munshi, G. P. McTaggart-Cowan, J. Huang, and P. G. Hill, “Development of a Partially-Premixed Combustion Strategy for a Low-Emission, Direct Injection High Efficiency Natural Gas Engine,” *Proceedings of the ASME 2011 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, pp. 515–528, 2011.
- [12] E. Faghani *et al.*, “Effect of Injection Strategies on Emissions from a Pilot-Ignited Direct-Injection Natural-Gas Engine- Part II: Slightly Premixed Combustion,” *SAE Technical Paper*, vol. 2017, 2017.
- [13] A. Hatzipanagiotou *et al.*, “Numerical and optical analysis of heterogeneous gas combustion with diesel pilot ignition in a commercial vehicle engine,” *International Journal of Engine Research*, vol. 19, no. 1, pp. 109–119, 2017.
- [14] A. Hamzehloo and P. G. Aleiferis, “Numerical modelling of transient under-expanded jets under different ambient thermodynamic conditions with adaptive mesh refinement,” *International Journal of Heat and Fluid Flow*, vol. 61, pp. 711–729, 2016.
- [15] V. Vuorinen *et al.*, “Large-eddy simulation of highly underexpanded transient gas jets,” *Physics of Fluids*, vol. 25, no. 1, p. 16101, 2013.
- [16] J. Huang, G. McTaggart-Cowan, and S. Munshi, “Large-eddy simulation of direct injection natural gas combustion in a heavy-duty truck engine using modified conditional moment closure model with low-dimensional manifold method,” *International Journal of Engine Research*, 146808741878285, 2018.
- [17] F. W. Bowditch, “A New Tool for Combustion Research A Quartz Piston Engine,” *SAE Technical Paper*, vol. 1961, 1961.
- [18] M. Raffel, C. E. Willert, S. T. Wereley, and J. Kompenhans, *Particle Image Velocimetry: A Practical Guide*. Dordrecht: Springer, 2007.
- [19] *CONVERGE: Convergent Science*, 2018.
- [20] Z. HAN and R. D. REITZ, “Turbulence Modeling of Internal Combustion Engines Using RNG κ - ϵ Models,” *Combustion Science and Technology*, vol. 106, no. 4-6, pp. 267–295, 1995.
- [21] D.-Y. Peng and D. B. Robinson, “A New Two-Constant Equation of State,” *Ind. Eng. Chem. Fund.*, vol. 15, no. 1, pp. 59–64, 1976.
- [22] R.I. Issa, “Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting,” *Journal of Computational Physics*, vol. 62, no. 1, pp. 40–65, 1986.
- [23] P. K. Senecal *et al.*, “Multi-Dimensional Modeling of Direct-Injection Diesel Spray Liquid Length and Flame Lift-off Length using CFD and Parallel Detailed Chemistry,” *SAE Technical Paper Series*, vol. 2003, no. 2003-01, 2003.
- [24] P. K. Senecal *et al.*, “Predictions of Transient Flame Lift-off Length With Comparison to Single-Cylinder Optical Engine Experiments,” *J. Eng. Gas Turbines Power*, vol. 136, no. 11, p. 111505, 2014.
- [25] P. K. Senecal, E. Pomraning, K. J. Richards, and S. Som, “Grid-Convergent Spray Models for Internal Combustion Engine CFD Simulations,” *ASME 2012 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*, vol. 2012, p. 697, 2012.
- [26] M. Jud, G. Fink, and T. Sattelmayer, “Predicting Ignition and Combustion of a Pilot Ignited Natural Gas Jet Using Numerical Simulation Based on Detailed Chemistry,” *Proceedings of the ASME 2017 Internal*


Combustion Engine Division Fall Technical Conference, vol. 2017, 2017.

- [27] S. Som and S. K. Aggarwal, "Effects of primary breakup modeling on spray and combustion characteristics of compression ignition engines," *Combustion and Flame*, vol. 157, no. 6, pp. 1179–1193, 2010.
- [28] D. P. Schmidt and C. J. Rutland, "A New Droplet Collision Algorithm," *Journal of Computational Physics*, vol. 164, no. 1, pp. 62–80, 2000.
- [29] G. Fink, M. Jud, and T. Sattelmayer, "Influence of the Spatial and Temporal Interaction Between Diesel Pilot and Directly Injected Natural Gas Jet on Ignition and Combustion Characteristics," *J. Eng. Gas Turbines Power*, vol. 140, no. 10, p. 102811, 2018.
- [30] M. Boog *et al.*, "Entwicklung eines High Pressure Dual-Fuel-Konzepts für schnelllaufende drehzahlvariable Motoren in Schiffsantrieben," in *11. Dessauer Gasmotorenkonferenz*.

A3: Investigation of ammonia and hydrogen as CO2-free fuels for heavy duty engines using a high pressure dual fuel combustion process

Copyright Clearance Center RightsLink®

Home Help Email Support Sign in Create Account

 **SAGE** Publishing

Investigation of ammonia and hydrogen as CO2-free fuels for heavy duty engines using a high pressure dual fuel combustion process
Author: Stephanie Frankl, Stephan Gleis, Stephan Karmann, et al
Publication: International Journal of Engine Research
Publisher: SAGE Publications
Date: 10/30/2020
Copyright © 2020, © SAGE Publications

Gratis Reuse

If you are a SAGE journal author requesting permission to reuse material from your journal article, please note you may be able to reuse your content without requiring permission from SAGE. Please review SAGE's author re-use and archiving policies at <https://us.sagepub.com/en-us/inam/journal-author-archiving-policies-and-re-use> for more information.

If your request does not fall within SAGE's reuse guidelines, please proceed with submitting your request by selecting one of the other reuse categories that describes your use. Please note, a fee may be charged for reuse of content requiring permission. Please submit a ticket through the SAGE Permissions Portal if you have questions.

[BACK](#) [CLOSE WINDOW](#)

© 2020 Copyright - All Rights Reserved | Copyright Clearance Center, Inc. | [Privacy statement](#) | [Terms and Conditions](#)
Comments? We would like to hear from you. E-mail us at customer-care@copyright.com

Investigation of ammonia and hydrogen as CO₂-free fuels for heavy duty engines using a high pressure dual fuel combustion process

International J of Engine Research

1–13

© IMechE 2020

Article reuse guidelines:

sagepub.com/journals-permissions

DOI: 10.1177/1468087420967873

journals.sagepub.com/home/jer



Stephanie Frankl , Stephan Gleis, Stephan Karmann, Maximilian Prager  and Georg Wachtmeister

Abstract

This work is a numerical study of the use of ammonia and hydrogen in a high-pressure-dual-fuel (HPDF) combustion. The main fuels (hydrogen and ammonia) are direct injected and ignited by a small amount of direct injected pilot fuel. The fuels are injected using a dual fuel injector from Woodward L'Orange, which can induce two fuels independently at high pressures up to 1800 bar for the pilot fuel and maximum 500 bar for the main. The numerical CFD-model gets validated for hydrogen-HPDF with experimental data. Due to safety issues at the test rig it was not possible to use ammonia in the experiments, so it is modelled using the numerical model. It is assumed that the CFD-model also gives qualitative correct results for the use of ammonia as main fuel, so a parameter study of ammonia-HPDF is made. The results for the hydrogen-HPDF show, that hydrogen can be used in the engine without any further modifications. The combustion is very stable, and the hydrogen ignites almost immediately when it enters the combustion chamber. The results of the ammonia combustion indicate, that the HPDF combustion mode can handle ammonia effectively. It seems beneficial to inject the ammonia at higher pressures than hydrogen. Also pre-heating the ammonia can increase the combustion efficiency.

Keywords

Dual fuel, hydrogen, ammonia, CFD-simulation, high pressure dual fuel

Date received: 28 July 2020; accepted: 21 September 2020

Introduction

In times of climate change, marine propulsion systems must also increasingly reduce climate-damaging emissions. This requires innovative approaches. One way to reduce CO₂ emissions in internal combustion engines is to substitute diesel through natural gas but this often goes hand in hand with methane emissions from incomplete combustion, especially when using premixed lean gas combustion. Methane is 28 times more harmful to the climate than CO₂.¹ A method to lower the methane emissions significantly is the use of a high-pressure direct injection of the gas into the combustion chamber.² This gas is ignited by a small amount of pilot fuel, usually diesel and burns in diffusive combustion mode. The direct injection of the gas and the diffusive combustion enable significantly higher compression ratios and better efficiencies than premixed gas engines.

Several research groups in Canada, Japan and Europe have been working on the topic and have been able to demonstrate that methane emissions can be

significantly reduced with the combustion process compared to classic natural gas engines.^{3–7} Nevertheless, the combustion of natural gas still produces CO₂ as combustion product. Therefore there is a need for fuels that do not contain carbon in their molecular structure. Two promising fuels – which fulfil this requirement and therefore do not produce CO₂ emissions – are hydrogen and ammonia. Table 1 gives an overview over Hydrogen and Ammonia compared to methane.

In a 4-year, publicly funded project, a dual-fuel injector was developed that is capable of injecting other fuels in addition to natural gas next to the auto igniting pilot fuel.^{11,12} This injector has been used experimentally for

Institute of Internal Combustion Engines, Technical University of Munich, Munich, Germany

Corresponding author:

Stephanie Frankl, Institute of Internal Combustion Engines, Technical University of Munich, Schragenhofstr. 31, Munich 80992, Germany.
Email: stephanie.frankl@tum.de

Table 1. Fuel properties using data from.^{8–10}

	Hydrogen	Ammonia	Methane
Critical temperature	33.145 K	405.4 K	190.6 K
Critical pressure	12.964 bar	113.33 bar	46.1 bar
Normal boiling point	20.369 K	239.823 K	111.2 K
Phase state at 500 bar and 350 K	Supercritical	Liquid	Supercritical
LHV [MJ/kg]	120	18.8	50.0
Flammability limits (λ)	0.14–10.0	0.71–1.58	0.59–2.0
Adiabatic flame temperature	2110 K	1800 K	1950 K

the above mentioned methane-diesel and methanol-diesel dual fuel combustion in a full optical accessible internal combustion engine in previous works.^{13,14} From the experiments a numerical CFD-model was developed and validated.^{15,16} A derived model is used in this study to investigate the substitution of methane through hydrogen or ammonia in order to find out whether these fuels are suitable for HPDF-engines.

Hydrogen as fuel

Hydrogen is the simplest element. Combined with oxygen it reacts to water. The stored energy of hydrogen can be used through combustion with an oxygenator or electro chemical reaction in a fuel cell. Fuel cells require a very high purity of hydrogen (99.97%, ISO14687: 2019¹⁷) whereas combustion engines can cope with lower purities of hydrogen. Hydrogen already has a long history as standard fuel for rocket engines, especially lower and middle stages as the Vulcan engine since over 30 years, usually used in liquid state together with liquid oxygen.¹⁸

However, in internal combustion engines also has been research.¹⁹ For example BMW built up one of the first cars with an internal combustion engine running on hydrogen in 2006.²⁰ There was also research for stationary hydrogen gas engines in Austria.²¹ But the use in premixed Otto-combustion process is very challenging because of knocking or ignition because of small amounts of lubrication oil in the combustion chamber. The direct injection with diffusive combustion do not show these phenomena. Rottengruber et al. burned hydrogen in a medium bore diesel engine in the early 2000 using direct injection and auto ignition of the fuel.²² They had to heat up the intake air to about 70°C to enable a stable combustion process – which reduced the efficiency of the engine.

Nowadays the majority of hydrogen is produced via steam reformation from fossil natural gas (grey hydrogen). If hydrogen is produced using carbon capture, it is referred as blue hydrogen. However, it can also be produced by electrolysis using power from regenerative energies like wind, water or solar plants – which makes it interesting as climate-friendly future fuel (green hydrogen).^{23,24}

The easy hydrogen is to produce, the hard the storage of hydrogen is. Usually it is stored either in gaseous

state at high pressures, or as cryogenic liquid. Both ways require a great amount of energy to be realized. Gaseous hydrogen has a comparably low volumetric energy content, which limits the range of the vehicles or ships due to huge tank sizes. In liquid state, the volumetric energy content is better, but the liquid state of hydrogen requires very low storage temperatures of 20K – which is also a big challenge, especially on vehicles or ships.

Further approaches to hydrogen storage are metal hydrides as used in the type 212 submarine used by the Italian military. The disadvantages of this storage method are the high weight and the very slow removal of the hydrogen. Therefore the chemical storage of hydrogen in heavier atoms is interesting. One example is methane, another – which is not based on carbon – to realize this is Ammonia.

Ammonia as fuel

Almost 50% of the world's hydrogen production is used for ammonia production.²⁵ Most of the worldwide ammonia production is used for agriculture and for this use transported and stored all around the world. In liquid state, the volumetric hydrogen-density in ammonia is higher than in liquid hydrogen²⁶ so it is often considered as hydrogen carrier. Because of the already existing infrastructure for transport and storage of ammonia, the direct use as fuel becomes interesting. It can be produced by using green hydrogen with energy from renewable sources like wind, water or solar plants. The thermo-catalysis of ammonia back to hydrogen requires a high amount of energy, so the idea of using ammonia directly as fuel is interesting.²⁶

Ammonia already has history as an engine fuel.²⁷ In times of the Second World War, Belgium used ammonia as fuel for buses in public transportation due to shortage of diesel fuel.²⁸ Also in California, US, there were cars running on ammonia due to shortage in fossil fuels. The US military conducted several studies on ammonia as fuel in order to be more fuel independent.²⁹ Ammonia is also necessary for the selective catalytic reduction for meeting the NOx-emission regulations for diesel engines and in form of urea already aboard of many internal combustion systems. Even in low concentrations, ammonia is toxic and very harmful to the



Figure 1. The optical engine. Small picture up left is the glass piston bowl, in the lower left picture the cylinder head with the injector from below; in the middle the lateral window can be seen. The picture on the right shows the arrangement of the two cameras one with the image intensifier (blue).

environment, so special safety precautions must be taken when handling it.³⁰

Methodology

Structure of the HPDF-combustion

In this work, the fuels are injected using a dual fuel injector from Woodward L'Orange, which can induce two fuels independently at high pressures up to 1800 bar for the pilot fuel and maximum 500 bar for the main fuel.¹² In the HPDF combustion, the two fuels can be injected individually and independent from each other. This enables premixing, staged combustion as well as diffusive combustion.

The used numerical model is validated using data from the optical accessible single cylinder test engine described in Gleis et al.¹³ and Frankl and Gleis.¹⁵ Developed for methane-diesel dual fuel it is extended for the fuel combinations hydrogen/diesel and ammonia/diesel in this work. The experimental setup as well as the numerical model are described in the following.

Experimental setup

The numerical model used in this work is derived from previous works of the authors using the commercial software package CONVERGE CFD.³¹ The basis of this model is a full optical accessible single cylinder engine (see Figure 1) in the Bowditch-design.³² It is derived from a marine MTU 4000 Diesel engine, with 170 mm bore and 210 mm stroke. It has a flat cylinder head with valve masking for swirl generation. To have best optical access the piston bowl is cylindrical shaped. The used compression ratio is 17. The inlet valves use a

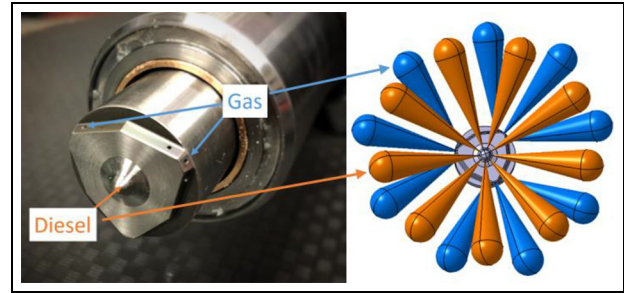


Figure 2. Image of the injector Nozzle and spray arrangement.

Miller timing, to intensify the swirl at the injection point.

The engine is equipped with the Woodward L'Orange HPDF dual fuel injector.¹² The Injector is centrally mounted in the cylinder head. The injector nozzle has nine holes for main fuel and nine holes for the diesel pilot injection (Figure 2). The diesel and the gas injection work independently from each other. For the experiments used in this work, injection pressures for the main fuel are 300 bar and 500 bar, for the diesel side 1000 bar and 1200 bar.¹⁴

The engine is equipped with two optical accesses; one lateral access where a LED-flash lamp is placed for illumination of the liquid spray phases, and a glass insert in a prolonged piston. Via a mirror and a beam splitter two cameras simultaneously record the flame luminosity and the OH-chemiluminescence signal.

The engine is built for maximum cylinder pressures of 300 bar and is run at 750 rpm max. The cooling of the optical piston is mainly through air ventilation, so in order not to overheat the glass, the maximum of fired cycles in a row is limited to 70. A more detailed description of the experimental setup can be found in.^{13,14}

Experiments were made using methane and hydrogen as main fuel and diesel as pilot fuel ignition source.¹⁴ Due to safety issues at the test rig it was not yet possible to use ammonia in the experiments so it is only modelled using the numerical model described below.

Numerical model

A numerical model was build up and validated using data for Methane-Diesel HPDF combustion in Frankl and Gleis¹⁵ and Frankl et al.¹⁶ using the commercial software Converge CFD. In this work, the model is validated with hydrogen HPDF-combustion experiments, afterwards further reduced, and simplified to a 40°-sector to reduce the computational effort of the parameter variation study.

The 120° and the 40° models are initialized with a flow-field from a full-scale simulation model, which is initialized on experimental measured data. How the models are related to each other is shown in Figure 3.

For the initial conditions for sector models, a full-scale charge-exchange (without combustion) simulation

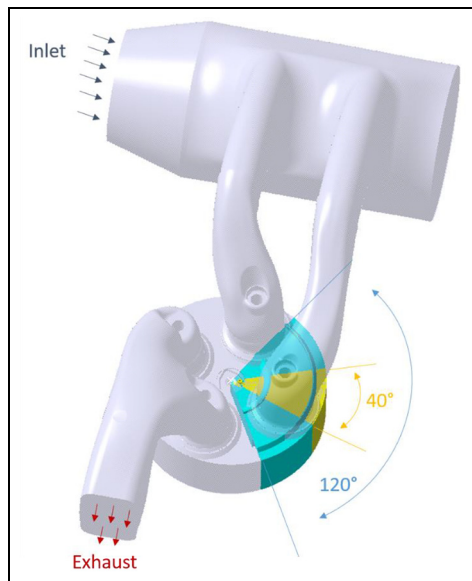


Figure 3. Simulation domains for generating the initial conditions, the 120° sector and the simplified 40° sector model.

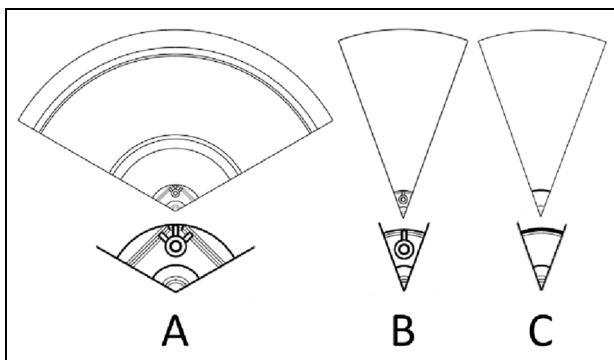


Figure 4. Top view of the used sector models for the numerical simulations including a closer view of the injector part: (a) the 120° model including gasnozzle geometry, (b) 40° model including gasnozzle, and (c) 40° model for liquid fuel injection only.

is made consisting of two whole cycles. Its boundaries are taken from measurements of the optical engine; the intake air temperature and pressure as well as the exhaust pressure and temperature. The flow field is initialized with a start solution with similar boundary conditions from previous work so using the second simulated cycle for combustion initialization is sufficient.

The flow field is described using the Reynolds-averaged-Navier-Stokes equations with the $k-\epsilon$ -RNG turbulence model and the Redlich-Kwong equation of state. The liquid spray injection is modelled using Lagrangian particles, with the Kevin-Helmholtz-Rayleigh-Taylor (KHRT) breakup model and the ‘no time counter’ (NTC) method for droplet collision. The injection rate is given by injection rate measurements of the diesel side of the injector. For a gaseous main fuel injection, a

mass flow boundary is used. For this purpose, the lower part of the gas side of the injector nozzle is included into the model. For the liquid ammonia injection the liquid spray is also modelled using Lagrangian particles, the KHRT model and NTC collision.

The combustion is calculated using the SAGE Detailed Chemical Kinetics Solver with reaction mechanism resulting from a combination of the GRI3.0³³ for methane and the Chalmers53 n-heptane mechanisms. The Chalmers 53 has been giving good results for methane-diesel HPDF in^{34,35} and the GRI3.0 is validated in literature – giving satisfying results for the laminar burning velocity in ammonia combustion.^{10,36}

The hexagonal grid is of 1x1x1mm base size using fixed embeddings for the wall boundaries and liquid injection as well as adaptive mesh refinement for the velocity and temperature gradients. The edge length of the resulting minimum cell size in the domain is 0.0625 mm. Exemplary images of the grid at two crank angles can be found in the appendix.

Further reduction of the numerical model

In order to reduce the computational effort the 120° sector model was reduced to a 40° sector model. The gas injector is modified to have just one hole for the gas injection instead of three (see Figure 4). This changes the flow conditions in the injector sack hole and has an influence on the emerging fuel jets. So, a comparison of the results of the 120° and the 40° of the same reference point was made and compared against experimental results to examine the influence of the 40° simplifications.

Figure 5 shows an exemplary comparison between the heat release rate (HRR) from the experiment, the 120° sector (A) and the 40° sector model (B) for a methane-diesel HPDF case. As can be seen, the diesel combustion is almost identical for the 120° and the 40° sector and very close to the measured data.

For the main fuel combustion there is a slightly later start of ignition and a higher premixed peak. This is a result of the different flow conditions in the nozzle sack-hole because of the reduction from three holes in the 120° case to one hole in the 40° case. A second source of inaccuracy is the fact, that the ‘outer’ gas jets in the 40° sector are assumed as orientated to the rotation centre, which is not correct (see Figure 5) – so there arises a deviation from the angle for six of the nine jets where they hit the pilot diesel. The ignition of the middle gas jet is nevertheless very similar to the ignition in the 40° sector, as can be seen in the lower part of Figure 5. For a better comparison, the soot luminescence image is plotted next to the simulation. From the end of the injection, the HRR curves show a very similar behaviour for both sectors.

For the validation with the experimental HPFD-combustion data, the 120° is chosen because of the higher accuracy. For the following comparisons

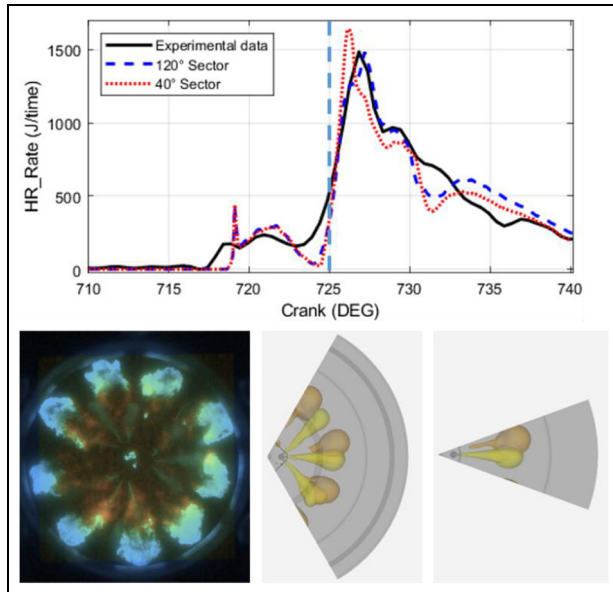


Figure 5. Heat release rate of the 120° and 40° sector models compared to the experimental measurement (average of 10 cycles) and qualitative comparison of the gas ignition at 725°CA (20th cycle in experiment, 120° sector and 40° sector models).

between hydrogen and ammonia HPDF combustion as well as the understanding of the qualitative influence of parameters on ammonia ignition, the 40° sector is a sufficient choice.

Hydrogen high pressure dual fuel combustion

Table 2 gives an overview about the reference hydrogen HPDF-combustion point. The exact start of injection (SOI) for both fuels are taken from the high-speed images. In the following, the results of the hydrogen HPDF simulations are shown and compared to the experimental data.

The HPDF-combustion is extraordinary stable compared to premixed Dual-Fuel combustion. Figure 6 shows the variance of the cycle fluctuations in the measured pressure curves of diffusive hydrogen, methane and diesel combustion of the same load in the optical engine compared to a premixed dual fuel combustion (methane-hydrogen mix with pilot ignition) in the same engine.

It can be seen that from 356° to 360,7°CA the cylinder pressure variance

$$Var = \frac{\sum (p - p_{mean})^2}{(n - 1)}$$

(p cylinder pressure, n number of cycles) of the diffusive combustion cases is very similar and lies between 0.7 and 3.6. This is the time range, where the pilot combustion takes place. For the diesel case, the variance stays at this level for the main combustion. For the methane HPDF combustion, the variance has a peak 364.1°CA.

Table 2. Data of the reference point.

Inlet pressure	6.5 bar
Exhaust pressure	5.2 bar
Main fuel	500 bar
Pilot fuel	1200 bar
Fuel injection temperature	380 K
SOIPilot	715.5°CA
SOI main fuel	720°CA

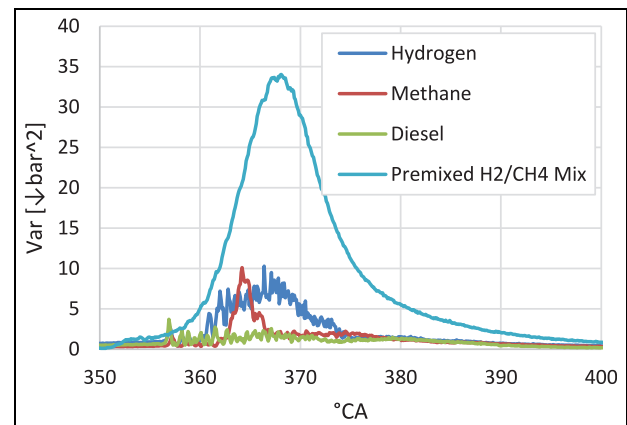


Figure 6. Variance of in-cylinder pressure for hydrogen and methane HPDF and diesel combustion with pilot injection as pre-injection.

This is where the ignition of the gas jets happens. Due to inhomogeneity in the jet penetration, sometimes a jet ignites earlier or later than others do. When all methane jets are enflamed, the variance level lies just a little bit above the diesel-only combustion.

The variance of the hydrogen combustion stays comparable high for the whole time of the main combustion and returns to similar values as in the diesel or methane case after the injection has ended at 372°CA. To eliminate the variation factor, the images of the hydrogen HPDF experiments are averaged over 25 cycles for the comparison with the simulation results.

Figure 7 shows the comparison of the pressure curves and the HRR from experiment and CFD-simulation. The ignition delay time of the diesel injection in the simulation is about 1°CA longer than in the experiment. Following that, the hydrogen ignition is also 1° later than in the experiment. The simulation nevertheless overestimates the pressure curve with a maximum deviation of 9% at top dead centre (TDC).

Figure 8 shows the OH*chemiluminescence images compared to the OH-isosurfaces in the simulation results at the same crank angle. At 362°CA the ignition of the hydrogen jets can be detected. The hydrogen ignites immediately when it hits the hot pilot combustion products, very close to the injector. It can be seen that the pilot combustion rotates counter clockwise because of the engines swirl. Therefore, the pilot jets are between the gas jets when the gas injection starts. The

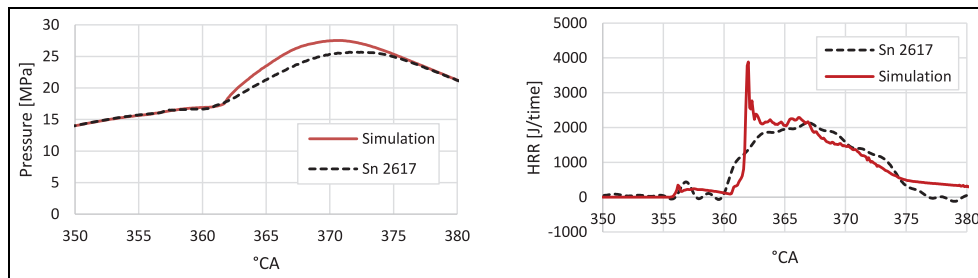


Figure 7. Pressure curves and heat release rates from experiment and simulation.

simulation shows this effect very well. At 364°CA the hydrogen has reached the cylinder bowl and the jets are redirected along the wall. The burning areas become wider and are blown away by the swirl in a counter clockwise direction.

Looking at the flame lift-off length at 364° and 366°CA in the simulation, the OH-production seems to start immediately when the hydrogen enters the combustion chamber. This effect can also be detected in the OH*-chemiluminescence images. As shown above (see Table 1) Hydrogen has very wide flammability limits and a very high laminar flame speed. Although the hydrogen jet enters the chamber at supersonic speed, the flame is able to spread upstream in the thin shear layer between jet and surrounding air.

Also for a fuel with very wide flammability limits like hydrogen, the heat release with HPDF combustion is limited by mixing of air and fuel, which can be seen in the broadening of the OH*-chemiluminescence signal, as well as in the OH-isosurfaces in the simulation. Some of the hydrogen gathers at the piston bowl walls, which reacts after the injection has stopped (from 371.5°CA on – not shown, but visible in the HRR in Figure 7).

The simulation shows deviations from the experiment especially in the HRR and pressure curve whereas the 3D results show good agreement with the experimental images. For the diesel injection, it is very difficult to match the experimental data for various reasons. First, the injector used, is a prototype-injector for research purposes. The diesel side of the injector is designed for full load diesel combustion. For the smallest quantities used (about 1%–2% of the energy content), the needle is operated in the ballistic range. In the needle seat there is a small geometric deviance from manufacturing of the prototype nozzle used, leading to an uneven opening cross section.

This is visible in the jet pattern of the pilot spray. Some of the diesel jets do almost not penetrate into the combustion chamber as shown in the left picture in Figure 9. Therefore, also the hot combustion products that work as ignition source for the hydrogen jets are not spread evenly (right picture series in Figure 9). Some of the propagating jets therefor ignite earlier than others – this effect is not great but it explains the differences in the HRR at the beginning of the hydrogen combustion.

The simulation model used in this work is not able to reproduce this asymmetry of the pilot combustion because of the assumed rotational symmetry. It would be necessary to extend the model to the complete combustion chamber geometry and to carry out a simulation of the internal nozzle flow of the diesel side of the injector – including the manufacturing deviance – in order to reproduce these effects in the CFD. This would have led to extraordinary high computational cost.

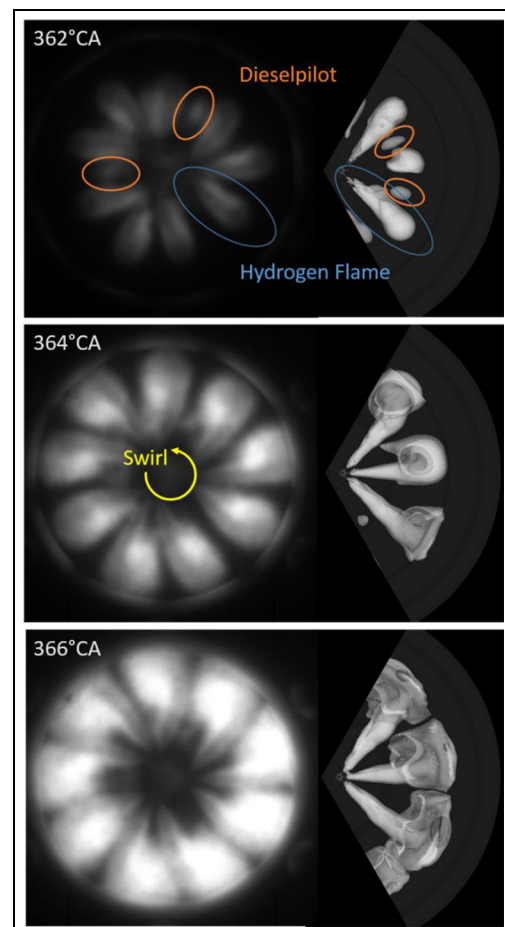


Figure 8. Comparison of the OH*-chemiluminescence image on the lefts (average of 26 cycles) and the OH-isosurfaces (0.001% mass) in the simulation on the right at the beginning of the hydrogen combustion.

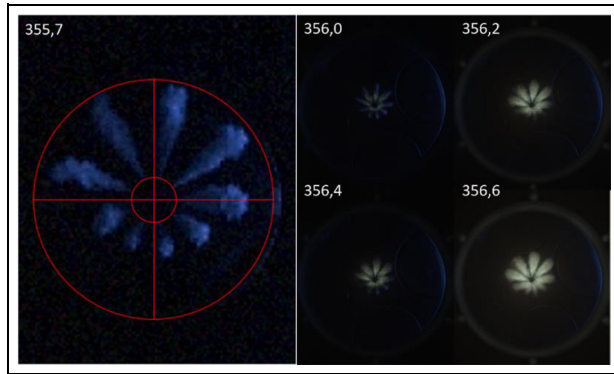


Figure 9. MIE-imaging of the diesel pilot spray (left) and flame luminosity pictures of the ignition pilot diesel (right).

There is a further uncertainty regarding the injection rates used for the hydrogen injection. The injected mass per firing is measured using a Coriolis mass flow meter. However, for safety reasons, the injection rates were measured using an injection analyser with nitrogen at constant back pressure. The curves were converted to hydrogen using material values. However, the variable combustion chamber pressure can influence both the opening and closing behaviour of the nozzle needle and the flow through the nozzle hole – which changes the effective mass flow and therefore the HRR.

Apart from the relatively small and easily explainable deviations in the global curves, the model shows a good agreement with the optical images of hydrogen combustion. Because of the fact, that the numerical model, which was initially developed for methane-HPDF, gives also good results for hydrogen as main fuel, it is assumed to also produce reasonable results for other fuel-combinations.

In the following, the results of a numerical study for hydrogen and ammonia HPDF-combustion are presented.

Numerical study of hydrogen and ammonia HPDF

The compression end pressure for the numerical study is 90 bar. This is, because the study was performed before the experimental data was gained, and therefore based on the experiments published in Gleis et al.¹³ and Frankl and Gleis.¹⁵ The first hydrogen HPDF simulation was made in order to find out, if an engine process with hydrogen in HPDF combustion would be safe.

Table 3. Reference point conditions.

Main fuel	500 bar
Pilot fuel	1000 bar
Fuel injection temperature	350 K
SOIPilot	717.5°CA
SOI main fuel	721°CA
Cylinder pressure at 715°	90 bar

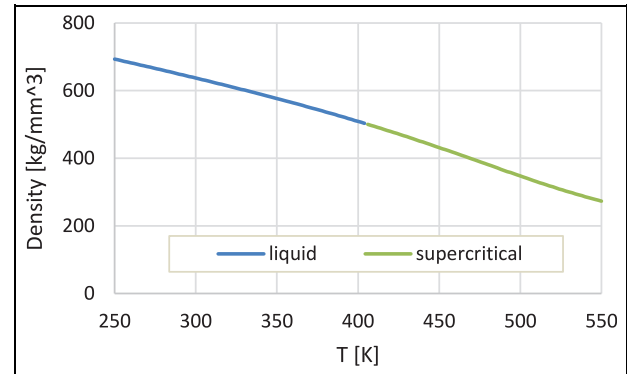


Figure 10. Fluid data of ammonia using data from.³⁷

Comparison of hydrogen and ammonia combustion

The reference point for the numerical study is derived from the work in Frankl and Gleis.¹⁵ The used parameter for the following simulation results are given in Table 3.

The simulations are initialized using a map-file for initializing the cylinder flow. The flow-field in the map file is validated with PIV-imaging from previous work.¹³

Unlike hydrogen, ammonia is known for its poor flammability – the auto ignition temperature is 903K compared to 833K for hydrogen. In the reference point conditions (ammonia at 500 bar, 350K), the ammonia is injected in liquid state as can be seen in Figure 10.³⁷ The model C from Figure 4 is used to simulate two liquid injections (pilot & fuel).

The vaporization of the ammonia additionally needs energy from the cylinder charge that is not available for ignition. Figure 11 shows the comparison of ammonia HPDF-combustion with hydrogen using the reference point timings. The heat release curves show, that the ignition of ammonia is delayed compared to hydrogen. The peak of the HRR occurs after the injection has

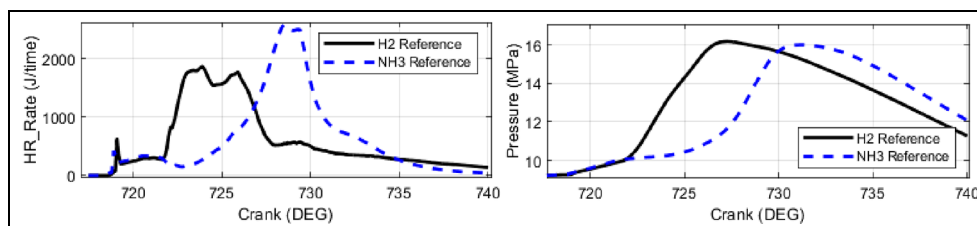


Figure 11. HRR and pressure of hydrogen and ammonia HPDF compared.

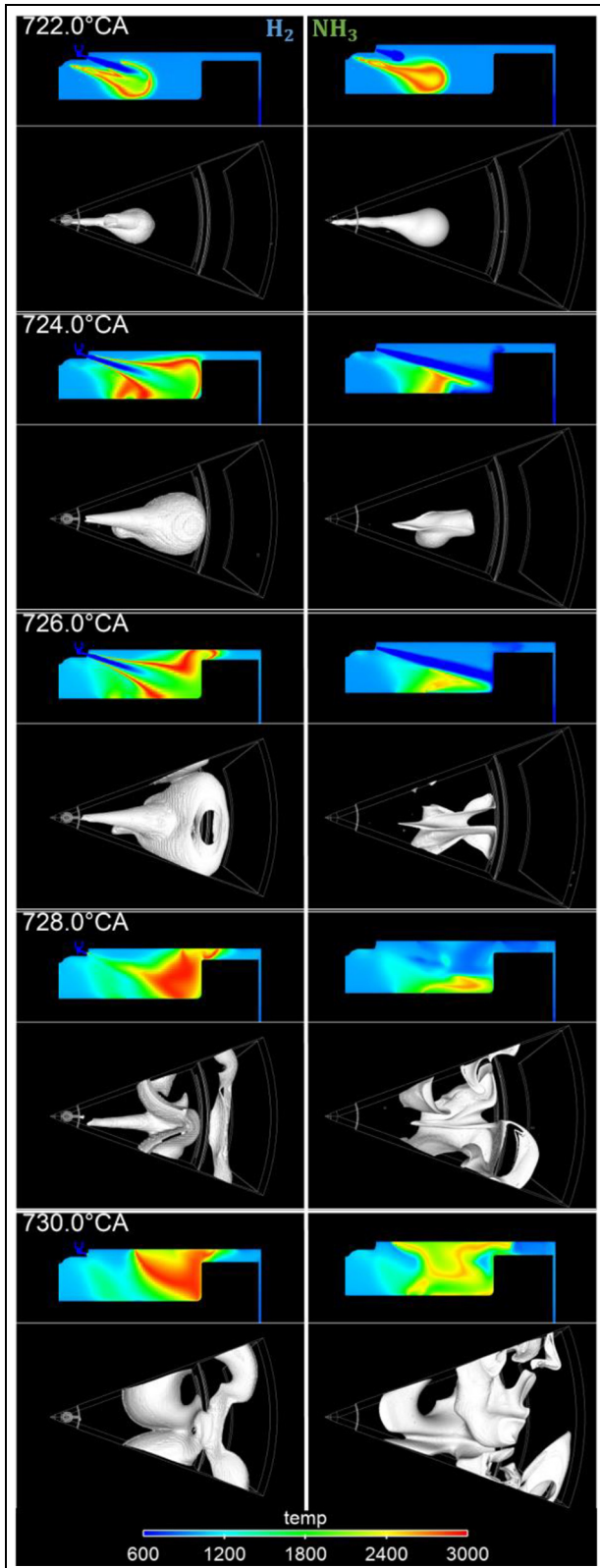


Figure 12. Topview of OH-Isosurface at 0.001% and Temperature in the $y = 0$ plane of the 40° Sector models of hydrogen (left) and ammonia.

already stopped. Nevertheless, the abrupt release generates a similar peak pressure as in hydrogen combustion.

In addition, the form of the HRR curve indicates a mainly premixed combustion, which can be confirmed

by examining the 3D data shown in Figure 12. It shows an isosurface of OH as an indicator for flame and the temperature in the $y = 0$ cut plane. The lower injection is the pilot diesel, the upper the main injection.

It can be seen, that the hydrogen almost immediately ignites when it enters the combustion chamber because it directly hits the diesel combustion. This is reasonable as this has similar been shown in Figure 8. At 722°CA there is already a flame around the tip of the hydrogen jet. In the temperature image, it can be seen that the ammonia also hits the burning diesel flame but does not yet ignite.

At 724° the ammonia as well as the burning hydrogen jets hit the piston bowl wall. The ammonia jet has displaced the combustion products of the diesel towards the bottom of the piston bowl. Only a small amount of the ammonia is reacting with the surrounding air close to the piston bowl. The laminar flame speed of ammonia is very low, and combined with the small flammability range the combustion propagates very slowly. The hydrogen also has displaced the pilot combustion products to the bottom of the bowl but a flame surrounds the hydrogen jet.

At 726° it can be seen, that in the hydrogen case, the flame blocks the hydrogen from penetrate into the crushing gap, but the ammonia almost reaches the cylinder wall. The OH surface in the ammonia case starts to grow from the bottom of the piston bowl into the areas where the ammonia jet is redirected by the piston bowl walls.

From 728° to 730°CA a much wrinkled flame develops and enflames the ammonia-air mixture. This can also be seen in the high peak in the HRR in Figure 11. In the hydrogen case, most of the combustion at this time has almost finished at 728° and the hot products are distributed in the combustion chamber. The adiabatic flame temperature of ammonia is very low compared to other fuels as methane or hydrogen, so the temperature rise through the ammonia combustion itself in the beginning is very low which in turn also does not promote faster processing of the fuel.

Parameter variation study of ammonia combustion

In the parameter variation study, the injection timing for ammonia as well as the injected mass is the same for all cases. The nozzle-hole diameter was adjusted in order to reach the desired injection pressures.

As studies in literature show, the equivalence ratio and the pressure have an influence on the ignition delay times.^{38,39} In addition, as shown above, the auto-ignition temperature of ammonia is at 903K, which is very high compared to hydrogen with 833K. A study changing the injection pressure was made at 400K injection temperature. The results are shown in Figure 13:

The ignition delay time of the ammonia combustion stays quite similar for all cases. However, the increase in the HRR gets steeper with raising pressure. This is

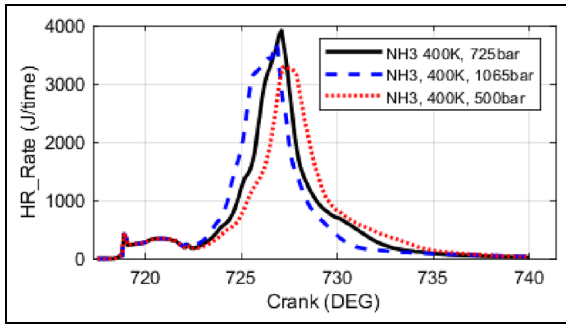


Figure 13. Heat release rates for the pressure variation study.

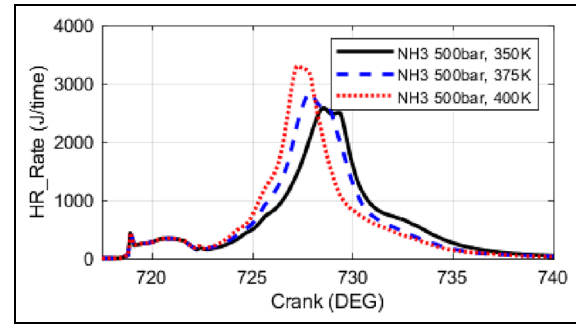


Figure 14. Heat release rate for temperature variation study.

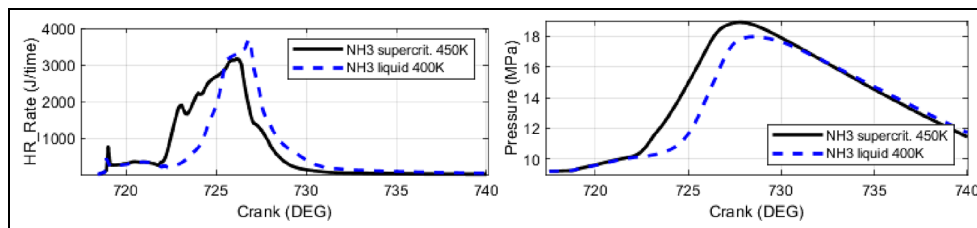


Figure 15. Influence of the phase state on the NH3-HPDF combustion.

probably due to the higher spray impulse and therefore better mixing of the ammonia with the surrounding air.

Mainly in the lower pressure cases, it can be seen, that the vaporization energy for ammonia is also quite high. A variation of the injection temperature was made to evaluate the influence of the liquid injection temperature on the heat release rate. Figure 14 shows the results of the HRR.

It can be clearly seen, that the ignition delay of the ammonia combustion is reduced with raising temperature. The lower energy content through colder injection temperatures need more time to heat up through the surrounding cylinder temperature.

The higher the fuel temperature, the higher is the resulting peak in the HRR. Liquid ammonia requires a lot of energy for vaporization. To evaluate the influence of the phase change a simulation with injection of supercritical ammonia was made. The ammonia phase changes to supercritical at 450K. The simulation used the same geometry as for hydrogen; keeping the mass flow rate constant, this results in an injection pressure of 1065 bar. In Figure 15 the result of this is shown against the NH3 liquid case at 1065 bar.

The HRR shows that the ignition starts almost immediately when the ammonia jet hits the pilot combustion products, similar to the hydrogen case. The peak in the HRR is now 0.2° before the EOI. The peak pressure in the supercritical case is also 10bar higher than in the liquid case and 0.6° earlier.

Looking at the OH concentration in Figure 16, it can be seen that, the tip of the jet in the supercritical case ignites when it hits the diesel combustion products whereas the liquid jet shoots just through it. The

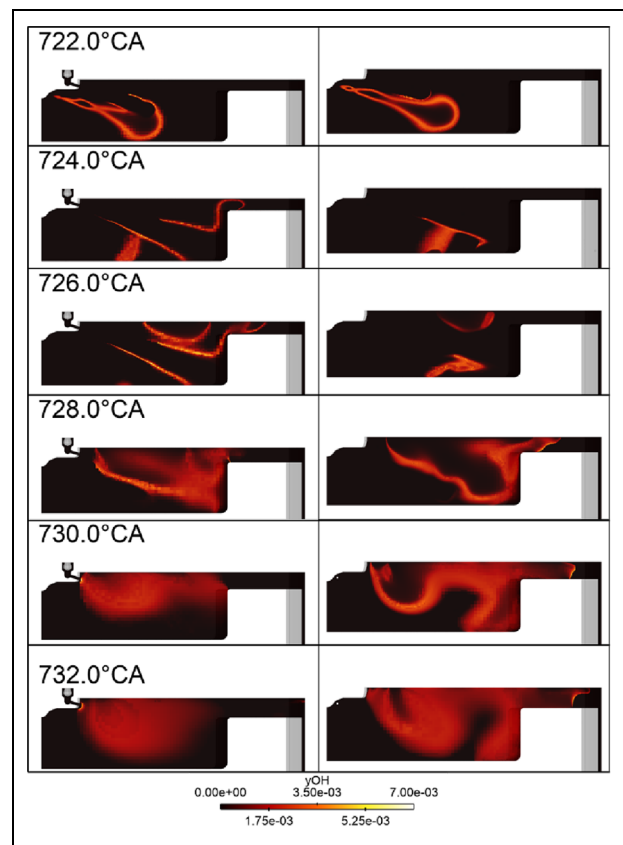


Figure 16. OH-Concentration in the supercritical (left) and liquid (right) cases.

supercritical case jets begin to burn at the sides of the flanks (726°CA). In the liquid case, the jets are redirected by the piston bowl before most of it reacts.

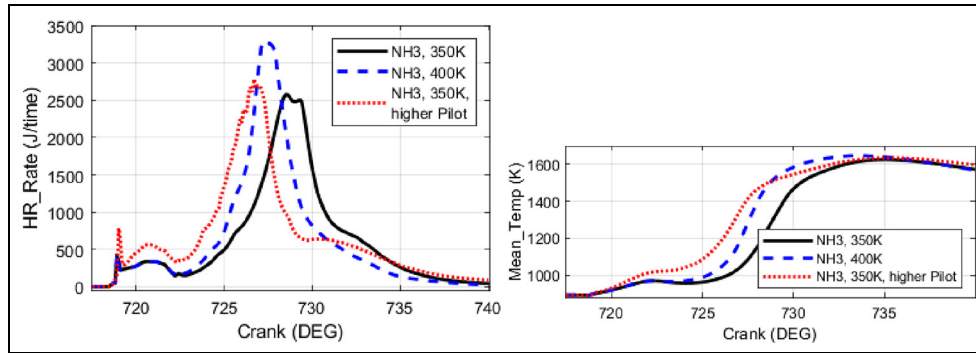


Figure 17. HRR and in-cylinder mean temperature of ammonia with a doubled pilot mass compared to the temperature variation cases.

Instead of increasing the temperature of the ammonia, one could also increase the temperature in the cylinder through a higher pilot diesel mass. Figure 17 shows the resulting HRR of a case with a doubled pilot mass. It can be seen that because of the higher temperature in the combustion chamber at the start of the main injection, the ammonia ignites earlier. Nevertheless, the afterburning is comparable to the case with the standard pilot mass whereas the higher ammonia temperature finishes earlier.

Discussion of the results

The comparison between hydrogen and ammonia combustion shows, that without any further actions, the ignition of ammonia is delayed. Reasons for this are its low flammability range, a high vaporization energy and high ignition temperature. The combustion is mainly premixed and shows a wrinkled flame propagation. To examine influences a parameter study of the ammonia combustion was made.

A higher injection pressure improves the mixing, and therefore the HRR is shifted early. Nevertheless, the used high pressures require a lot of energy for compressing the fuel and places high demands on the injection system. An easier way to enhance the combustion, which is already state of the art for ship engines running with heavy fuel oil, is preheating of the ammonia. A higher injection temperature of the ammonia leads to faster vaporization and better mixing. Nevertheless, the conversion of the fuel still happens suddenly, a shifting of the fuel injection to earlier times does not seem to make sense because of the expected high pressure rise gradients.

To examine the influence of the vaporization energy the ammonia was heated up to supercritical state. Because of the very high resulting injection pressure this is more of a theoretical case. But it shows that the shape of the curve approximates that of the heat release rate of hydrogen.

The easiest way to improve the ammonia ignition seems to be an increased amount of pilot fuel mass. Regarding the decarburization of the engine there has

to be a trade-off between efficiency of the ammonia combustion and CO₂ production of the used pilot fuel.

Conclusion

In the first part of this study a short overview about hydrogen and ammonia as fuels is given. The experimental and numerical setups of this study are presented. A 40° sector model is derived from the 120° model. A comparison of experiment, 120° sector and 40° sector is shown for a representative methane-HPDF-combustion and shows good agreement with the experimental results.

It is shown that the numerical model which was previously developed for methane is also capable of handling hydrogen as main fuel. The results of the 120° sector model are validated with experimental data and a comparison with OH*-chemiluminescence is made. The results show a good agreement of simulation and experiment.

The 40° model is used to simulate variations of hydrogen and ammonia HPDF combustion.

The simulation results show, that the hydrogen flame burns very close to the injector. This could cause problems for the long-term durability of the injection system because of the very high flame temperatures close to the injector geometry. Hydrogen burns almost exclusively diffusively and is very easy to ignite. Probably even smaller amounts of pilot diesel mass could be possible – which would further reduce the CO₂ emissions of the engine. In this case, the injector would be the limiting element to produce those small injection masses. Currently, one of the requirements for HPDF engines is full-load diesel operation. This limits the smallest pilot masses.

Ammonia needs a great amount of activation energy to combust. The lower the energy the later starts the HRR. Higher injection pressure and higher fuel temperature have a positive effect on the HRR of the ammonia combustion. A greater pilot mass leads to an earlier ignition of the ammonia, but not necessary to a faster combustion.

Outlook

Ammonia is known for a high NO_x production in combustion, especially when burned in lean combustion mode.¹⁰ In the HPDF combustion, a SCR-system is mandatory – no matter which fuel combination, so this is no argument against the technology.

The fuels investigated are both suitable for use in HPDF-combustion processes. Both present special challenges in their application. In the future, the exhaust emissions of both fuels should be investigated in detail. This has not been done in this study, because of the used mechanism in the numerical model. The GRI Mech 3.0 is known, that it does not give correct NO_x prediction for ammonia/air flames.¹⁰ It has been used anyway because it gives good results for the burning velocities over a wide range of fuel/air ratios and the focus in this work was on ignition and flame propagation in the ammonia flame.

Because of the need of the decarbonisation of the transport sector, both fuels, hydrogen and ammonia will play a big role in future combustion systems, whereas the mixing-controlled HPDF-combustion is a fuel-flexible alternative to the classical diesel engines.

Acknowledgements

The project was carried out in collaboration with Woodward L'Orange and MTU Friedrichshafen. Their support is gratefully acknowledged. The authors also want to thank CONVERGE CFD for providing the software, licenses and technical support for the simulations.



Declaration of conflicting interests

The author(s) declared no potential conflicts of interest with respect to the research, authorship, and/or publication of this article.

Funding

The author(s) disclosed receipt of the following financial support for the research, authorship, and/or publication of this article: This study formed part of the “MethQuest-MethMare” project, which was funded by the German Federal Ministry of Economic Affairs and Energy.

ORCID iDs

Stephanie Frankl  <https://orcid.org/0000-0001-8414-4594>
Maximilian Prager  <https://orcid.org/0000-0003-2507-6530>

References

- IPCC SYR TSU. Climate change 2014: synthesis report 2015.
- Pavlenko N, Comer B, Zhou Y, Clark N and Rutherford D. The climate implications of using LNG as a marine fuel. Working paper 2020-02, 2020.
- Imhof D. *Visual combustion studies for environmentally friendly marine diesel and gas engines*, Dissertation, Kyushu University, Kyushu, Japan, 2013.
- Boog M, Dumser F, Berger I, Fink G, Jud M, Gleis S, et al. Entwicklung eines high pressure dual-fuel-konzepts für schnelllaufende drehzahlvariable Motoren in Schiffsantrieben. 11. Dessauer Gasmotorenkonferenz, 2019, Dessau.
- McTaggart-Cowan GP, Jones HL, Rogak SN, Bushe WK, Hill PG and Munshi SR. The effects of high-pressure injection on a compression-ignition, direct injection of natural gas engine. *J Eng Gas Turbines Power* 2007; 129(2): 579–588.
- Khosravi M, McTaggart-Cowan G and Kirchen P. Pyrometric imaging of soot processes in a pilot ignited direct injected natural gas engine. *Int J Engine Res*. Epub ahead of print 6 June 2020. DOI: 10.1177/1468087420919196.
- Huang J, McTaggart-Cowan G and Munshi S. Large-eddy simulation of direct injection natural gas combustion in a heavy-duty truck engine using modified conditional moment closure model with low-dimensional manifold method. *Int J Engine Res* 2020; 21(5): 824–837.
- NIST Chemistry WebBook. SRD 69, 2018. Fluid Properties of H₂, CH₄ and NH₃.
- Springer-Verlag GmbH. *VDI-Wärmeatlas: Mit 320 Tabellen. 11., bearb. und erw. Aufl.* Berlin: Springer Vieweg, 2013. (VDI-Buch).
- Kobayashi H, Hayakawa A, Somarathne KDKA and Okafor EC. Science and technology of ammonia combustion. *Proc Combust Inst* 2019; 37(1): 109–133.
- Boog M, Dumser F, Bärow E, Fink G, Jud M, Gleis S, et al. FlexDi - Flexible direkteinspritzende Motoren für die Schifffahrt. *Statustagung Maritime Technologien* 2018. D-52425 Jülich, www.fz-juelich.de/zb/openaccess (accessed 13 December 2018).
- Senghaas C, Willmann M and Berger I. New injector family for high pressure gas and low caloric liquid fuels. In: *29th CIMAC Congress Vancouver 2019*, Vancouver, Canada, 10–14 June 2019.
- Gleis S, Frankl S, Waligorski D, Prager M, Wachtmeister G, Prager D-IM, et al. Investigation of the High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) combustion process of natural gas on a fully optically accessible research engine. SAE technical paper 2019 // Investigation of the High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) combustion process of natural gas on a fully optically accessible research engine. SAE technical paper 2019.
- Gleis S, Frankl S, Prager M and Wachtmeister G. Optical analysis of the combustion of potential future E-Fuels with a high pressure dual fuel injection system. In: *14th International AVL symposium on propulsion diagnostics*, Kurhaus, Baden-Baden, Germany, 23–24 June 2020.
- Frankl S and Gleis S. Development of a 3D-CFD model for a full optical high-pressure dual-fuel engine. *SAE Int J Engines* 2020; 13(2): 2020.
- Frankl S, Gleis S and Wachtmeister G. Interpretation of ignition and combustion in a full-optical High-Pressure-Dual-Fuel (HPDF) engine using 3D-CFD methods. In: *29th CIMAC Congress Vancouver 2019*, Vancouver, Canada, 10–14 June 2019.
- International Organisation for Standardization. ISO 14687:2019: Hydrogen fuel quality - Product specification, 2019 2019-11.

18. European Space Agency. Vulcain engine, http://www.esa.int/Enabling_Support/Space_Transportation/Launch_vehicles/Vulcain_engine (accessed 13 February 2020).
19. Dimitriou P and Tsujimura T. A review of hydrogen as a compression ignition engine fuel. *Int J Hydrogen Energy* 2017; 42(38): 24470–24486.
20. Kiesgen G, Klütting M, Bock C and Fischer H. The new 12-cylinder hydrogen engine in the 7 series: the H2 ICE age has begun. In: *SAE 2006 World Congress & Exhibition*, Detroit, MI, 3–6 April 2006.
21. Herdin G, Gruber F, Klausner J, Robitschko R and Chvatal D. Hydrogen and hydrogen mixtures as fuel in stationary gas engines. SAE technical paper 2007-01-0012, 2007.
22. Rottengruber H, Wiebicke U, Woschni G and Zeilinger K. Wasserstoff-Dieselmotor mit Direkteinspritzung, hoher Leistungsdichte und geringer Abgasemission. Teil 3: Versuche und Berechnungen am Motor. *MTZ - Motor-technische Zeitschrift* 2000; 61: 122–128. <https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/BF03226557.pdf>
23. Dawood F, Anda M and Shafiqullah GM. Hydrogen production for energy: an overview. *Int J Hydrogen Energy* 2020; 45(7): 3847–3869.
24. Aarnes J, Eijgelaar M and Hektor EA. Hydrogen as an energy carrier: an evaluation of emerging hydrogen value chains, Hovik Norway, 11/2018, <https://www.dnvgl.com/oilgas/download/thank-you/download-hydrogen-as-an-energy-noindex.html> (accessed 20 February 2020).
25. Lan R, Irvine JTS and Tao S. Ammonia and related chemicals as potential indirect hydrogen storage materials. *Int J Hydrogen Energy* 2012; 37(2): 1482–1494.
26. Lamb KE, Dolan MD and Kennedy DF. Ammonia for hydrogen storage; A review of catalytic ammonia decomposition and hydrogen separation and purification. *Int J Hydrogen Energy* 2019; 44(7): 3580–3593.
27. Dimitriou P and Javaid R. A review of ammonia as a compression ignition engine fuel. *Int J Hydrogen Energy* 2020; 45(11): 7098–7118.
28. Kroch E. Ammonia - a fuel for motor buses. *J Inst Pet* 1945; 31: 213–223.
29. Pearsall TJ and Garabedian CG. Combustion of anhydrous ammonia in diesel engines. *SAE technical paper* 670947, 1967
30. Linde Gas GmbH. Sicherheitsdatenblatt Ammoniak, wasserfrei, 2013, https://produkte.linde-gas.at/sdb_konform/NH3_10021772DE.pdf (accessed 17 September 2020).
31. CONVERGE. Version 2.4. Convergent science, 2018, <https://convergecd.com/>
32. Bowditch FW. A new tool for combustion research a quartz piston engine. *SAE technical paper* 610002, 1961.
33. Smith GP, Golden DM, Frenklach M, Moriarty NW, Eiteneer B, Goldenberg M, et al. GRI-Mech 3.0, http://combustion.berkeley.edu/gri-mech/version30/files30/gri_mech30.dat (accessed 7 January 2020).
34. Jud M, Wieland C, Fink G and Sattelmayer T. Numerical analysis of the combustion process in dual-fuel engines with direct injection of natural gas. In: *Proceedings of the ASME 2018 internal combustion fall technical conference*, San Diego, CA, 4–7 November 2018.
35. Jud M, Fink G and Sattelmayer T. Predicting ignition and combustion of a pilot ignited natural gas jet using numerical simulation based on detailed chemistry. In: *Proceedings of the ASME 2017 internal combustion engine division fall technical conference*, Seattle, Washington, 15–18 October 2017.
36. Han X, Wang Z, Costa M, Sun Z, He Y and Cen K. Experimental and kinetic modeling study of laminar burning velocities of NH₃/air, NH₃/H₂/air, NH₃/CO/air and NH₃/CH₄/air premixed flames. *Combust Flame* 2019; 206: 214–226.
37. Linstrom P. NIST chemistry webbook, NIST standard reference database 69: fluid data for ammonia, 1997, <https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?Name=Ammonia&Units=SI> (accessed 8 April 2020).
38. Mathieu O and Petersen EL. Experimental and modeling study on the high-temperature oxidation of ammonia and related NO_x chemistry. *Combust Flame* 2015; 162(3): 554–570.
39. Reiter AJ and Kong S-C. Combustion and emissions characteristics of compression-ignition engine using dual ammonia-diesel fuel. *Fuel* 2011; 90(1): 87–97.

Appendix

Computational grid

Figure A1 shows exemplary the resulting grid for the hydrogen (left) and the ammonia (right) HPDF-combustion. The cylinder head as well as the liner and the piston have a boundary fixed embedding of scale 2.

For the liquid injection there is a 2-step fixed embedding. The cells close to the nozzle exit have a cell length of 0.0625 mm whereas the second embedding have a length of 0.125 mm. The minimum cell size resulting from AMR is 0.125 mm, as close to the gas injector. For the use of ammonia as main fuel, a conical fixed embedding, similar to the diesel fixed embedding is included into the domain. The inner cell

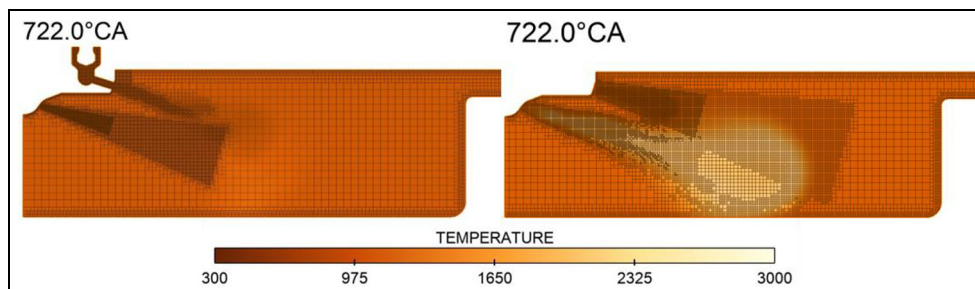


Figure A1. Resulting grid with two-step fixed embedding for the diesel pilot and adaptive mesh refinement for the hydrogen jet.

cone has cells of 0.125 mm length, the outer cone 0.25 mm length.

Definitions/Abbreviations

CA Crank angle

CFD Computational Fluid Dynamics

HPDF

High pressure dual fuel

HRR

Heat release rate

SCR

Selective catalytic reduction

SOI

Start of Injection

TDC

Top Dead Centre