

Universität
Rostock



Traditio et Innovatio

**Numerische 3D-CFD-Simulation des
Dual-Fuel-Brennverfahrens für maritime
Anwendungen unter Verwendung
detaillierter Reaktionsmechanismen**

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)
der Fakultät für Maschinenbau und Schiffstechnik
der Universität Rostock

vorgelegt von
Sascha Andree

Lehrstuhl für Technische Thermodynamik
Universität Rostock

Erstgutachter: Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Egon Hassel
Lehrstuhl für Technische Thermodynamik
Universität Rostock

Zweitgutachter: Prof. Dr.-Ing. Bert Buchholz
Lehrstuhl für Kolbenmaschinen und Verbrennungsmotoren
Universität Rostock

Tag der Einreichung: 04. Dezember 2020

Tag der Verteidigung: 13. Juli 2021

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand innerhalb der BMWi geförderten Projekte LEDF (Förderkennzeichen: 03SX396A) und LEDF2 (Förderkennzeichen: 03SX421A) im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der Universität Rostock unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. habil. Dr. h.c. Egon Hassel. Ihm gilt insbesondere mein Dank für die Möglichkeit und die Freiheiten solch ein komplexes Thema zu bearbeiten. Weiterer Dank gilt Prof. Dr.-Ing. Bert Buchholz für die Übernahme des Koreferats.

An dieser Stelle möchten ich weiteren Dank an alle aussprechen, die mit zum Entstehen dieser Arbeit beigetragen haben. Dazu gehören Dr.-Ing. Martin Theile, welcher immer für Diskussionen bereit stand und sinnvolle Lösungsansätze beigetragen hat. Weiterhin danke ich Dr.-Ing. Dorian Holz und Dr.-Ing. Jürgen Nocke insbesondere für die stetige Ermutigung. Besonderer Dank geht vor allem an meine Bürokollegen Alexander Dottei und Dr.-Ing. Karl Wilhelm Najar durch die immer eine angenehme Atmosphäre herrschte. Insbesondere danke ich Björn Henke, Kasten Schleef und Sebastian Cepelak, die sich um die Prüfstandsversuche und die Messdatenauswertung gekümmert haben. Weiterhin gilt der Dank allen Kollegen für das kameradschaftliche Miteinander und die gegenseitige Unterstützung, die das wissenschaftliche Arbeiten erst richtig möglich macht. Zuletzt gilt der Dank meiner Familie, insbesondere meiner Frau Andrea, die mich in jeglicher Art unterstützt und entlastet hat.

Kurzfassung

Moderne Dual-Fuel-Motoren für Schiffsantriebe und Generatoranwendungen, bei denen ein homogenes, mageres Erdgas-Luftgemisch mittels einer kleinen Dieselmengen gezündet wird, sind eine attraktive Alternative für konventionelle Dieselmotoren aufgrund ihrer geringeren Kohlenstoffdioxid- und Stickstoffoxidemissionen. Zudem ist das Brennverfahren nahezu rußfrei und emittiert keine Schwefeldioxide. Die im Bereich der maritimen Anwendungen geltende IMO Tier III Abgasgesetzgebung kann somit von Dual-Fuel-Motoren eingehalten werden. Diese Aspekte sind sehr relevant zum einen für Kreuzfahrtschiffe, nicht nur aus Gründen der Öffentlichkeitsarbeit, als auch für Frachter und Fähren, die in Emissionskontrollgebieten operieren.

Aufgrund der hohen Kosten für Prototypen und Prüfstandsuntersuchungen bei Schiffsmotoren sind numerische Simulationen wichtige Werkzeuge für den Entwicklungs- und Optimierungsprozess neuer Motorengenerationen. Experimentelle Untersuchungen stehen in der Regel erst am Ende des Entwicklungsprozesses zur Verfügung, um das vordefinierte Brennverfahren zu optimieren. Das Dual-Fuel-Brennverfahren stellt die Simulation vor besondere Herausforderungen, da zwei Brennverfahren zusammenfallen. Zum einen existiert die vorgemischte Flammenfrontverbrennung des Erdgases und zum anderen die Diffusionsverbrennung des Dieseldieselkraftstoffes. Gängige Verbrennungsmodelle kommen hier an ihre Grenzen, da sie für monovalente Verbrennungssimulationen entwickelt wurden. Eine Möglichkeit zur Realisierung der Dual-Fuel-Simulation ist die Anwendung detaillierter Reaktionsmechanismen. Zu diesem Zweck wurden zwei einzelne Reaktionsmechanismen für Erdgas sowie für n-Heptan, welches als Surrogat für Dieseldieselkraftstoff genutzt wird, der Literatur entnommen und zu einem einzigen Reaktionsmechanismus vereinigt. Dieser berücksichtigt die beiden Reaktionspfade für Erdgas und n-Heptan. Für die dreidimensionale CFD-Simulation werden die Reaktionsmechanismen mittels der Software AVL TABKINTM in einem Vorverarbeitungsschritt gelöst und anschließend tabelliert. Dieses Vorgehen sorgt für eine Reduzierung des

nötigen Rechenaufwandes, da zum einen nicht während jedes Zeitschritts der Strömungssimulation der Reaktionsmechanismus parallel gelöst werden muss und zum anderen kann die Anzahl der Speziestransportgleichungen stark reduziert werden. Durch Anwendung des FGM (Flamlet Generated Manifold) Verbrennungsmodels wird die Chemielösung vom dreidimensionalen Strömungsfeld entkoppelt. Dieser Ansatz erlaubt, im Vergleich zu konventionellen Verbrennungsmodellen, einen detaillierten Einblick in die komplexen Zündprozesse der Dual-Fuel-Verbrennung. Zur Validierung wurden Ergebnisse eines Einzylinder Forschungsprüfstandes verwendet. Die typischen langen Zündverzüge, welche die Experimente gezeigt haben, können durch das Simulationsmodell gut abgebildet werden. Weiterhin hat sich in den Versuchen ein invers-proportionales Verhalten zwischen Einspritzbeginn des Dieselmotorkraftstoffes und dem Brennbeginn gezeigt. Dieses Verhalten konnte auch in der Simulation erreicht werden und zeigt die gute Anwendbarkeit des Verfahrens.

Abstract

Due to their lower carbon dioxide and nitrogen oxide emissions modern dual-fuel marine engines for propulsion and genset applications are an attractive alternative for conventional diesel engines. In dual-fuel marine engines a homogeneous lean natural gas-air mixture is ignited by a small amount of diesel. The combustion process is nearly soot-free and does not emit any sulphur dioxide. The IMO Tier III emissions legislation for marine applications can be met by dual-fuel engines. These aspects are very relevant on the one hand for cruise ships for public relations reasons as well as for freighters and ferries operating in emission control areas. Due to the high cost of prototypes and test bench investigations for large bore marine engines, numerical simulations are an important tool for the development and improvement process of such engine generations. Experimental investigations are usually only available at the end of the development process in order to optimize the predefined firing processes. As two combustion regimes have to be considered, the numerical combustion simulation for dual-fuel combustion processes face special challenges. On the one hand the premixed flame front combustion of the natural gas has to be considered and on the other hand the diffusion combustion of the diesel fuel has to be taken into account. Common combustion models are limited as they are developed only for monovalent combustion simulations. One possibility is to apply detailed reaction mechanisms in the model. For this purpose two single reaction mechanisms for natural gas and n-Heptane, which is used as a substitute for diesel fuel, are taken from the literature and combined into a single reaction mechanism. This takes into account the two reaction paths for natural gas and n-Heptane. For the three-dimensional CFD simulation, the reaction mechanisms are simulated using the software AVL TABKINTM for tabulation. This procedure ensures a reduction of the necessary computational effort, since the reaction mechanism does not have to be solved during each time step of the flow simulation. Additionally, the number of species transport equations can be reduced. By applying the Flamlet Generated Manifold

(FGM) combustion model, the chemical solution procedure is decoupled from the three-dimensional flow field. This approach allows, in comparison to conventional combustion models, a detailed insight into the complex ignition processes of the dualfuel engines. In order to validate the results a single cylinder research engine is used. The typical long ignition delays, shown by the experiments, can be represented by the simulation model. Furthermore, in the experiments an inverse-proportional behavior between the start of injection of diesel fuel and the start of firing is recognized. This behavior could also be shown in the simulation and shows the applicability of this workflow.

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis	XI
Abbildungsverzeichnis	XIII
1 Einleitung	1
1.1 Motivation	1
1.2 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit	3
2 Stand der Technik	5
2.1 Ansätze aus der Literatur	5
2.2 Zusammenfassung	7
3 Motorische Grundlagen	9
3.1 Dual-Fuel-Motoren für Schiffsanwendungen	9
4 Thermodynamische Grundlagen und Modelle	15
4.1 Chemische Reaktionskinetik	15
4.2 Strömungssimulation	19
4.3 Verbrennungsmodellierung mit detaillierter Reaktionskinetik	25
4.4 Zusammenfassung	29
5 Versuchsträger	31
6 Reaktionsmechanismus für die Dual-Fuel-Verbrennung	33
6.1 Mechanismen aus Literaturquellen	35
6.2 Kombination zu einem Dual-Fuel-Mechanismus	42
6.3 Zusammenfassung	46

7	Vorgehensweise 3D Dual-Fuel-Simulation	47
7.1	Gitterauflösung	47
7.2	Gittererstellung	49
7.3	Ladungswechselrechnung	51
7.4	Tabellierung des Reaktionsmechanismus	53
7.5	Spraymodells des Pilotkraftstoffes	57
7.6	Verbrennungssimulation	60
7.7	Zusammenfassung	60
8	Validierung	61
8.1	Validierung der Vorgehensweise	61
8.2	Validierung für unterschiedliche Betriebspunkte	63
8.3	Zusammenfassung	71
9	Ergebnisse	73
9.1	Vergleich zentrale - dezentrale Einspritzung	73
9.2	Kolben- und Zylinderkopfvariation	79
9.3	Zusammenfassung	83
10	Zusammenfassung und Ausblick	85

Tabellenverzeichnis

4.1	Elementarreaktionen im Chemkin [®] Format, Auszug aus einem $H_2 - CO$ Oxidationsreaktionsmechanismus aus [93]	17
5.1	Konfiguration des Einzylinderprüfstandes	31
6.1	Übersicht der weltweiten Gasqualitäten [42]	34
6.2	Übersicht über experimentelle Untersuchungen zu Zündverzügen	35
6.3	Übersicht über bestehende Reaktionsmechanismen aus der Literatur . .	36
9.1	Übersicht der untersuchten Injektoren	73

Abbildungsverzeichnis

- 1.1 Stickstoffoxidgrenzwerte und zulässiger Kraftstoffschwefelanteil für Antriebsmaschinen seegehender Schiffe aus [66]. Die Einführung der IMO TIER III, aktuell gültig in den NO-Emissionskontrollgebieten, fordert eine Reduzierung der Stickstoffoxidemissionen um 75 Prozent im Vergleich zur IMO TIER II, welche weiterhin für die restlichen Seegebiete verpflichtend ist. Zeitgleich erfolgte eine stufenweise Reduzierung des erlaubten Schwefelanteils im Kraftstoff. So sind seit 2015 in den Emissionskontrollgebieten schwefelfreie Kraftstoffe vorgeschrieben. Für die übrigen Seegebiete ist seit dem Jahr 2020 die Anwendung schwefelarmer Kraftstoffe vorgeschrieben. 2

- 3.1 Schema des Diesel-Gasverfahrens mit Niederdruckeinblasung aus [28]. Während des Ladungswechsels wird Erdgas in den Ansaugkanal, in der Abbildung links dargestellt, eingeblasen und mit der Frischgasmasse in den Brennraum angesaugt. Dieses magere Erdgas-Luftgemisch wird homogen verdichtet. Zur Zündung wird eine kleine Menge Diesel eingespritzt, die sich selbst entzündet und dadurch die Zündung der Erdgas-Luftmischung einleitet. 10
- 3.2 Bereiche der rußenden Verbrennung und der Stickstoffoxidbildung dargestellt über Äquivalenzverhältnis und Temperatur, entnommen aus [69]. Der optimale Betriebsbereich für geringe Ruß und Stickstoffoxidemissionen liegt in dem linken, unteren Quadranten bei niederen Temperaturen und geringen Äquivalenzverhältnissen. Diese Abbildung zeigt zusätzlich die Betriebsbereiche verschiedener Brennverfahren wie Homogeneous charge compression ignition (HCCI), Premixed charge compression ignition (PCCI) und Low Temperature Combustion (LTC). 11
- 3.3 Grenzen der Betriebsbereiche bei Großgasmotoren nach [63] 12

4.1	Schematisches p-T Explosionsdiagramm für Kohlenwasserstoffe aus [92]	18
4.2	Zeitskalen bei chemischen reagierenden Strömungen aus [92]. Bei genügend schnellem Ablauf der Reaktionen, kann die Annahme des Gleichgewichtszustandes angenommen werden.	26
4.3	Trajektorien für die Methan Oxidation aus [92].	27
4.4	Schematische Darstellung nach [90] einer vorgemischten Flamme, bei der die Kurve $X(s)$ durch die Flammenfront verläuft	28
5.1	Schaubild des Einzylinderprüfstandes mit seiner Peripherie aus [31]. . .	32
6.1	Vergleich der mittels Chemkin [®] berechneten Zündverzögerungen der Reaktionsmechanismen mit Messdaten aus der Literatur [30] für Erdgas mit hoher Methanzahl bei stöchiometrischer und überstöchiometrischer Verbrennung, links lineare und rechts logarithmische y-Achse	39
6.2	Vergleich der mittels Chemkin [®] berechneten Zündverzögerungen der Reaktionsmechanismen mit Messdaten aus der Literatur [30] für Erdgas mit geringer Methanzahl bei stöchiometrischer und überstöchiometrischer Verbrennung, links lineare und rechts logarithmische y-Achse	40
6.3	Darstellung der Residuenquadrate der einzelnen Simulationen aus den Abbildungen 6.1 und 6.2 bezogen auf die Messdaten von [30]. I	41
6.4	Vergleich Zündverzögerungen des kombinierten Reaktionsmechanismus mit Messdaten aus der Literatur [30] für zwei verschiedene Erdgasqualitäten bei stöchiometrischer und überstöchiometrischer Verbrennung	43
6.5	Vergleich der Zündverzögerungen des kombinierten Reaktionsmechanismus mit Messdaten aus der Literatur[52] für n-Heptan bei unterstöchiometrischer, stöchiometrischer und überstöchiometrischer Verbrennung	44
6.6	Vergleich der berechneten Flammgeschwindigkeit für wichtige Spezies des kombinierten Reaktionsmechanismus mit Messdaten aus der Literatur. Die Messdaten sind aus [41] entnommen.	45
7.1	Gitterkonvergenzstudie für die Verbrennungssimulation mit Tabkin TM , Vergleichsgröße ist die Energiefreisetzung für Zellgrößen von 0, 12 mm bis 3 mm	48
7.2	CPU Rechenzeiten der Gitterkonvergenzstudie für Zellgrößen von 0, 12 mm bis 3 mm. Eine Verringerung der Zellgröße sorgt für exponentiellen Anstieg der benötigten Rechendauer.	49

7.3	Schema der Vorgehensweise: nichtreaktive Ladungswechselrechnung wird als Anfangsbedingung für Verbrennungsrechnung genutzt. Variantenrechnungen, genannt Cases, können die selbe Ladungswechselrechnung als Ausgangsbasis nutzen.	51
7.4	Validierung der Ladungswechselrechnung mittels Niederdruckindizierung. Vergleich zwischen simulierten und experimentell bestimmten Zylinderdruckverlauf.	52
7.5	Gegenüberstellung der Visualisierung des Reaktionsquelltherms zweier Tabkin Tabellen. Die obere Abbildung zeigt eine Tabelle mit schlechter Verteilung der Stützstellen. Die Übergänge weisen hohe Gradienten auf. Dadurch können wichtige Details nicht abgebildet werden. Hingegen zeigt die untere Abbildung eine gute Verteilung der Stützstellen. Die Übergänge sind weich und die Verbrennung kann gut abgebildet werden.	55
7.6	Tabellierung mit Tabkin™. Vor der eigentlichen Strömungssimulation wird mittels Rührreaktorsimulationen die Datenbank der Reaktionskinetik erstellt und Tabelliert. Die Tabelle ist über eine geringe Anzahl von Kontrollvariablen, wie dem Mischungsbruch oder auch dem Reaktionsfortschritt definiert. Für diese Variablen sind in der Strömungssimulation Transportgleichungen zu lösen. Anhand dieser ist es möglich, den Ablauf der Verbrennung aus der Tabelle zu entnehmen und entsprechend auf das numerische Gitter zu übertragen.	56
7.7	Vergleich der flüssigen Eindringtiefe von Simulation (rot) und Experiment an der Einspritzkammern (schwarz).	58
7.8	Darstellung des simulierten Spraybildes zum Zeitpunkt der Abweichung zwischen Simulation und Experiment. Durch numerischen Fehler verdampfen einzelne Parcels nicht, dadurch wird die Eindringtiefe überbestimmt. . .	59
8.1	Validierung des Referenzfalls mit Messdaten vom Einzylinder Forschungsmotor.	62
8.2	Validierung des Simulationsmodells für unterschiedliche Lastpunkte. 100 %, 75 %, 50 % und 25 % Last jeweils im Vergleich zu dem gemittelten Zylinderdruckverlauf und den zugehörigen Einzeldruckverläufen. . . .	64

8.3	Validierung für unterschiedliche Einspritzzeitpunkte bei 100% Last. Einspritzbeginn zwischen 40 und 20°KW vor ZOT jeweils im Vergleich zu dem gemittelten Zylindruckverlauf und den zugehörigen Einzeldruckverläufen.	65
8.4	Darstellung des Massenanteils von n-Heptan bei früher und später Einspritzung. Obere Bilder zeigen einen Zeitpunkt 1°KW und untere Bilder 5°KW nach Einspritzbeginn. Die frühe Einspritzung erlaubt ein weites Verteilen des Pilotkraftstoffs im Brennraum und zur Abmagerung des Sprays.	67
8.5	Darstellung des Massenanteils von n-Heptan bei der Mehrfacheinspritzung. Links ist der Zeitpunkt vor und rechts während der Haupteinspritzung dargestellt. Es ist zu sehen, wie die Haupteinspritzmenge in die bestehende Wolke der Voreinspritzung eingebracht wird.	68
8.6	Darstellung des Massenanteils von Formaldehyd bei der Mehrfacheinspritzung für zwei unterschiedliche Zeitpunkte. Sichtbar ist die Bildung von Formaldehyd vor der eigentlichen Haupteinspritzung. Dies ist Indiz für bereits ablaufende Reaktionsprozesse, die den Zündprozess der Haupteinspritzmenge begünstigen.	68
8.7	Validierung für unterschiedliche Einspritzstrategien bei 100% Last. Vergleich zwischen einer Einzeleinspritzung mit einer Doppeleinspritzung. Die Doppeleinspritzung besteht aus einer frühen Voreinspritzung, die eine 1,5 fache Menge der Haupteinspritzung hat. Die kumulierten Einspritzmassen bei Einfach- und Mehrfacheinspritzung sind nahezu identisch.	70
9.1	Darstellung des Druckverlaufs und der Energiefreisetzung bei den unterschiedlichen Injektorpositionen. Das dezentrale Einbringen des Pilotkraftstoffs führt zu verlängertem Zündverzug und zu steileren Druckanstiegsgradienten.	74
9.2	Massenanteile verschiedener Spezies im Vergleich für die dezentralen sowie zentrale Injektorposition.	74

-
- 9.3 Zeitlicher Verlauf des n-Heptan Massenbruches, sowie der Reaktionsfortschrittsvariablen als Isoflächen für die verschiedenen Injektorpositionen. Die zentrale Injektorposition ist geprägt von einer kompakten Dieselpilotwolke und einer Flammenfrontverbrennung beginnend von einem zentralen Zündort. Bei beiden dezentralen Injektorlagen wird ein weites Eindringen in den Brennraum deutlich, was eine Abmagerung und dadurch einen längeren Zündverzug begünstigt. Daraufhin bilden sich im Wandbereich zwei Zündorte aus. Diese sorgen für das Entstehen von zwei sich gegenläufigen Flammenfronten. 77
- 9.4 Zeitlicher Verlauf des n-Heptan Massenbruches, sowie der Reaktionsfortschrittsvariablen als Isoflächen für die verschiedenen Injektorpositionen. Die zentrale Injektorposition ist geprägt von einer kompakten Dieselpilotwolke und einer Flammenfrontverbrennung beginnend von einem zentralen Zündort. Bei beiden dezentralen Injektorlagen wird ein weites Eindringen in den Brennraum deutlich, was eine Abmagerung und dadurch einen längeren Zündverzug begünstigt. Daraufhin bilden sich im Wandbereich zwei Zündorte aus. Diese sorgen für das Entstehen von zwei sich gegenläufigen Flammenfronten. 78
- 9.5 Zeichnungen der unterschiedlichen Kolbenkronen, (a) Serienmulde, (b) tiefe flache Mulde, (c) niedrig flache Mulde und (d) Badewannenform 79
- 9.6 Darstellung der Zylinderdruckverläufe der Kolben- und Zylinderkopfvariation. Vergleich zwischen den numerischen Ergebnissen der verschiedenen Kolbenkronen. Links für den Serienzylinderkopf und rechts für den Zylinderkopf mit Drall. 80
- 9.7 Darstellung der Energiefreisetzung der Kolben- und Zylinderkopfvariation. Vergleich zwischen den numerischen Ergebnissen der verschiedenen Kolbenkronen. Links für den Serienzylinderkopf und rechts für den Zylinderkopf mit Drall. 80
- 9.8 Darstellung der Zylinderdruckverläufe der Kolben- und Zylinderkopfvariation. Die Simulationen wurden vor den Experimenten durchgeführt. Daher wurden als Randbedingungen die Werte vom Referenzfall übernommen. Bei dem drallarmen Zylinderkopf der Serie bildet die Simulation das Experiment gut ab. Jedoch bei dem Zylinderkopf mit erhöhten Swirl zeigt die Simulation einen verlängerten Zündverzug. 82

- 9.9 Darstellung der Zylinderdruckverläufe der Kolbenvariation unter Anwendung des Zylinderkopfes mit erhöhtem Drall. Vergleich zwischen den numerischen Ergebnissen und den experimentellen Untersuchungen. Links für die Simulation und rechts für die Experimente. Trotz der unterschiedlichen Zündverzögerungen zwischen Simulation und Experiment zeigen die verschiedenen Kolbenkronen die gleichen Tendenzen. 83

Symbolverzeichnis

δ_{ij}	—	Kronecker-Delta
ϵ	$\frac{m^2}{s^3}$	turbulente Dissipation
η	m	Kolmogorov Länge
μ	$\frac{kg}{ms}$	dynamische Viskosität
μ_t	$\frac{kg}{ms}$	Wirbelviskosität
ν	$\frac{m^2}{s}$	kinematische Viskosität
ρ	$\frac{kg}{m^3}$	Dichte
τ_{ij}	$\frac{kg}{ms^2}$	Spannungstensor
ϕ	—	skalare Größe
Ω	—	azentrischer Faktor
e	$\frac{J}{kg}$	spezifische innere Energie
e_i	$\frac{J}{kg}$	spezifische Gesamtenergie
f_i	$\frac{kgm}{s^2}$	Kraftvektor
k	$\frac{m^2}{s^2}$	turbulente kinetische Energie
$k^{(f)}$	$\frac{k}{cm^3 \cdot mol \cdot s}$	Geschwindigkeitskoeffizient einer Reaktion
p	Pa	Druck
p_c	Pa	kritischer Druck
p_s	Pa	Sättigungsdampfdruck
t	s	Zeit
u_i	$\frac{m}{s}$	Geschwindigkeitsvektor
x_i	—	Raumvektor
Le	—	Lewis-Zahl
L_{Sk}	m	charakteristische Länge der großen Skalen
R	$\frac{J}{kgK}$	spezielle Gaskonstante
R_m	$\frac{J}{molK}$	universelle Gaskonstante

S_α	$\frac{kg}{s}$	Speziesquelltherm
S_{ij}	$\frac{kg}{ms^2}$	Deformationstensor
S_r	$\frac{J}{s}$	Strahlungsquelltherm
T	K	Temperatur
T_c	K	kritische Temperatur
T_r	K	reduzierte Temperatur
U	J	innere Energie
V_m	$\frac{mol}{m^3}$	molares Volumen
Y	$\frac{kg}{kg}$	Massenbruch

Abkürzungsverzeichnis

CFD	Computational Fluid Dynamics
CFM	Coherent Flame Model
DF	Dual-Fuel
DNS	Direkte numerische Simulation
FGM	Flamelet Generated Manifold
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
HPC	High performance computing
ILDm	Intrinsic Low-Dimensional Manifold
IMO	International Maritime Organization
KW	Kurbelwinkel
LES	Large Eddy Simulation
NKW	Nutzkraftwagen
PDF	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
PKW	Personenkraftwagen
PRF	Primary Reference Fuel
RANS	Reynolds averaged Navier Stokes
RCM	Rapid Compression Machine
SOI	Start of Injektion / Einspritzbeginn
ZOT	Zünd oberer Totpunkt

1 Einleitung

Dieses einleitende Kapitel zeigt die Motivation für die Entwicklung neuer Motorgenerationen und Technologien, zum Einsatz auf seegehenden Schiffen für Propulsions- oder Generatoranwendungen und erläutert die Herausforderungen bei der Entwicklung geeigneter Simulationsmodelle für das Dual-Fuel-Brennverfahren. Weiterhin folgt die Zielsetzung dieser Arbeit und dessen Aufbau.

1.1 Motivation

In Hinblick auf sich international verschärfender Emissionsgesetze, sowie dem gestiegenen öffentlichen Umweltbewusstsein ist eine zielstrebige Weiterentwicklung zukünftiger Großmotoren unabdingbar. Moderne Dual-Fuel-Motoren, bei denen ein homogenes, mageres Erdgas-Luftgemisch mittels einer kleinen Dieselmengen gezündet wird, sind eine attraktive Alternative für konventionelle Dieselmotoren als Schiffsantrieb und Generatoranwendung. Der Vorteil liegt in den geringen Stickstoffoxid- und Kohlenstoffdioxidemissionen. Zusätzlich enthält das verwendete Erdgas keine Schwefelbestandteile, dadurch werden keine Schwefeloxide emittiert. Diese Eigenschaften erlauben eine Einhaltung der aktuellen IMO Tier III [40] Abgasgesetzgebung für seegehende Schiffe, wie sie in Abbildung 1.1 dargestellt ist, ohne die Notwendigkeit eines Abgasnachbehandlungssystems, auch zukünftige Verschärfungen in der Emissionslimitierung besteht dieses Potenzial.

Zusätzlich arbeitet dieses Brennverfahren aufgrund der homogenen Erdgas-Luftmischung mit einer nahezu rußfreien Verbrennung. Dieser Aspekt ist nicht nur für Reedereien aus Gründen der öffentlichen Meinung interessant, insbesondere wird durch emissionsarme Motoren eine gesteigerte Akzeptanz der Kreuzfahrtindustrie erreicht.

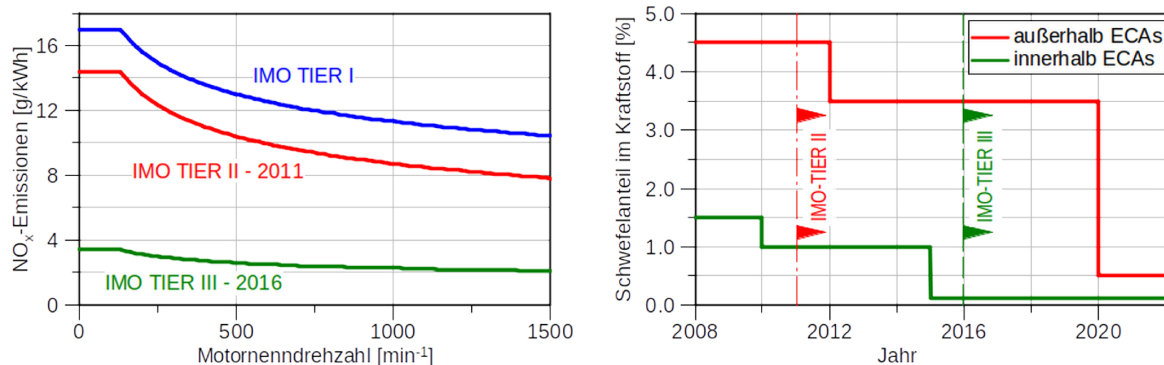


Abbildung 1.1: Stickstoffoxidgrenzwerte und zulässiger Kraftstoffschwefelanteil für Antriebsmaschinen seegehender Schiffe aus [66]. Die Einführung der IMO TIER III, aktuell gültig in den NO-Emissionskontrollgebieten, fordert eine Reduzierung der Stickstoffoxidemissionen um 75 Prozent im Vergleich zur IMO TIER II, welche weiterhin für die restlichen Seegebiete verpflichtend ist. Zeitgleich erfolgte eine stufenweise Reduzierung des erlaubten Schwefelanteils im Kraftstoff. So sind seit 2015 in den Emissionskontrollgebieten schwefelfreie Kraftstoffe vorgeschrieben. Für die übrigen Seegebiete ist seit dem Jahr 2020 die Anwendung schwefelarmer Kraftstoffe vorgeschrieben.

Um die Marktakzeptanz der Dual-Fuel-Motoren weiter zu erhöhen, sind Weiterentwicklungen mit Fokus auf Effizienzerhöhung und Verbesserung der Verbrennungsstabilität von Nöten. Die Grenzen der Betriebsbereiche des Dual-Fuel-Brennverfahren werden durch das Klopfverhalten, sowie durch die Fehlzündungen, die Methanemissionen hervorrufen, definiert. Die Ausweitung dieser Grenzen ermöglicht die weitere Effizienzsteigerung. Hierzu ist ein besseres Verständnis über die Prozesse im Brennraum unabdingbar. Insbesondere bei den Großmotoren hat sich die numerische Simulation zu einem wichtigen Werkzeug bei der Auslegung und Weiterentwicklung von neuen Brennverfahren und Motorgenerationen etabliert. Die Dual-Fuel-Verbrennungssimulation stellt dabei besondere Herausforderungen. Aufgrund der Anwendung von zwei unterschiedlichen Kraftstoffen in verschiedenen Verbrennungsregimen sind die etablierten Verbrennungsmodelle, die für einen Kraftstoff entwickelt worden sind, für die Dual-Fuel-Verbrennung nicht anwendbar, hierzu bedarf es neuartiger Ansätze.

1.2 Zielsetzung und Aufbau der Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit besteht in der Entwicklung und der Validierung einer geeigneten Handlungsweise zur Simulation der Dual-Fuel-Verbrennung. Im Gegensatz zu anderen Literaturquellen, sollen neben Methan als Hauptbestandteil des Erdgases auch Ethan und Propan, sowie Kohlenstoffdioxid mit berücksichtigt werden, um verschiedene Erdgasqualitäten abbilden zu können. Dadurch soll ein Werkzeug geschaffen werden, welches das Verständnis über das Dual-Fuel-Brennverfahren vertiefen und die Entwicklung neuer Motorengenerationen ermöglichen soll. Als Referenz und zur Validierung steht ein mittelschnelllaufender Einzylinder-Forschungsmotor zu Verfügung, der direkt für das Dual-Fuel-Brennverfahren entwickelt worden ist. Da die gängigen Verbrennungsmodelle nicht in der Lage sind, dieses Brennverfahren abzubilden, wurde ein Ansatz mit detaillierten chemischen Reaktionsmechanismen gewählt. Die Recherche und die Untersuchungen von Reaktionsmechanismen aus Literaturquellen ergab keinen geeigneten Mechanismus für das gewählte Vorhaben. So ist durch Kombination von Mechanismen ein Dual-Fuel-Reaktionsmechanismus erstellt worden. Dies wird im Kapitel 6 der Arbeit erläutert.

Die Simulation von Großmotoren stellt aufgrund der räumlichen Dimensionen große Herausforderungen an die numerische Simulation und die Gittererstellung für die Rechendomains. So müssen die chemischen und physikalischen Prozesse mit einer hinreichenden Genauigkeit abgebildet werden. Jedoch können die Zellweiten nicht beliebig verfeinert werden, ohne unpraktikable Rechenzeiten zu erhalten. Daher wird im Kapitel 7 durch eine Gitterkonvergenzstudie die nötige Zellgröße für die Verbrennungssimulation ermittelt, bevor auf das Vorgehen der Gittergenerierung eingegangen wird. Um die Rechenzeiten handhabbar zu halten, wird die Ladungswechselrechnung und die Verbrennungssimulation entkoppelt. Zusammen mit der Spraymodellierung bilden diese Themen den Abschluss des Kapitels 7.

Im Kapitel 8 der Arbeit erfolgt die Validierung des numerischen Modells. Zunächst wird dafür ein Referenzfall aus den Messdaten des Forschungsmotors verwendet. Zusätzlich werden verschiedene Einspritzzeitpunkte, unterschiedliche Lasten und eine Mehrfacheinspritzstrategie zur Validierung genutzt. Der letzte Teil dieser Arbeit umfasst die Anwendung des numerischen Modells anhand von Untersuchungen der zentralen

und dezentralen Dieselpiloteinspritzung im Vergleich, sowie der Kolbenkronen- und Zylinderkopfvariation.

2 Stand der Technik

Die Simulation der Dual-Fuel-Verbrennung stellt besondere Herausforderungen an die Verbrennungsmodellierung, insbesondere die Tatsache, dass bei diesem Brennverfahren mehrere Verbrennungsregime auftreten. Die 3D-CFD-Simulation bietet die Möglichkeit zeitlich und örtlich aufgelöst verschiedene Parameter des Brennverfahrens zu betrachten und somit näheren Aufschluss über die Verbrennung zu erhalten, damit steht ein mächtiges Werkzeug für die Brennverfahrensentwicklung zur Verfügung.

2.1 Ansätze aus der Literatur

Eine der ersten, die numerische Untersuchungen an dem Dual-Fuel-Brennverfahren durchführten sind, Liu und Karim [53]. Dafür entwickelten sie ein Mehrzonenmodell. Ein ähnliches Modell wurde auch von Krishnan [45] publiziert. Beide basieren auf dem nulldimensionalen Modellansatz und erlauben keine örtlich Auflösung der Simulationsergebnisse wie es die 3D-CFD vermag.

Die Herausforderung der gleichzeitigen Modellierung mehrerer Verbrennungsregime, wie Selbstzündung, Diffusionsverbrennung und vorgemischter Verbrennung, kann durch Anwendung detaillierter Reaktionsmechanismen bewerkstelligt werden. Hockett et. al.[36] zeigte, dass die Simulation der Dual-Fuel-Verbrennung über einen Reaktionsmechanismus möglich ist, wenn dieser alle benötigten Reaktionspfade für die beiden Kraftstoffe enthält. Sie entwickelten einen Dual-Fuel-Reaktionsmechanismus für einen hochdrehenden PKW Dieselmotor, der für den Dual-Fuel-Betrieb umgerüstet wurde. Dafür sind komplexe Mechanismen reduziert und kombiniert worden. Die Verbrennungssimulation konnte durch direkt gelöster Chemie erfolgen.

Eine nicht prädiktive Methode ist von Mancaruso [58] anhand eines light-duty Motors vorgestellt worden. Durch Nutzung einer Bruttoreaktion für Diesel und einem zweischritt Reaktionsmechanismus für Methan werden die Zündverzögerungen dargestellt. Die Verbrennung erfolgt auf Basis einer G-Gleichung, die mittels experimentellen Daten parametrisiert werden muss.

Ein Ansatz mit direkt gelöster chemischer Reaktionskinetik wurde von Maghbouli et. al. [56] angewandt. Hierfür wurde einer aus dem Lawrence Livermore National Laboratory n-Heptan Reaktionsmechanismus [62] reduzierter Mechanismus mit 42 Spezies und 58 Reaktionen verwendet und um einen Methan Reaktionspfad erweitert. Anhand eines auf Dual-Fuel-Betrieb umgerüsteten Nutzfahrzeugmotors konnten zwei Validierungsfälle erstellt werden. Die dabei verwendeten Dieselmassen trugen in diesen beiden Vergleichen mit neun und zwölf Prozent zum gesamten energetischen Umsatz bei.

Eder et. al. [15] erstellten ein numerisches Modell eines schnelllaufenden Gasmotors im Dual-Fuel-Betrieb. Hier wurde das 6 dm^3 große Hubvolumen über ein Sektormesh abgebildet, welches ein Viertel des Brennraumes umfasst. Die Modellierung des Brennverfahrens erfolgte mittels eines angepassten zwei Stufen Zündmodells und dem ECFM-3Z Verbrennungsmodells. Die Zündungsmodellierung erfolgte durch Tabellierung von Zündverzögerungen für n-Heptan und Methan. Mittels einer Blending-Funktion wurde die Mischung zwischen n-Heptan und Methan zunächst abgebildet. Diese Tabellierung konnte jedoch lediglich Schwankungen in der Brennraumtemperatur berücksichtigen. Änderungen im Brennraumdruck und dem definierten Mischungsbruch blieben vernachlässigt. Daher ist dieser Ansatz verworfen und die Entwicklung eines Dual-Fuel-Mechanismus zur Zündungsmodellierung vorangetrieben worden [16]. Die Validierung der Tabellenergebnisse erfolgte anhand Simulationen der Ausgangsmechanismen. Das ECFM-3Z Verbrennungsmodell wurde mit vorab berechneten laminaren Flammengeschwindigkeiten parametrisiert. Dies erfolgt über eine lineare Blending-Funktion zwischen den laminaren Flammengeschwindigkeiten der Reinstoffe. Anhand von sechs Betriebspunkten konnte das Modell validiert werden und zeigte größtenteils gute Ergebnisse. Jedoch bei der Anwendung von frühen Dieselpiloteinspritzungen mit langen Zündverzögerungen werden die Grenzen des Modells deutlich.

Ein ähnlicher Ansatz wurde von Decan et. al. [13] verfolgt. Hier wurde ein mittelschnelllaufender Dieselmotor im Dual-Fuel-Betrieb simuliert. Dafür wurde ein 40 Grad Sektorgitter des Brennraums mit einer Bohrung von 240 mm verwendet. Der Simulationsansatz basiert auf einer tabellierten Zündung mit einem nachgeschalteten Coherent Flame Model (CFM) als Verbrennungsmodell. Für die Zündungsmodellierung wurde ein reduzierter n-Heptan Reaktionsmechanismus verwendet, der unter anderem die Spezies Methan enthält, welche als Referenzkraftstoff für das Erdgas genutzt wurde. Mittels nulldimensionaler homogener Reaktorsimulationen ist der Zündverzug für die Reinstoffe Methan und n-Heptan, sowie ihre Mischung berechnet und tabelliert worden. Die Definition der laminaren Flammengeschwindigkeit als Eingangsparameter für das CFM Verbrennungsmodell erfolgte für den Reinstoff Methan über die Gleichung nach Gülder [27]. Die Ergebnisse wurden mit experimentellen Messungen von einem Einzylindermotor verglichen. Hierbei sind verschiedene Lasten bei einem energetischen n-Heptananteil von zehn Prozent untersucht worden. Die Ergebnisse zeigen die generelle Möglichkeit anhand dieses Simulationsansatzes Dual-Fuel-Brennverfahren abzubilden, offenbaren aber auch weites Verbesserungspotential hinsichtlich der Validierung.

2.2 Zusammenfassung

Bei der Betrachtung der Literatur zeigt sich, dass immer mehr Arbeitsgruppen sich dem Thema der Dual-Fuel-Verbrennung und der Simulation dieses Brennverfahrens widmen. Hierbei handelt es sich vorrangig um umgerüstete Nutzfahrzeugmotoren, stellenweise auch um schnelllaufende Schiffsdieselmotoren. Gemein haben viele Ansätze, dass die Zündung über Anwendung von Reaktionskinetiken realisiert wird. Aufgrund der Anwendung an Motoren mit vergleichsweise geringer Bohrung und durch Nutzung von Sektorgittern werden die Anzahl der Zellen gering gehalten, was die Anwendung von direkt im CFD-Solver gelöster Reaktionskinetik möglich macht. Dabei werden auch vorrangig reduzierte Mechanismen angewandt, die meist nur für reines Methan geeignet sind. Die dabei präsentierten Validierungen zeigen weiteres Verbesserungspotential. Somit ist die Vorgehensweise der Dual-Fuel-Simulation insbesondere bei hohen Zylindervolumen und moderaten Motordrehzahlen noch nicht abschließend gelöst. An dieser Stelle setzt diese Arbeit an. Durch die Anwendung eines tabellierten Reaktionsmechanismus ist es möglich, die Dual-Fuel-Verbrennung mit Berücksichtigung von

realen Erdgaszusammensetzungen auf einer Vollmotorgeometrie für einen mittelschnelllaufenden Großmotor abzubilden. Sofern alle notwendigen Randbedingungen mit einer hohen Genauigkeit vorliegen, werden sogar prädiktive Aussagen möglich.

3 Motorische Grundlagen

Die Dual-Fuel-Verbrennung unterscheidet sich von den konventionellen otto- oder dieselmotorischen Brennverfahren. Daher werden in diesem Kapitel die Grundlagen für das Verständnis dieses Brennverfahren erläutert.

3.1 Dual-Fuel-Motoren für Schiffsanwendungen

Motorenkonzepte mit Gas als Hauptbrennstoff lassen sich in zwei große Gruppen einteilen. Zum einen handelt es sich um die Motoren nach dem Otto-Gasverfahren. Hier wird die homogene Ladungsmasse über ein Zündsystem fremdgezündet. In diese Kategorie fallen auch die Mager-Gasmotoren mit Vorkammer. Bei diesem Verfahren kommen vorwiegend Zündkerzen zum Einsatz, welche den Zündungsprozess initiieren. Die andere Gruppe sind die Motoren nach dem Diesel-Gasverfahren. Diese beruhen auf der Selbstzündung des verwendeten Kraftstoffes. In diese Kategorie fallen die Niederdruckgaseinblasung, als auch die Hochdruckgaseinblasung. Beide haben als Zündquelle eine selbstzündende Pilotöleinspritzung gemein, welche die Verbrennung des Hauptkraftstoffes einleitet. Im Rahmen dieser Arbeit wird das Diesel-Gasverfahren mit Niederdruckeinblasung betrachtet und daher im folgenden Näher erläutert.

In der Abbildung 3.1 wird dieses Verfahren veranschaulicht. Während der Ladungswechselphase wird mittels eines Gaseinblasventils Erdgas in den Ansaugkanal eingebracht. Da sich der Gasdruck nur wenige bar über dem Ladeluftdruck befindet, wird dieses Verfahren Niederdruckgaseinblasung genannt. Die Gasdrücke reichen bis ca. 10 bar(a) [63]. Neben der Frischluft wird somit auch das Erdgas in den Brennraum angesaugt. Es entsteht eine nahezu homogene, magere Erdgas-Luftmischung, die verdichtet wird. Erdgas hat die Eigenschaft von Natur aus eine sehr stabile Verbindung zu sein,

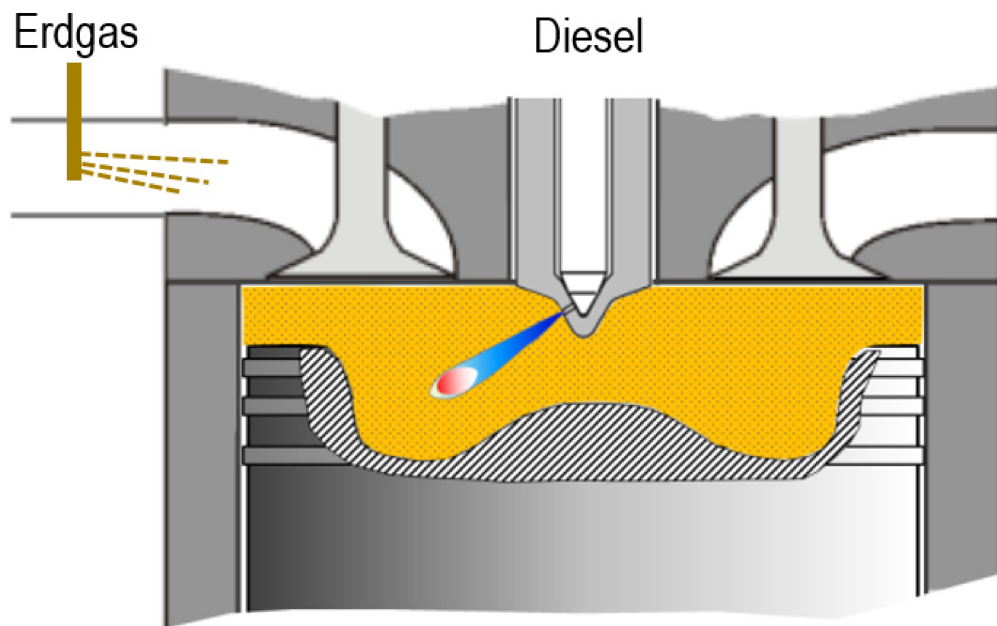


Abbildung 3.1: Schema des Diesel-Gasverfahrens mit Niederdruckeinblasung aus [28]. Während des Ladungswechsels wird Erdgas in den Ansaugkanal, in der Abbildung links dargestellt, eingeblasen und mit der Frischgasmasse in den Brennraum angesaugt. Dieses magere Erdgas-Luftgemisch wird homogen verdichtet. Zur Zündung wird eine kleine Menge Diesel eingespritzt, die sich selbst entzündet und dadurch die Zündung der Erdgas-Luftmischung einleitet.

daher sind für seine Zündung hohe Zündenergien notwendig. Da es sich bei diesem Brennverfahren um ein Magerbrennverfahren handelt, wird dieser Effekt noch verstärkt. Aus diesem Grund wird zur Zündung ein weiterer, zündwilliger Kraftstoff eingesetzt. In diesem Fall handelt es sich um Diesel oder einen ähnlichen Kraftstoff mit hoher Cetanzahl. Dieser wird vor dem oberen Totpunkt mittels eines Commonrailinjektor in den Brennraum eingespritzt. Aufgrund von Druck und Temperatur entzündet sich das Dieselspray selbst. Dessen Energiefreisetzung sorgt für die Entflammung der mageren, homogenen Erdgas-Luftmischung. Ausgehend von dem oder den Zündorten verbrennt das Erdgas mittels einer Flammenfront. Der Anteil des Diesels an der Gesamtenergie ist sehr gering. Bei Vollast beträgt der Energieanteil des Dieselkraftstoffs idealerweise rund ein Prozent der Gesamtenergie, um die Stickstoffoxidemissionen gering zu halten [67].

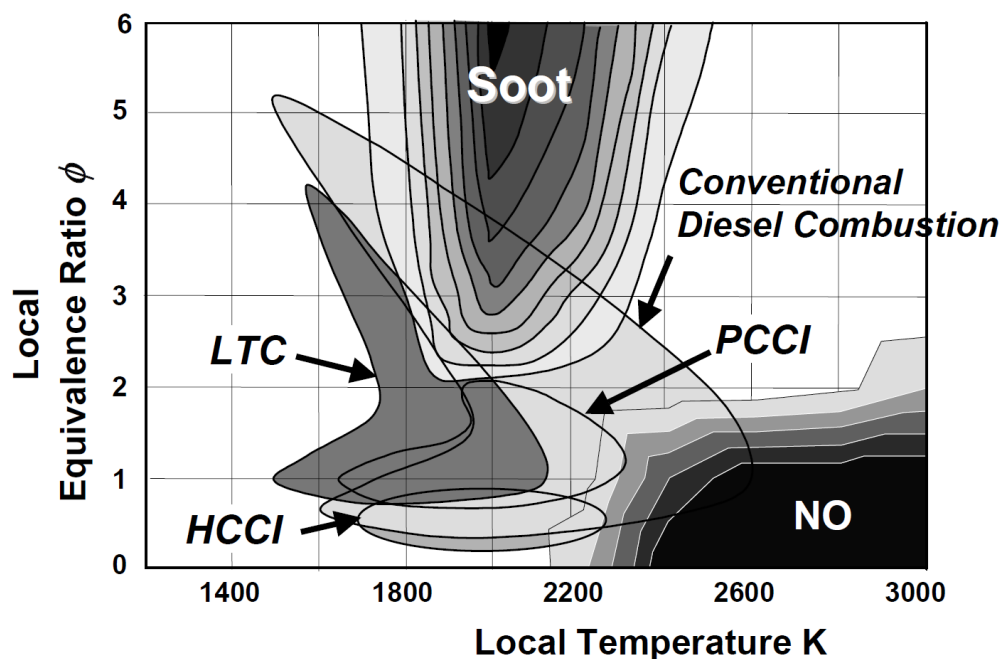


Abbildung 3.2: Bereiche der rußenden Verbrennung und der Stickstoffoxidbildung dargestellt über Äquivalenzverhältnis und Temperatur, entnommen aus [69]. Der optimale Betriebsbereich für geringe Ruß und Stickstoffoxidemissionen liegt in dem linken, unteren Quadranten bei niederen Temperaturen und geringen Äquivalenzverhältnissen. Diese Abbildung zeigt zusätzlich die Betriebsbereiche verschiedener Brennverfahren wie Homogeneous charge compression ignition (HCCI), Premixed charge compression ignition (PCCI) und Low Temperature Combustion (LTC).

Die Vorteile dieses Brennverfahrens liegen bei den Stickoxid-, Ruß- und Kohlenstoffdioxidemissionen. Zudem entfallen aufgrund des schwefelfreien Kraftstoffs Erdgas die Schwefeloxidemissionen. Die Stickstoffoxide werden durch die magere Fahrweise gering gehalten. Als Hauptquelle kann das verbrennende Dieselpilotspray gesehen werden. Gleiches gilt für die Rußemissionen. Gut ersichtlich wird dies in Abbildung 3.2. Der Betrieb im Bereich $\Phi = 0,5$ sorgt für genügend Abstand von der Rußzone. Lediglich das Dieselspray, was von der Einspritzung über Verdampfung bis zur Verbrennung einen weiten Bereich des Äquivalenzverhältnisses durchläuft kann Ruß generieren. Daher stammt das Ziel möglichst geringe Dieselanteile zu verwenden. Die Stickstoffoxide bilden sich ab einer Temperatur von circa 2000 K . Das Millerverfahren und die überstöchiometrische Betriebsweise haben zum Ziel, die Brennraumtemperatur zu senken.

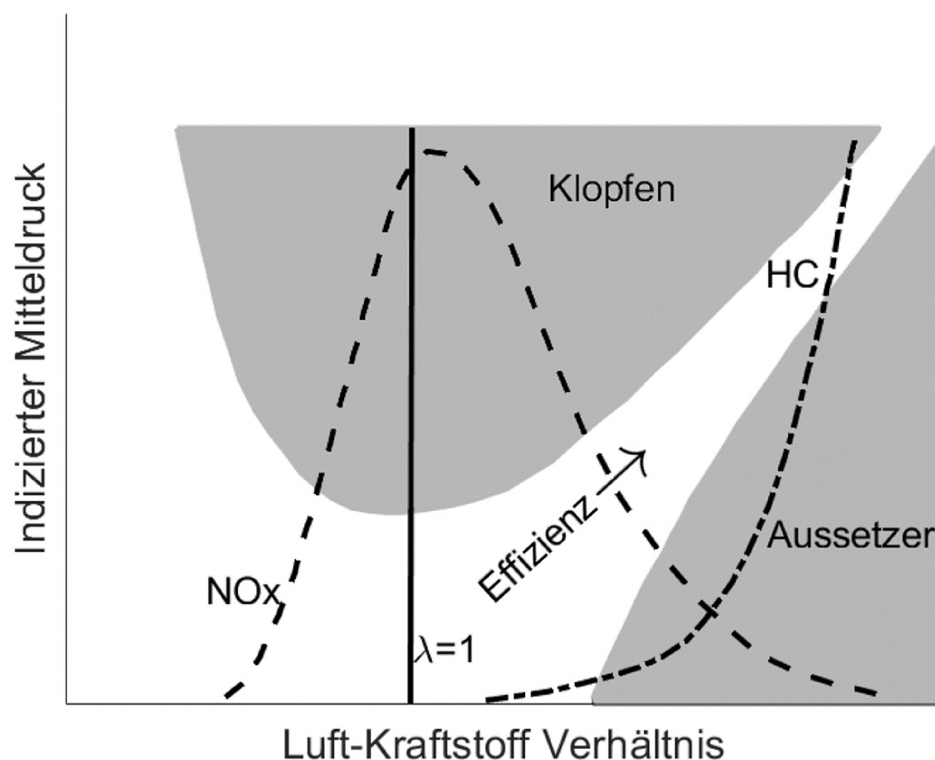


Abbildung 3.3: Grenzen der Betriebsbereiche bei Großgasmotoren nach [63]

Der Vorteil der Kohlenstoffdioxidemissionen stammt aus dem günstigeren C/H-Verhältnis des Erdgases. Damit lassen sich durch Erdgas als Treibstoff die Treibhausgasemissionen senken. Da Erdgas, insbesondere Methan, selbst als Treibhausgas gilt,

wird dieser positive Effekt aufgrund von Methanemissionen durch Methanschlupf im Ladungswechsel und unvollständiger Verbrennung minimiert. Die Herausforderung an diesem Brennverfahren ist das relativ schmale Betriebsfenster zwischen Klopfgrenze und Aussetzergrenze, insbesondere bei hohen Zylinderleistungen einzuhalten. In der Abbildung 3.3 wird dieser Korridor aufgezeigt, der mit steigendem Mitteldruck immer schmaler wird [63]. Das heißt, bereits geringe Änderungen der Betriebsbedingungen können dazu führen, dass der Bereich der Betriebsgrenzen verlassen wird. Ein sicherer Motorbetrieb setzt geringe Zyklus-zu-Zyklus Variationen mit einer genau dosierten Dieselpilotmenge voraus.

4 Thermodynamische Grundlagen und Modelle

Dieses Kapitel umfasst die thermodynamischen Grundlagen der verwendeten Modelle. Zunächst wird auf die Grundlagen der chemischen Reaktionskinetik eingegangen. Hier wird der Aufbau der Reaktionsmechanismen und deren Zusammenhang erläutert. Anschließend erfolgt ein Einblick in die Zündprozesse. Darauf folgt die Präsentation der grundlegenden Zusammenhänge der Stömungssimulation. Die Bilanzgleichungen werden aufgezeigt und Grundlegendes zur numerischen Simulation dargelegt. Geschlossen wird das Kapitel mit der Verbrennungsmodellierung durch Anwendung detaillierter Reaktionskinetik. Hier werden die Hintergründe für das verwendete Verbrennungsmodell gelegt.

4.1 Chemische Reaktionskinetik

Die Basis der Verbrennungssimulation stellt ein chemischer Reaktionsmechanismus dar. Dieser dient als Grundlage für den anschließenden Tabellierungsprozess. Daher wird zunächst auf die Grundlagen der Reaktionskinetik eingegangen.

4.1.1 Reaktionsgeschwindigkeit

Die Reaktionsgeschwindigkeit beschreibt wie schnell ein an einer chemischen Reaktion beteiligter Stoff gebildet oder abgebaut wird [37]. Beispielhaft sei die folgende Reaktionsgleichung für eine Hinreaktion dargestellt.



Bei der Betrachtung des Stoffes A, lässt sich dessen Reaktionsgeschwindigkeit durch die folgende Form darstellen.

$$\frac{d[A]}{dt} = -k^{(f)}[A]^\alpha[B]^\beta \quad (4.2)$$

Die Exponenten α und β sind dabei die Reaktionsordnungen der jeweiligen Stoffe. Der Geschwindigkeitskoeffizient der chemischen Reaktion wird über $k^{(f)}$ definiert. Der Geschwindigkeitskoeffizient kann über den modifizierten Arrhenius-Ansatz beschrieben werden.

$$k^{(f)} = AT^b \exp\left(\frac{-E_a}{R_m T}\right) \quad (4.3)$$

Hier ist A der präexponentielle Faktor, E_a die Aktivierungsenergie und R_m die universelle Gaskonstante.

4.1.2 Bruttoreaktionen und Elementarreaktionen

Elementarreaktionen sind Reaktionen, die auf molekularer Ebene genau so ablaufen, wie es in der Reaktionsgleichung beschrieben ist. Bei ihnen ist die Reaktionsordnung immer ganzzahlig und entspricht den Reaktionsmolekularitäten der Spezies. Werden Zwischenreaktionen in einer Reaktionsgleichung abgebildet, so spricht man von zusammengesetzten Reaktionen. Hier werden Zwischenprodukte, die auftreten, nicht explizit betrachtet. Bei solchen Reaktionen sind die Reaktionsordnungen typischerweise nicht ganzzahlig. Werden ganze Reaktionsmechanismen auf eine oder nur wenige Reaktionsgleichungen herunter gebrochen, so spricht man von Bruttoreaktionen. Je stärker ein detaillierter Reaktionsmechanismus, der nur auf Elementarreaktionen beruht, zusammengefasst wird, umso geringer wird auch sein Gültigkeitsbereich. Dies gilt insbesondere für den Temperaturbereich sowie die stofflichen Zusammensetzungen. Idealerweise sind, für höchste Genauigkeit, wie sie bei der Abbildung von Zündprozessen notwendig ist, nur Elementarreaktionen zu verwenden. Doch zum einen sind diese für komplexe Stoffsysteme nur schwer zu bestimmen. Dies gilt insbesondere für sehr flüchtige intermediäre Spezies, die schneller abgebaut als gebildet werden. Zum anderen steigt bei numerischen Simulationen der Rechenaufwand bei steigender Anzahl von Spezies und Reaktionen. Daher werden üblicherweise Reaktionsmechanismen verwendet, die aus Elementarreaktionen und geringen zusammengefassten Reaktionen bestehen.

Eine gängige Schreibweise, in der die meisten Reaktionsmechanismen publiziert werden, ist das Chemkin[®] Format. In diesem Format wird jede Reaktion in der Arrhenius Form gemäß Gleichung 4.3 dargestellt. In Tabelle 4.1 ist ein Auszug aus einem $H_2 - CO$ Oxidationsreaktionsmechanismus in dieser Schreibweise abgebildet.

Tabelle 4.1: Elementarreaktionen im Chemkin[®] Format, Auszug aus einem $H_2 - CO$ Oxidationsreaktionsmechanismus aus [93]

Reaktion	A [cm,mol,s]	b	$E_a/kJmol^{-1}$
$O_2 + H = OH + O$	$2,00 * 10^{14}$	0,00	70,3
$H_2 + O = OH + H$	$5,06 * 10^{04}$	2,67	26,3
$H_2 + OH = H_2O + H$	$1,00 * 10^{08}$	1,60	13,8
$OH + OH = H_2O + O$	$1,50 * 10^{09}$	1,14	0,42
...

4.1.3 Zündprozesse

Als Zündung wird ein Prozess bezeichnet, der ausgehend von Reaktanden den Übergang zu einer brennenden Flamme, beziehungsweise die komplette Umsetzung zu Produkten beschreibt. Dabei ist die Zündung ein stark instationärer Prozess. Zündprozesse sind stark vom Systemzustand abhängig. So beeinflussen insbesondere Druck und Temperatur, sowie die stoffliche Zusammensetzung die Möglichkeit einer Zündung. Lediglich innerhalb der Zündgrenzen ist eine Zündung möglich. Dabei kann zwischen Selbstzündung und Fremdzündung unterschieden werden. Bei der Selbstzündung bedarf es keiner weiteren Energiequelle um ein Kraftstoff-Luftgemisch zu entzünden. Fremdzündung liegt hingegen dann vor, wenn sich ein Kraftstoff-Luftgemisch nicht von selbst entzündet, sondern durch eine Zündquelle lokal zum Zünden gebracht wird. Durch eine äußere Quelle wird in das Zündvolumen weitere Energie eingebracht. Die Energiemenge muss so hoch sein, dass in dem Zündvolumen wieder ein Selbstzündungsprozess vorliegt. Jedoch befindet sich dieser auf einem höheren Temperaturniveau, aufgrund des Energieeintrags der Zündquelle [43].

Bei Drücken unter dem der Atmosphäre können sogenannte langsame Reaktionen auftreten. Diese werden durch die erste und zweite Zündgrenze beschrieben. In der Regel sind diese für praktische Anwendungen und insbesondere im motorischen Kontext nicht

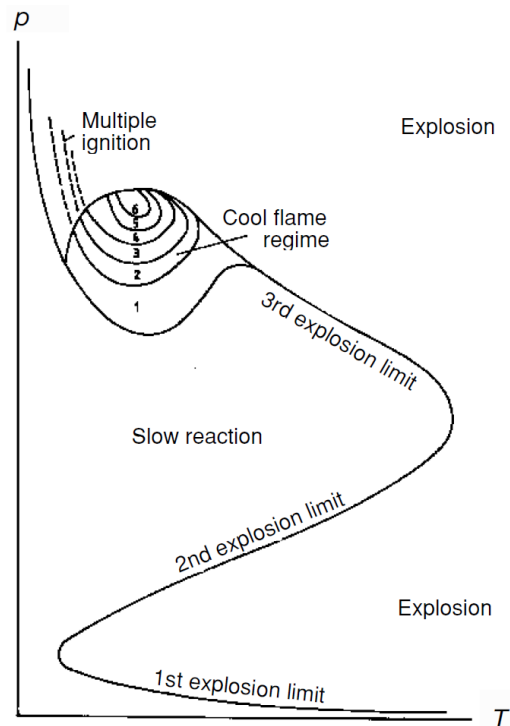


Abbildung 4.1: Schematisches p-T Explosionsdiagramm für Kohlenwasserstoffe aus [92]

relevant. Ausschlaggebend ist der Bereich über der dritten Zündgrenze. Bei der Zündung von Kohlenwasserstoffen setzt die Temperaturerhöhung im System nicht unmittelbar ein. Die Verbrennung startet nach einer gewissen Verweilzeit, die chemische Zündverzugszeit genannt wird. Dies ist charakteristisch für Radikalketten getriebene Zündungsprozesse. Während der Zündverzugszeit finden wichtige chemische Prozesse statt. Es erfolgt die Bildung von Radikalen und Kettenverzweigungsprozesse laufen ab. Aber es findet keine merkliche Temperaturerhöhung im System statt. Erst nachdem genug Radikale gebildet sind, setzt die schnelle Zündung und damit die Verbrennung ein. Aufgrund der exponentiellen Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskoeffizienten, siehe Gleichung 4.3, ist der Zündverzug sehr stark Temperaturabhängig.

Ein Sonderfall bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen sind sogenannte Kaltflamreaktionen oder kalte Flammen. Diese treten bei geringen Temperaturen auf. Hier wird der eingeleitete Zündungsprozess aufgrund Temperaturerhöhung wieder abgebrochen. Das geschieht, wenn ein Kettenverzweigungsprozess mit steigender Temperatur instabil wird. Bei gegebener Temperatur wird ein Kettenverzweigungsprozess eingeleitet und

es kommt zu einer Temperaturerhöhung. Diese Temperaturerhöhung verschiebt den Gleichgewichtszustand der Reaktion dermaßen, dass der chemische Prozess wieder abgebrochen wird [93]. Auf dieser Grundlage beruht auch das negative Temperaturverhalten der Zündverzugszeit, wie es zum Beispiel bei n-Heptan auftritt, siehe auch Abbildung 6.5 in Kapitel 6.2.

4.2 Strömungssimulation

4.2.1 Bilanzgleichungen

Zur Modellierung einer reaktiven Strömung sind eine Reihe von Gleichungen erforderlich. Diese sind die Massen-, Impuls-, Energie- und Speziesbilanzen. Im Folgenden werden diese Gleichungen eingeführt. Die detaillierte Herleitung kann anhand von zahlreichen Werken in der Literatur nachvollzogen werden. Exemplarisch können hier die Werke von Lecheler[50], Laurien[49], Schlichting[81] und Ferziger[19] genannt werden.

Massenerhaltung

Die erste Gleichung ist die Massenerhaltung, sie ergibt sich aus der Anwendung der allgemeinen Kontinuitätsgleichung auf die Masse. Wobei u_i das Geschwindigkeitsfeld und x_i die Raumrichtungen gemäß der Einstein'schen Summenkonvention [17] beschreiben.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (4.4)$$

Gleichung 4.4 beschreibt, dass die Summe aus der instationären Dichteänderung und dem konvektiven Massentransport Null ergeben muss. Der erste Term in der Gleichung ist die Änderung der volumenbezogenen Masse im Kontrollvolumen und der zweite Term stellt den ein- und austretenden Massenstrom über die Grenzen des Kontrollvolumens dar.

Impulserhaltung

Die Impulserhaltung besagt, dass die zeitliche Änderung des Impulses in einem Kontrollvolumen aufgrund der auf das Kontrollvolumen wirkenden Kräften, sowie dem Massentransport über die Kontrollvolumengrenzen resultiert. Die Impulserhaltungsgleichungen bestehen aus mehreren Gleichungen, je eine für jede Raumrichtung. Bei einer dreidimensionalen Beschreibung werden somit drei Gleichungen für die Impulserhaltung benötigt. Diese Gleichungen werden unter Anwendung von Annahmen für newtonsche Fluide auch Navier-Stokes-Gleichungen genannt. Nach manchen Quellen zählt auch die Massenerhaltung mit zu den Navier-Stokes-Gleichungen.

Für ein kompressibles, newtonsches Fluid lautet die Navier-Stokes-Gleichung folgendermaßen.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial p}{\partial x_i} = \rho f_i \quad (4.5)$$

Der erste Term beschreibt die instationäre Änderung im System und der zweite den konvektiven Transport des Impulses. Durch den dritten Term sind die viskosen Kräfte und durch den vierten die Druckkräfte dargestellt. Der Term der rechten Seite bildet die auf das Kontrollvolumen äußeren Volumenkräfte f_i ab. Dies ist zum Beispiel die Erdanziehungskraft. Mit τ_{ij} wird der viskose Spannungstensor bezeichnet. Für ein newtonsches Fluid wird er durch folgende Gleichung beschrieben.

$$\tau_{ij} = \mu(2S_{ij} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\frac{\partial u_k}{\partial x_k}) \quad (4.6)$$

S_{ij} ist der Deformationstensor.

$$S_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \quad (4.7)$$

Der zweite Term auf der rechten Seite in Gleichung 4.6 wird als Stokes'scher Normalspannungsterm bezeichnet. Er definiert, dass die Summe aller Normalspannungen Null ergeben muss [81].

Energieerhaltung

Bei Betrachtung einer reaktiven Strömung ist neben den Navier-Stokes-Gleichungen auch die Energieerhaltung mit zu berücksichtigen. Es gilt nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik, dass Energie weder produziert noch vernichtet werden kann, sondern dass sich die spezifische Gesamtenergie e_t eines Systems nur aufgrund von Wärme- oder Stofftransport, sowie durch verrichtete Arbeit verändern kann. Bezogen auf ein Kontrollvolumen gilt folgende Bilanzgleichung für die Energie.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i e_t + u_i p) - \frac{\partial}{\partial x_i}(u_j \tau_{ji}) + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \rho u_i f_i + S_r \quad (4.8)$$

Der erste Term der linken Seite beschreibt den Energiespeicherterm, während der zweite wiederum den konvektiven Transport wiedergibt. Reibungskräfte, wie viskose Dissipation wird über den dritten Term beschrieben. Der vierte Term spiegelt zu- und abgeführte Wärmeströme q_i wieder. Der erste Term auf der rechten Seite steht für die wirkenden äußeren Volumenkräfte und der zweite Term ist der Strahlungsquellterm S_r . Ein Reaktionsquellterm tritt in der Gleichung 4.8 nicht explizit auf, da die Bildungsenthalpien der Spezies bereits in der Gesamtenergie berücksichtigt werden [23].

Spezies

Sobald bei einer numerischen Simulation mehrkomponentige Gemische, wie sie bei reaktiven Strömungen auftreten, betrachtet werden, ist zusätzlich für jede Spezies eine weitere Transportgleichung zu lösen. Hierbei ist für jede Komponente oder Spezies der Massenbruch Y_α zu bilanzieren.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_\alpha) + \frac{\partial j_{\alpha i}}{\partial x_i} = S_\alpha \quad (4.9)$$

Der erste Term der linken Seite steht erneut für die Speicherung der jeweiligen Spezies im Kontrollvolumen, der zweite Term steht für den konvektiven Transport über die Systemgrenzen. Der dritte Term beschreibt den Transport aufgrund von Diffusion. S_α steht für den Reaktionsquellterm. Abhängig von den Reaktionen kann hier eine Quelle oder Senke auftreten, bei der die jeweilige Spezies gebildet oder verbraucht wird. An

dieser Stelle findet eine Kopplung aller Spezies zur Reaktionskinetik statt. Zu jeder Zeit muss dabei die Massenerhaltung eingehalten werden.

Der Diffusionsstrom $j_{\alpha i}$ lässt sich über das Fick'sche Gesetz beschreiben [89].

$$j_{\alpha i} = -\rho \Gamma_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i} \quad (4.10)$$

Zustandsgleichungen

Neben den oben genannten Erhaltungsgleichungen sind zum Schließen des Gleichungssystems weitere Gleichungen notwendig. Um Dichte, Temperatur und Druck ins Verhältnis zu setzen, wird die thermische Zustandsgleichung benötigt. Unter Annahme eines idealen Gases ergibt sich die thermische Zustandsgleichung für ideale Gase.

$$p = \rho RT \quad (4.11)$$

Weiter besteht die Möglichkeit einen Realgasansatz für die thermische Zustandsgleichung zu wählen. Ein Beispiel ist der folgende Ansatz von Peng und Robinson [72].

$$p = \frac{R_m T}{V_m - b} - \frac{a\alpha}{V_m(V_m + b) + b(V_m - b)} \quad (4.12)$$

Hierbei sind

$$a = \frac{0,457235 * R_m^2 T_c}{p_c} \quad (4.13)$$

und

$$b = \frac{0,077796 * R_m T_c}{p_c} \quad (4.14)$$

sowie

$$\alpha = (1 + (0,37464 + 1,54226 \Omega - 0,26992 \Omega^2)(1 - \sqrt{T_r}))^2. \quad (4.15)$$

In diesen Gleichungen steht V_m für das molare Volumen, T_c für die kritische und T_r für die reduzierte Temperatur. Ω steht für den azentrischen Faktor der nach Pitzer[76] wie folgt definiert ist. Dabei steht p_s für den Sättigungsdampfdruck.

$$\Omega = -\log_{10}\left(\frac{p_s}{p_c}\right)_{T_r=0,7} - 1 \quad (4.16)$$

Die kalorische Zustandsgleichung koppelt die spezifische Enthalpie mit der spezifischen Wärmekapazität und der Temperatur.

$$dh = c_p(T) dT \quad (4.17)$$

Bei der Verwendung von mehrkomponentigen Gemischen lässt sich die spezifische Wärmekapazität der Mischung über einen massengewichteten Ansatz beschreiben. Hierbei handelt es sich um eine ideale Mischung.

$$c_p = \sum_{i=1}^N c_{p,\alpha} Y_\alpha \quad (4.18)$$

Die spezifischen Wärmekapazitäten der Einzelkomponenten können über das NASA Polynom[60] abgebildet werden.

$$\frac{c_{p,\alpha}(T)}{R_m} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^4 \quad (4.19)$$

Die Koeffizienten a_1 bis a_5 werden als Tabellen veröffentlicht. Dies ist als NASA Format bekannt und wird bei nahezu allen chemischen Reaktionsmechanismen und gängigen Chemielösern angewandt.

4.2.2 Numerische Simulation

Bei langsamen Strömungen oder bei hoch viskosen Fluiden ist die Bewegung sehr gleichmäßig. In diesem Fall wird von einer laminaren Strömung gesprochen. Ist hingegen die Strömungsgeschwindigkeit hoch und oder, wie im Fall von Gasen, die Viskosität gering, so verhält sich die Strömung fluktuierend und chaotisch. Hier wird von einer turbulenten Strömung gesprochen. Die Größe, welche den Strömungszustand beschreibt, ist die Reynolds-Zahl [7] [79].

$$Re = \frac{ul_c}{\nu} \quad (4.20)$$

Hierbei steht l_c für eine charakteristische Länge. Am Beispiel einer Rohrströmung wäre dies der Rohrdurchmesser. Es existieren für typische Geometrien kritische Reynoldszahlen, bei denen der Übergang vom laminaren zum turbulenten Zustand stattfindet.

Die in Kapitel 4.2.1 genannten Bilanzgleichungen sind sowohl für laminare als auch für turbulente Strömungen gültig. Jedoch gilt für das Verhältnis zwischen den kleinsten Skalen η , auch Kolmogorov-Länge genannt, und den Makromaßen L_{Sk} folgender Zusammenhang [21].

$$\frac{L_{Sk}}{\eta} = Re^{\frac{3}{4}} \quad (4.21)$$

Mit steigender Reynoldszahl verringern sich die kleinen Skalen. Die Makromaße, die allein von der Geometrie abhängig sind, bleiben hingegen konstant. Damit steigt der numerische Aufwand mit steigender Reynoldszahl aufgrund der höheren räumlichen- und zeitlichen Auflösung, die zur Betrachtung der kleinen Skalen notwendig wird. Technische Prozesse wie motorische Verbrennungen, laufen in der Regel weit oberhalb der kritischen Reynoldszahl ab, so dass eine direkte Simulation selbst mit High Performance Computing (HPC) Rechenclustern für reale Anwendungen nicht darstellbar ist.

Direkte numerische Simulation (DNS) ist heute nur für einige akademische Spezialfälle in akzeptabler Rechenzeit darstellbar. Hauptsächlich genutzt werden heute Large Eddy Simulation (LES) und Reynolds averaged Navier Stokes Simulation (RANS), bei denen der Rechenaufwand durch vollständige oder teilweise Modellierung der Turbulenz erheblich reduziert wird. Bei der Reynolds averaged Navier Stokes Simulation wird die turbulente Strömung statistisch durch Mittelwerte und Schwankungsgrößen beschrieben. Dies erfolgt durch das Verfahren der Reynoldsmittelung. Dabei wird eine turbulente Größe mit folgender Zerlegung in einen Mittelwert und einen Schwankungswert aufgeteilt [21].

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \quad \bar{\phi}' = 0 \quad (4.22)$$

Mit Anwendung dieser Zerlegung auf die Navier-Stokes-Gleichungen erhält man die reynoldsgemittelten Navier-Stokes-Gleichungen. Daher folgt auch der Name Reynolds averaged Navier Stokes (RANS) für dieses Verfahren. Als Resultat der Zerlegung kommt es zur Korrelation der Schwankungswerte des Geschwindigkeitsfeldes, den Reynoldsspannungen. Diese Korrelation bringt neue unbekannte Größen in das Differenzialgleichungssystem, so dass dieses nicht mehr geschlossen und lösbar ist. Das ist als

Schließungsproblem bekannt [19]. Zur Lösung dieser Problematik werden Turbulenzmodelle eingesetzt.

Die meisten Turbulenzmodelle basieren auf der Hypothese von Boussinesq [8]. Nach dieser Hypothese werden die Reynoldsspannungen in Analogie zu den Spannungen, hervorgerufen durch die molekulare Viskosität, approximiert. Die Annahme beruht auf der Tatsache, dass bei laminaren Strömungen der Massen-, Impuls- und Energietransport in Querrichtung zur Strömung von der Viskosität abhängig ist. Daher folgt die Hypothese, dass auch die Turbulenzeffekte auf diese Prozesse durch eine erhöhte Viskosität, der Wirbelviskosität μ_t beschrieben werden kann [19]. Demnach können die Reynoldsspannungen wie folgt definiert werden.

$$-\overline{\rho u'_i u'_j} = \mu_t \left(\frac{\partial \overline{u'_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u'_j}}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \rho \delta_{ij} k \quad (4.23)$$

Die Wirbelviskosität kann gemäß Gleichung 4.24 beschrieben werden. Die ist eins der möglichen Zweigleichungsmodelle für die Turbulenz und wird $k - \epsilon$ -Modell genannt. Die Herleitung dieses kann in Ferziger[19] und Wilcox[95] nachvollzogen werden.

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (4.24)$$

4.3 Verbrennungsmodellierung mit detaillierter Reaktionskinetik

Bei der Anwendung von detaillierten Reaktionsmechanismen ist eine der größten Herausforderung, dass für jede chemische Spezies eine Speziestransportgleichung gelöst werden muss. In Kombination mit aufwändigen Geometrien, wie sie bei Verbrennungsmotoren auftreten, kann dies zu einem enormen Rechenaufwand führen. Daher ist die Verwendung von vereinfachten Reaktionskinetiken wünschenswert. Problematisch ist, dass der Gültigkeitsbereich von reduzierten Mechanismen eingeschränkt ist [93]. So gelten diese meist nur in einem definierten Druck- und Temperaturbereich oder sind nur für vorgemischte beziehungsweise nicht vorgemischte Flammen anwendbar. Um einen reduzierten Reaktionsmechanismus zu erhalten, kann dieser, ausgehend von einem komplexen Mechanismus, manuell über Sensitivitäts- und Reaktionspfadanalyse

reduziert werden oder man verwendet automatisierte Reduktionsverfahren. Eine Möglichkeit ist die Anwendung intrinsischer, niedrig-dimensionaler Mannigfaltigkeiten (ILDM), die von Maas [55] entwickelt wurde.

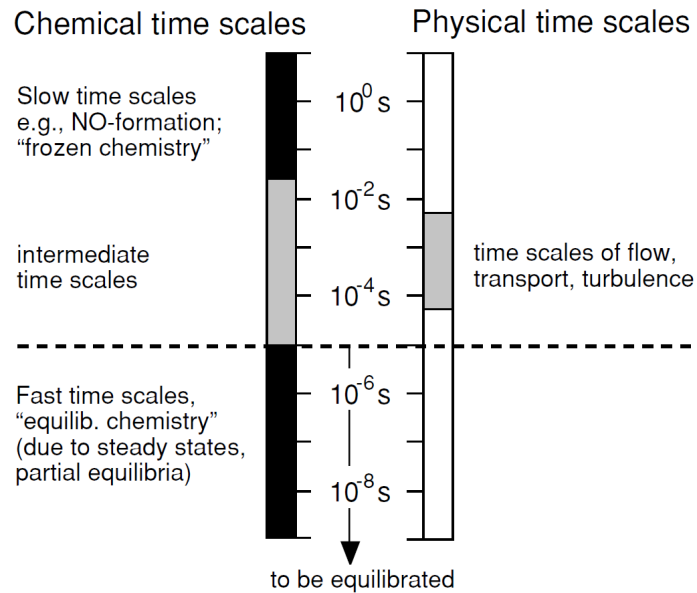
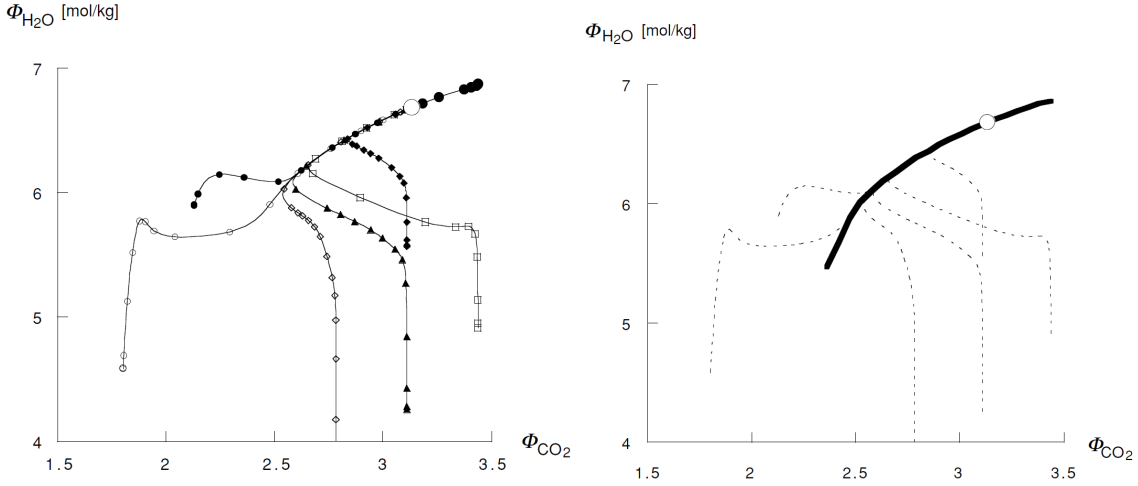


Abbildung 4.2: Zeitskalen bei chemischen reagierenden Strömungen aus [92]. Bei genügend schnellem Ablauf der Reaktionen, kann die Annahme des Gleichgewichtszustandes angenommen werden.

Dieser Ansatz begründet sich auf der Vorstellung, dass einige Zweige im Zustandsraum der Reaktionskinetik so schnell ablaufen, dass die Annahme von Gleichgewichtszuständen und Quasistationarität gerechtfertigt ist, siehe Abbildung 4.2. Dadurch können diese von den physischen Prozessen entkoppelt werden. In Abbildung 4.3a sind die Trajektorien einer Reaktionskinetik für die Oxidation von Methan mit Luft dargestellt. Durch die Anwendung der ILDM Methode kann diese in eine eindimensionale Mannigfaltigkeit in Abbildung 4.3b überführt werden.

Bei der Nutzung der ILDM Methode ist zu berücksichtigen, ob die Annahme von Gleichgewicht und Quasistationarität gerechtfertigt ist. Dazu benötigt es hohe Umsatzraten und hohe Temperaturen im System. Bei geringeren Temperaturen müssen die Dimensionen der Mannigfaltigkeit erhöht werden. Es kann in dem Maße erforderlich sein, dass der Zustandsraum der Reaktionskinetik in Originalkomplexität wiederhergestellt wird. Dies birgt enorme numerische Aufwände.



(a) Trajektorien für die Methan Oxidation. (b) Darstellung der eindimensionalen Mannigfaltigkeit für die Methan Oxidation, projiziert in die $H_2O - CO_2$ -Ebene. Der Zustandsraum wurde durch die Gleichgewichtsannahme für schnelle Prozesse verringert.

Abbildung 4.3: Trajektorien für die Methan Oxidation aus [92].

Bei der Simulation von vorgemischten und nicht vorgemischten Flammen kann das Modell der Flamelet angewendet werden. Es basiert auf der Annahme, dass die Flammen aus kleinen laminaren Flammenfronten, den Flamelets, zusammengesetzt sind. Das Flamelet Generated Manifold (FGM) Modell von van Oijen [90] verbindet den Flamelet-Ansatz mit der Konstruktion einer Mannigfaltigkeit ähnlich der ILDM-Methode von Maas [55]. Der Vorteil ist die Verwendung eines reduzierten Zustandsraumes für das Reaktionsgleichungssystem ähnlich der ILDM Methode, jedoch ohne dessen Niedertemperaturnachteil beizubehalten [43].

Die mathematische Basis der Methode entstammt der Flamelet-Gleichung unter Vernachlässigung des Perturbationterms. Es wird davon ausgegangen, dass Störungen wie Flammenstreckung und Massenfluktuationen im Verhältnis klein sind und vernachlässigt werden können.

$$m \frac{\partial Y_\alpha}{\partial s} - \frac{\partial}{\partial s} \left(\frac{\lambda}{Le_\alpha c_p} \frac{\partial}{\partial s} \right) = \omega_\alpha^+ - \omega_\alpha^-, \quad \alpha = 1, \dots, N \quad (4.25)$$

$$h = \sum_{\alpha=1}^N Y_{\alpha} h_{\alpha}, \quad h_{\alpha}(T) = h_{\alpha}^0 + \int_{T^0}^T c_{p,\alpha}(T) dT \quad (4.26)$$

Die Lösung des Gleichungssystems von $(Y_i(s), h(s))$, bestehend aus der Flameletgleichung 4.25 und der Gleichung für die spezifische Enthalpie 4.26, wird Flamelet genannt. Es beschreibt eine Kurve $X(s)$ durch die Flamme in Abhängigkeit der lokalen Spezieszusammensetzung und wird als eindimensionale Mannigfaltigkeit, welche durch den Weg s parametrisiert wird, betrachtet [90], siehe Abbildung 4.4.

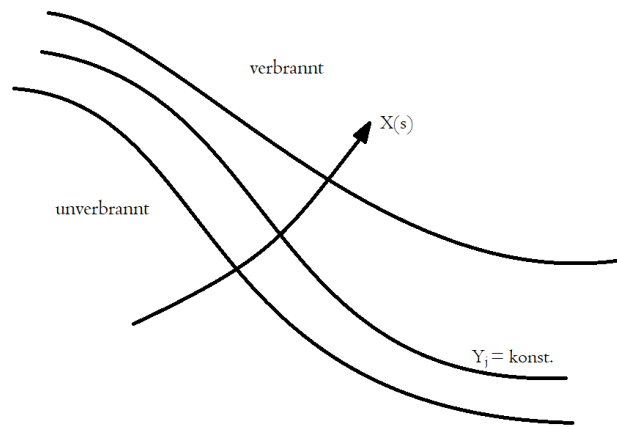


Abbildung 4.4: Schematische Darstellung nach [90] einer vorgemischten Flamme, bei der die Kurve $X(s)$ durch die Flammenfront verläuft

Bei dem FGM Ansatz werden die thermochemischen Variablen in einem Preprocessing-schritt, in Abhängigkeit vom Systemzustand, berechnet und als Funktion von wenigen Kontrollvariablen in einer Datenbank gespeichert. Somit müssen während der Strömungssimulation lediglich Transportgleichungen für die Kontrollvariablen gelöst werden. Die thermochemischen Variablen sind dann aus der Datenbank lesbar. Die Anzahl der Kontrollvariablen ist abhängig von der Anwendung und bestimmt die Dimension der Datenbank. Typische Kontrollvariablen sind die Reaktionsfortschrittsvariable, die Enthalpie, der Mischungsbruch, sowie die Varianzen von Reaktionsfortschrittsvariable und Mischungsbruch [14].

In Abhängigkeit von zu definierenden und zu diskretisierenden Systemzuständen werden die Lösungen der verwendeten Reaktionskinetik berechnet. Dazu wird das Modell eines perfekten Rührreaktors unter Nutzung konstanter Druckbedingungen verwendet [1].

4.4 Zusammenfassung

Das Ziel dieses Kapitels ist es, die thermodynamischen Grundlagen für die Verbrennungssimulation darzulegen. Dazu sind die Grundzüge der chemischen Reaktionskinetik und der Aufbau von Reaktionsmechanismen im Chemkin® Format erläutert worden. Daraufhin erfolgte ein Einblick in die Zündprozesse von Kohlenwasserstoffen. Im darauf folgenden Abschnitt wurden die Grundzüge der Strömungssimulation zusammengefasst. Hier sind die Grundgleichungen präsentiert sowie der Ansatz der Turbulenzmodellierung angerissen worden. Geschlossen wird dies Kapitel mit der Erläuterung der FGM-Verbrennungsmodells, welches auf tabellierter Reaktionskinetik beruht.

5 Versuchsträger

Im Folgenden soll der Versuchsträger, an dem die Messergebnisse, welche zur Validierung des numerischen Modells genutzt wurden, vorgestellt werden. Dieser ist ein Einzylinder Forschungsgroßmotor, der am Lehrstuhl für Kolbenmaschinen und Verbrennungsmotoren der Universität Rostock disloziert ist. Es handelt sich dabei um einen mittelschnell-laufenden Schiffsdieselmotor, der für das Dual-Fuel-Brennverfahren ausgelegt ist. Für den einen Zylinder liegt das Hubvolumen in der Größenordnung von 40 Litern. In der folgenden Tabelle 5.1 sind die typische Kenngrößen des Versuchsträgers nochmal zusammengefasst.

Tabelle 5.1: Konfiguration des Einzylinderprüfstandes

Parameter	Konfiguration
Bohrung	340 mm
Hub	460 mm
Leistung	500 KW
Nenndrehzahl	720 1/min
Gassystem	Niederdruckgaseinblasung via Einblaseventil in den Ansaugkanal
Dieselsystem	Commonrail System mit max. 2200 bar Raildruck

Der Prüfstand besitzt eine Reihe von Freiheitsgraden. So sind die Ventilsteuerzeiten, über frei bewegliche Nockensegmente, frei und unabhängig voneinander mechanisch einstellbar. Zusätzlich ist ein schneller Wechsel zwischen zwei definierten Nockenwellenpositionen im laufenden Betrieb möglich. Dies ermöglicht die Anpassung des Millergrades an den Betriebszustand. Über ein frei programmierbares Steuergerät können Einspritz-timing, Raildruck und Mehrfacheinspritzungen des Dieselpilotcommonrailinjektor variabel gefahren werden. Zur Dieselkraftstoffeinspritzung liegen unterschiedliche Commonrailinjektoren für zentrale und dezentrale Einbauposition mit verschiedenen Düsenkonfigurationen vor. Zudem kann über ein Pumpe-Leitung-Düse System der

Motor im konventionellen Dieselmotorbetrieb gefahren werden. Über eine angeschlossene Gasmischstrecke ist es möglich, die Gasqualität, des aus dem Stadtnetz stammenden Erdgases, anzupassen. Dies ermöglicht die Aufrechterhaltung gleicher Gaseigenschaften über mehrere Versuchstage hinweg. Zudem ist es möglich, durch Zudosierung von Propan und Kohlenstoffdioxid Erdgase mit niedriger Qualität abbilden zu können. Ein Gaschromatograph ermöglicht die Onlineüberwachung der Gasqualität. Durch zwei Ladeluftkompressoren, die eine maximale Luftmasse von $5400 \frac{\text{kg}}{\text{s}}$ bei einem Druck von 8,5 bar(a) liefern, ist es möglich, sowohl Ladedruck als auch Abgasgegendruck frei einzustellen. Abgasseitig wird dafür eine geregelte Abgasklappe verwendet. Die Gesamtheit des Prüfstandes ist in Abbildung 5.1 schematisch dargestellt.

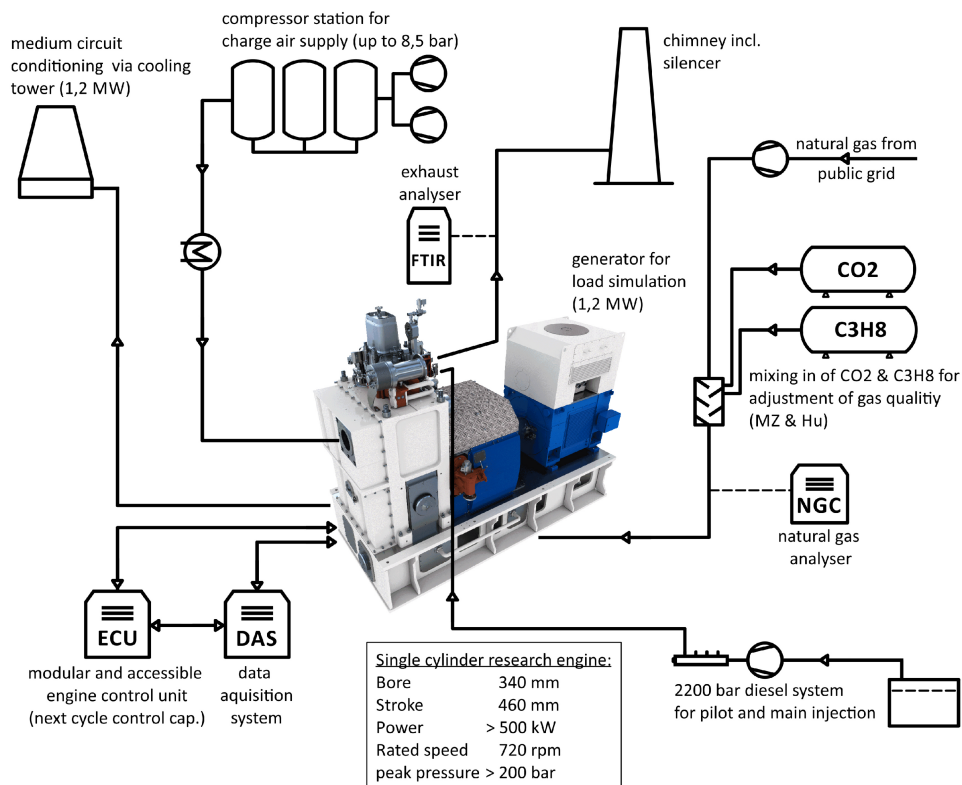


Abbildung 5.1: Schaubild des Einzylinderprüfstandes mit seiner Peripherie aus [31].

Für die Messdatenerfassung wurde am Lehrstuhl eine Softwareumgebung auf LabView-Basis entwickelt und programmiert. Die Hardware besteht dabei zum größten Teil auf Komponenten von National Instruments. Für die Brennraumindizierung wird auf ein AVL Indiset System zurückgegriffen. Und als Abgasmesstechnik ist eine AVL SESAM i60 FT und ein AVL Smoke Meter im Einsatz.

6 Reaktionsmechanismus für die Dual-Fuel-Verbrennung

Da gängige Verbrennungsmodelle nur schwer mit zwei verschiedenen Kraftstoffen angewandt werden können und diese zudem über Konstanten auf einen Betriebspunkt kalibrierbar sind, ist eine möglichst prädiktive Simulation der Dual-Fuel-Verbrennung nicht möglich. Daher wurde hier für die Verbrennungssimulation die Anwendung detaillierte chemischer Reaktionen festgelegt. Die Basis bildet ein für die Problemstellung geeigneter Reaktionsmechanismus. Es wurden einige Bedingungen definiert, die dieser Mechanismus zu erfüllen hat. Für die Anwendung der Verbrennungssimulation mittels detaillierter Reaktionskinetik ist ein Reaktionsmechanismus notwendig, der alle relevanten Spezies enthält. In der Literatur wird sich bei der Dual-Fuel-Verbrennungssimulation, auf die beiden Kraftstoffspezies Methan und n-Heptan beschränkt. Jedoch besteht das real verwendete Erdgas nie aus reinem Methan. Je nach Erdgasqualität sind ebenso länger-kettige Komponenten enthalten, siehe Tabelle 6.1. Da in dieser Arbeit auch der Einfluss unterschiedlicher Gasqualitäten untersucht werden soll, sind weitere Spezies mit berücksichtigt worden. Neben Methan sind nennenswerte Anteile von Ethan und Propan sowie Kohlenstoffdioxid im realen Erdgas vorhanden. Daher galt als Randbedingung, dass diese Komponenten im verwendeten Reaktionsmechanismus berücksichtigt werden.

Da Dieselkraftstoff, welcher als Zündquelle für die Entflammung der Erdgas-Luftmischung genutzt wird, ein Mehrkomponentenstoff mit variierender Zusammensetzung ist, musste auf einen Referenzkraftstoff zurückgegriffen werden. Als Referenzkraftstoff wurde hier n-Heptan gewählt. Diese Auswahl wird in Literaturangaben oft getroffen, da n-Heptan ähnliche Zündigenschaften wie der Dieselkraftstoff aufweist [86]. Manche Quellen erwähnen auch n-Dodekan als möglichen Referenzkraftstoff für Diesel aufgrund

Tabelle 6.1: Übersicht der weltweiten Gasqualitäten [42]

	Stickstoff %	Methan %	Ethan %	Propan %	höhere Kohlenwasserstoffe C4+ %
Algeria-Arzwe	0,56	87,98	9	1,99	0,47
Algeria-Bethioua 1	1,2	87,89	8,39	2,12	0,7
Algeria-Bethioua 2	0,92	91,39	7,17	0,52	0
Algeria-Skida	1,02	91,19	7,02	0,66	0,11
Egypt-Damietta	0,08	97,7	1,8	0,22	0,2
Egypt-Idku	0	97,2	2,3	0,3	0,2
Libya	0,69	81,57	13,38	3,67	0,69
Nigeria	0,08	91,28	4,62	2,62	1,4
Abu Dhabi	0,29	84,77	13,22	1,63	0,09
Oman	0,35	87,89	7,27	2,92	1,57
Qatar	0,36	90,1	6,23	2,32	0,99
Trinidad	0,03	96,82	2,74	0,31	0,1
USA-Alaska	0,17	99,73	0,08	0,01	0
Australia-NWS	0,09	87,39	8,33	3,35	0,84
Brunei	0,05	90,61	4,97	2,89	1,48
Indonesia-Arun	0,06	91,16	6,01	1,84	0,93
Indonesia-Badak	0,02	89,76	5,06	3,54	1,62
Malaysia	0,16	91,15	4,96	2,79	0,94

des ähnlichen C/H Verhältnisses und damit ähnlicher physikalischer Eigenschaften. Im Kontext der Dual-Fuel-Verbrennung mit den geringen Dieselanteilen wird die Zündeigenschaft höher gewichtet, was die Wahl auf n-Heptan unterstützt. Aktuelle Dual-Fuel-Serienmotoren werden homogen mit Luftüberschuss gefahren. Daher muss auch der Reaktionsmechanismus für diese magere Verbrennung geeignet sein. Eine weitere Randbedingung ist der hohe Druckbereich, der bei motorischer Verbrennung vorliegt. Hier zeigt sich eine große Herausforderung. Reaktionsmechanismen werden üblicherweise mittels Messungen an Rapid Compression Machines (RCM) und Shocktubes validiert. Meist liegen diese Messungen nur bei geringen Drücken vor. Dies erschwert die Validierung der Reaktionsmechanismen für hohe Druckbereiche. Die Tabelle 6.2 zeigt eine Übersicht über publizierte Messdaten.

Tabelle 6.2: Übersicht über experimentelle Untersuchungen zu Zündverzügen

Autor	Prüfstand	Kraftstoff	T	p	Mischung	Ref.
-	-	-	K	atm	-	-
Ciezki, Adomeit	Shocktube	n-Heptan	750-1250	3-42	$\phi = 0,5-3,0$	[11]
Gauthier et al.	Shocktube	n-Heptan	806-1115	15-60	$\phi = 1,0$	[22]
Herzler et al.	Shocktube	n-Heptan	720-1100	50	$\phi = 0,1-0,4$	[34]
Shen et al.	Shocktube	n-Heptan	786-1396	9-58	$\phi = 0,25-1,0$	[82]
Griffiths et al.	RCM	n-Heptan	660-650	7-9	$\phi = 1,0$	[26]
Minetti et al.	RCM	n-Heptan	640-940	3-4,5	$\phi = 1,0$	[65]
Tanaka et al.	RCM	n-Heptan	800-880	4	$\phi = 0,2-0,5$	[88]
Silke et al.	RCM	n-Heptan	640-960	10,15,20	$\phi = 1,0$	[83]
Higgin, Williams	Shocktube	Methan	1800-2500	0,2-0,4	$\phi = 0,5$	[35]
Crossley et al.	Shocktube	Methan	1400-2000	0,2	$\phi = 1,0$	[12]
Eubank et al.	Shocktube	Methan	1200-1850	4	$\phi = 0,2-0,4$	[18]
Zellner et al.	Shocktube	Methan	1400-2000	3	$\phi = 0,2$	[96]
Krishnan et al.	Shocktube	Methan	1700-1900	1-4	$\phi = 0,5-2$	[44]
Spadaccini et al.	Shocktube	Methan	1300-2000	3-15	$\phi = 0,45-1,25$	[85]
Cheng et al.	Shocktube	Methan	800-2400	1-3	$\phi = 0,5-1,25$	[10]
Frenklach et al.	Shocktube	Methan	1300-1600	2,5	$\phi = 1$	[20]
Goy et al.	Shocktube	Methan	900-1600	5-40	$\phi = 0,5-1$	[24]
Lamoureux et al.	Shocktube	Methan	1485-1900	3-13	$\phi = 0,5-2$	[48]
Bakali et al.	Shocktube	Methan	1300-1800	0,1	$\phi = 0,75-1,5$	[5]
Huang, Bushe	Shocktube	Methan	900-1400	16-40	$\phi = 1$	[38]
Petersen et al.	Shocktube	Methan	1200-2000	1-25	$\phi = 0,5$	[73]

Zusammenfassend können folgende Bedingungen für einen geeigneten Reaktionsmechanismus definiert werden:

- Im Erdgas die Spezies: Methan, Ethan, Propan, Kohlenstoffdioxid und Wasser
- n-Heptan als Referenzkraftstoff für Diesel
- Anwendbar bei mageren Erdgas-Luftmischungen, bis zu $\lambda = 2$
- Motorrelevanter Druck- und Temperaturbereich, 600 bis 2000 K und 1 bis 200 bar

6.1 Mechanismen aus Literaturquellen

Das Ziel dieser Arbeit war die Entwicklung einer Methode zur Dual-Fuel-Verbrennungssimulation und nicht die Erstellung eines kompletten Reaktionsmechanismus. Dies hätte

zum einen die vorhandenen technischen Möglichkeiten überstiegen und zum anderen waren die dafür benötigten Validierungsdaten nicht verfügbar. Für das prinzipielle Vorgehen zur Entwicklung eines Reaktionsmechanismus sei auf die Arbeiten [71], [64], [51] und [59] verwiesen. In dieser Arbeit musste auf bestehende Mechanismen zurückgegriffen werden. Aus diesem Grunde wurde zu Beginn eine Literaturrecherche durchgeführt, um relevante Mechanismen zu finden, welche später die Basis für den späteren Dual-Fuel-Reaktionsmechanismus sein können. Eine Übersicht dieser Mechanismen findet sich in Tabelle 6.3

Tabelle 6.3: Übersicht über bestehende Reaktionsmechanismen aus der Literatur

Mechanismus	Erdgas	n-Heptan	Spezies	Reaktionen	Anwendung
USC Mech vII	Ja	Nein	111	784	Allg. Verbrennung
Grimech 3.0	Ja	Nein	53	325	Gasturbinen
UBC Mech 2.0	Ja	Nein	40	194	Allg. Verbrennung
SanDiego	Ja	Ja	58	282	Allg. Verbrennung
ERC	Nein	Ja	29	52	Verbrennungsmotoren
LLNL	Nein	Ja	654	2827	Verbrennungsmotoren
CTI-Mech	Ja	Ja	192	1156	Allg. Verbrennung
LawCG-Heptane	Nein	Ja	52	48	Allg. Verbrennung
LawCG-Methane	Ja	Nein	92	621	Allg. Verbrennung
Galway	Ja	Nein	118	665	Gasturbinen
Creck	Ja	Ja	484	19341	Allg. Verbrennung

Einer der bekanntesten und vielfach genutzten Reaktionsmechanismen ist der Grimech 3.0 [84], welcher bis zum Jahre 2000 vom Gas Research Institute entwickelt wurde. Er besteht aus 53 Spezies und 325 Reaktionen. Hauptanwendungsgebiet ist die Simulation der Verbrennung in Gasturbinen. Dies zeigt sich auch anhand der Temperatur- und Druckbereichen, in denen der Mechanismus validiert worden ist. Der Grimech 3.0 wurde für vorgemischte Flammen in einem Temperaturbereich von 1000 bis 2500 K für die Verbrennung von Methan als auch Erdgas entwickelt. Das Äquivalenzverhältnis reicht von $\Phi = 0,1$ bis $\Phi = 5$. Der Druckbereich geht nur bis 10 atm, was jedoch für motorische Anwendungen deutlich zu gering ist. Dies ist jedoch ein Problem, was alle Reaktionsmechanismen aufweisen. Begründet wird dies durch mangelnde Validierungsdaten in hohen Druckbereichen, siehe Tabelle 6.2. Ein Vorteil, den der Grimech 3.0 aufweist, ist die Implementierung von Ethan und Propan. Ein weiterer Mechanismus wurde von der Universität of British Columbia [39] entwickelt. Dieser

Reaktionsmechanismus gilt für stöchiometrische Methan/Wasserstoff Mischungen im Druckbereich von 16 und 40 atm und im Temperaturbereich von 1000 bis 1300 K. Diesem mangelt es jedoch an der Implementierung von Propan. Die Combustion Research Group der Universität San Diego entwickelten einen allgemeinen Reaktionsmechanismus für Verbrennungsanwendungen [61]. Positiv ist hier, dass für den allgemeinen Reaktionsmechanismus, der die oben definierten Erdgasspezies enthält, ein implementierbarer Mechanismus für n-Heptan verfügbar ist. Jedoch sind für diesen Mechanismus keine Daten über den gültigen Druck- und Temperaturbereich dokumentiert. Das California Institute of Technologie hat ebenfalls einen Reaktionsmechanismus erstellt [6]. Ähnlich wie der Mechanismus der Universität San Diego ist dieser für allgemeine Verbrennung entwickelt worden. Er besteht aus 174 Spezies und 1896 Reaktionen. Damit gehört dieser zu den größeren Mechanismen. Neben den kurzkettigen Kohlenwasserstoffen wie sie in Erdgas vorkommen, enthält dieser auch langkettige Alkane bis hoch zu n-Dodekan. Auch dieser Mechanismus ist größtenteils nur für atmosphärische Druckbereiche validiert. Für einzelne Spezies existieren stellenweise Validierungsdaten bis zu 25 bar. Das Combustion Kinetics Laboratory unter Professor Wang der University of South California entwickelte einen Reaktionsmechanismus mit 111 Spezies und 784 Reaktionen. Dieser wurde für die Verbrennung von H₂, CO sowie C₁ bis C₄ Komponenten erstellt. Mit Ausnahme der H₂ Verbrennung, ist dieser Mechanismus auch nur bis zu einem Druck von 5 bar validiert. Die Law Combustion Group um Professor Chung Law an der Universität Princeton entwickelte reduzierte Mechanismen für Methan [87] und auch für n-Heptan [54]. Wobei auch diese Mechanismen nur für einen Druck bis zu 5 atm erstellt worden sind. Ein weiterer Reaktionsmechanismus, der Mischungen von Methan und Propan abbilden kann, ist der Natural Gas Mechanismus des Combustion Chemistry Center der Universität of Irland, Galway [74]. Dieser Reaktionsmechanismus besteht aus 118 Spezies und 663 Reaktionen und wurde für Äquivalenzverhältnisse zwischen $\Phi = 0,5$ und $\Phi = 3$ entwickelt. Validiert wurde mittels Messdaten mit Drücken bis zu 26 atm bei unterschiedlichen Mischungen von Methan und Propan. Mit 484 Spezies und 19341 Reaktionen hat die CRECK Modeling Group einen sehr großen Mechanismus für die Verbrennungssimulation entwickelt [77]. Er umfasst eine Vielzahl von Kraftstoffen. Zum einen Erdgas, aber auch langkettige Alkane bis zu C₂₀, sowie Primary Reference Fuels (PRF) und reale Kraftstoffe. Validiert ist dieser Mechanismus für geringe Drücke. Ein sehr bekannter Mechanismus für n-Heptan ist der n-Heptane Detailed Mechanism Version 3.1 entwickelt vom Lawrence Livermore National Laboratory [62]. Fokus lag

auch auf der Anwendbarkeit für Verbrennungsmotoren. Daher ist dieser für Drücke von 3 bis 50 atm, Temperaturen von 650 bis 1200 K und Äquivalenzverhältnisse von $\Phi = 0,3$ und $\Phi = 1$ validiert. Das Engine Research Center der Universität Wisconsin-Madison entwickelte einen reduzierten Mechanismus mit 29 Spezies und 52 Reaktionen für HCCI Dieselerbrennungssimulationen [71].

In die nähere Auswahl kamen die Erdgasmechanismen USC Mech vII, Grimech 3.0, CTI-Mech, Galway und der SanDiego Erdgasmechanismus. Aufgrund ihrer Eigenschaften wurden diese näher untersucht. In den Abbildungen 6.1 und 6.2 ist für diese Mechanismen der Zündverzug bei unterschiedlichen Bedingungen im Vergleich zu Messdaten aus der Literatur dargestellt. Untersucht wurden verschiedene Gasqualitäten bei unterschiedlichen Lambdawerten. Insbesondere die Messdaten bei Lambda in Bereich von zwei ist interessant, da dies die Größenordnung ist, wie sie auch im Forschungsmotor gefahren wird. Es ist ersichtlich, dass alle dargestellten Mechanismen bei einer Temperatur über 1000 K die gleichen Ergebnisse liefern. Unter der Grenze von 1000 K weichen die Zündverzüge jedoch voneinander ab. Insbesondere der SanDiego Mechanismus sticht hervor. Hier ist der Zündverzug signifikant kürzer als bei den restlichen Mechanismen und auch im Vergleich zu den Messdaten, wie in Abbildung 6.3 ersichtlich ist. Dies sorgt zum Ausschluss des selbigen. Auch der Grimech 3.0 zeigt, insbesondere bei hohen Methananteilen, starke Abweichungen zu den Messdaten. Daher wird dieser für die weitere Betrachtung vernachlässigt. Die drei verbliebenen Mechanismen weisen bei den getätigten Simulationen gleichwertige Fehlerabweichungen auf und scheinen gleichwohl als Basis für den Dual-Fuel-Reaktionsmechanismus geeignet zu sein. Aufgrund der Tatsache, dass der USC Mechanismus bei dem Großteil der Ergebnissen sehr gut zu den Messdaten passt, wird dieser als Ausgangsbasis für den Dual-Fuel-Mechanismus gewählt.

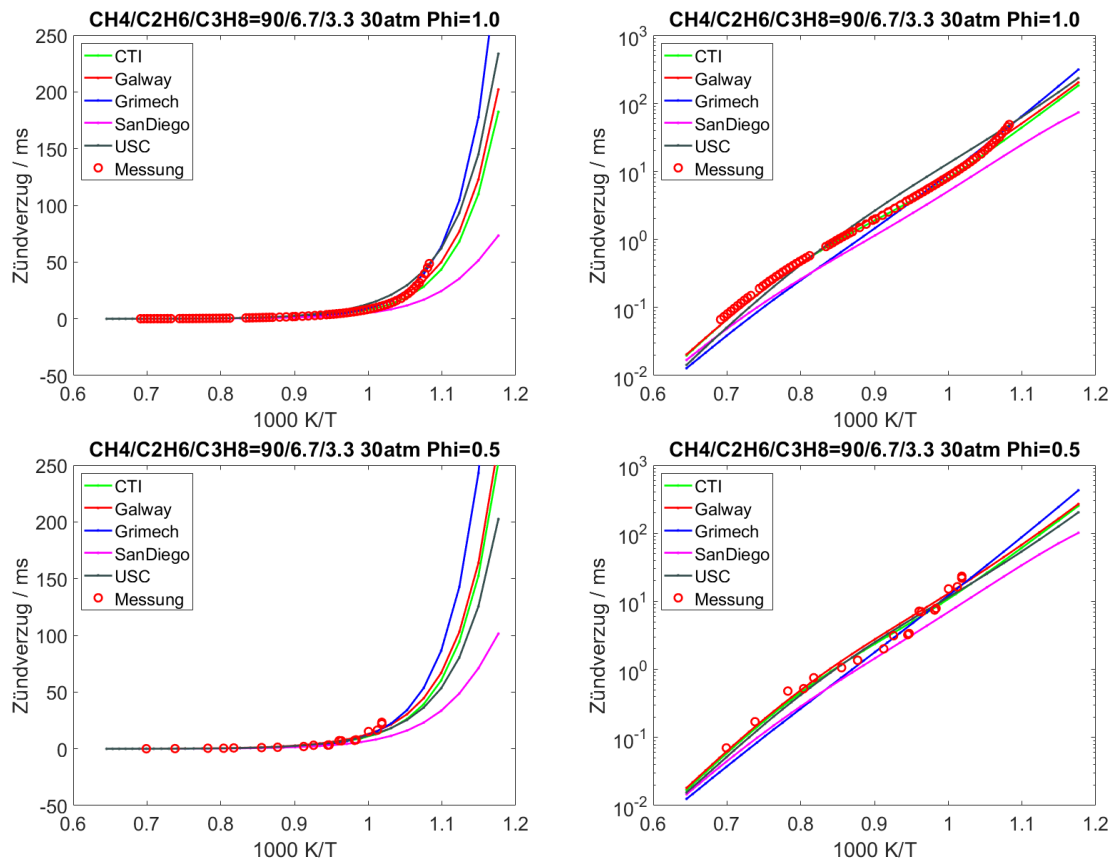


Abbildung 6.1: Vergleich der mittels Chemkin[®] berechneten Zündverzögerungen der Reaktionsmechanismen mit Messdaten aus der Literatur [30] für Erdgas mit hoher Methanzahl bei stöchiometrischer und überstöchiometrischer Verbrennung, links lineare und rechts logarithmische y-Achse

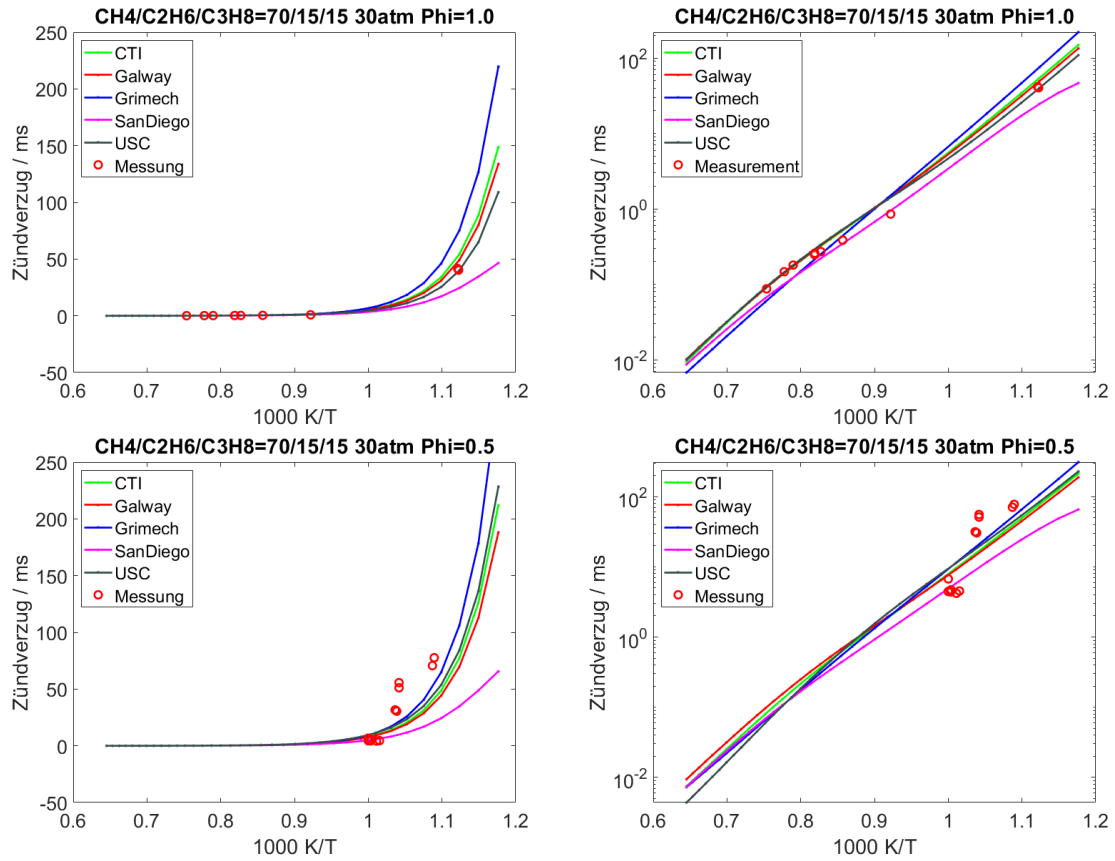


Abbildung 6.2: Vergleich der mittels Chemkin[®] berechneten Zündverzögerungen der Reaktionsmechanismen mit Messdaten aus der Literatur [30] für Erdgas mit geringer Methanzahl bei stöchiometrischer und überstöchiometrischer Verbrennung, links lineare und rechts logarithmische y-Achse

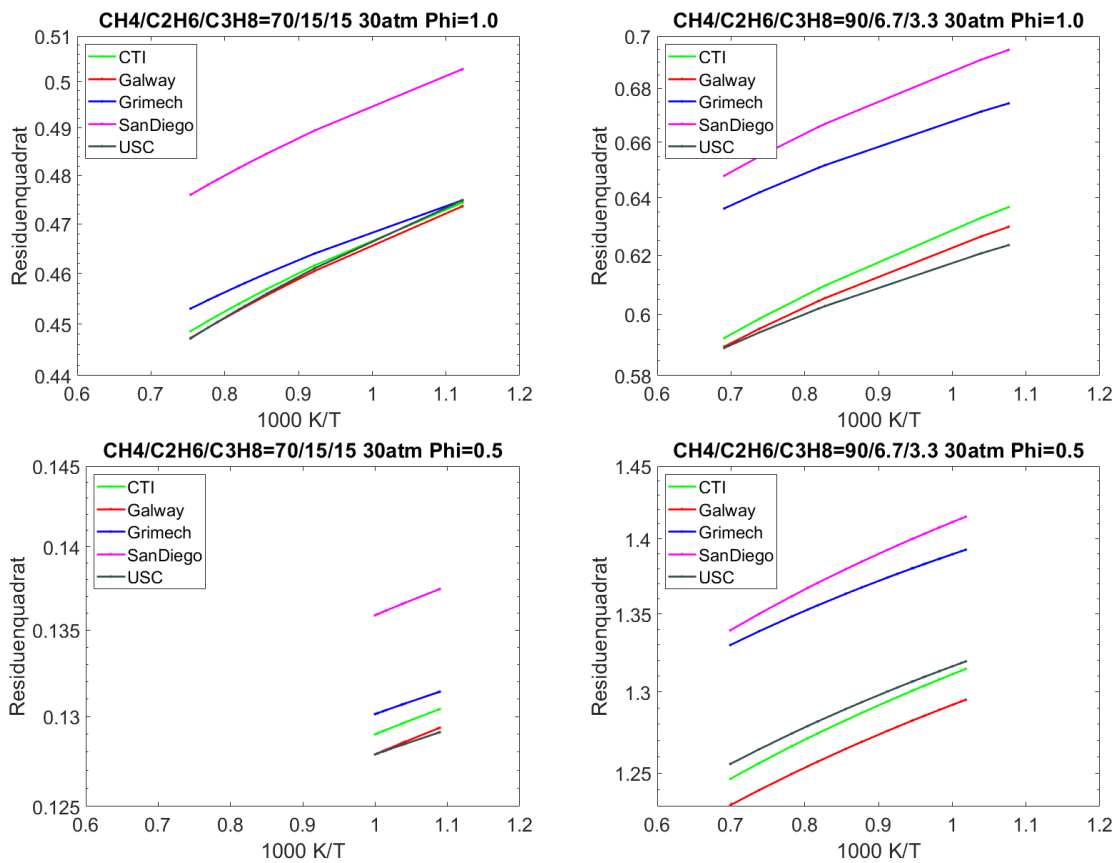


Abbildung 6.3: Darstellung der Residuenquadrate der einzelnen Simulationen aus den Abbildungen 6.1 und 6.2 bezogen auf die Messdaten von [30]. I

6.2 Kombination zu einem Dual-Fuel-Mechanismus

Als Basismechanismen für den Dual-Fuel-Mechanismus wurde zum einen der USC Mech Version II [91] sowie für den n-Heptanreaktionspfad der ERC Mechanismus [71] gewählt. Mittels der Chemkin Reaktion Workbench sind beide Mechanismen zunächst verglichen und anschließend kombiniert worden. Hierbei wurden zuerst mittels dem SMILES Verfahren [94] zugehörige Reaktionen automatisch ermittelt. Für Reaktionen, die nicht mit SMILES definiert sind, musste dies manuell erfolgen. Dies war bei den meisten doppelt auftretenden Reaktionen der Fall. Da der ERC Mechanismus eine überschaubare Anzahl von Reaktionen besitzt, war dies immer noch praktikabel. Die Chemkin[®] Workbench bietet dafür ein geeignetes Werkzeug. Ein Großteil der Reaktionen, die sowohl im USC sowie im ERC Mech vorkommen, haben ähnliche Arrheniusparameter. Die Unterschiede sind minimal, daher wurde in diesem Fall die Reaktion des USC Mechanismus gewählt und diejenige des ERC unterdrückt. Wenige Reaktionen weichen stark voneinander ab. In diesem Fall wurde die schnellere Reaktion gewählt. Dies zeigte im Vergleich zueinander den geringeren Einfluss auf das Gesamtverhalten des kombinierten Mechanismus.

Resultierend entstand ein Reaktionsmechanismus mit 119 Spezies und 806 Reaktionen, der die zuvor definierten Bedingungen erfüllt. Zur Validierung wurden homogene Reaktorrechnungen zur Bestimmung der Zündverzögerungen, sowie eindimensionale Simulationen zur Ermittlung der laminaren Flammgeschwindigkeit durchgeführt. Im Anschluss wurden die Ergebnisse, wie schon zuvor bei den Voruntersuchungen, mit Messdaten aus Literaturquellen verglichen. Die Einbindung des n-Heptan Reaktionspfades hat keinen signifikanten Einfluss auf die n-Heptan- und Erdgaszündung, wie in den Abbildungen 6.4 und 6.5 ersichtlich ist. Zusätzlich zu den Zündverzögerungen sind Simulationen zur Bestimmung der laminaren Flammgeschwindigkeit durchgeführt worden. In Abbildung 6.6 sind für die Reinstoffe Methan, Ethan, Propan und n-Heptan die laminaren Flammgeschwindigkeiten der Simulation mit Messdaten, die der Literatur entnommen wurde, dargestellt. Die Ergebnisse passen für alle untersuchten Spezies gut überein. Der so erhaltene kombinierte Reaktionsmechanismus ist daher für die weitere Verbrennungssimulation geeignet.

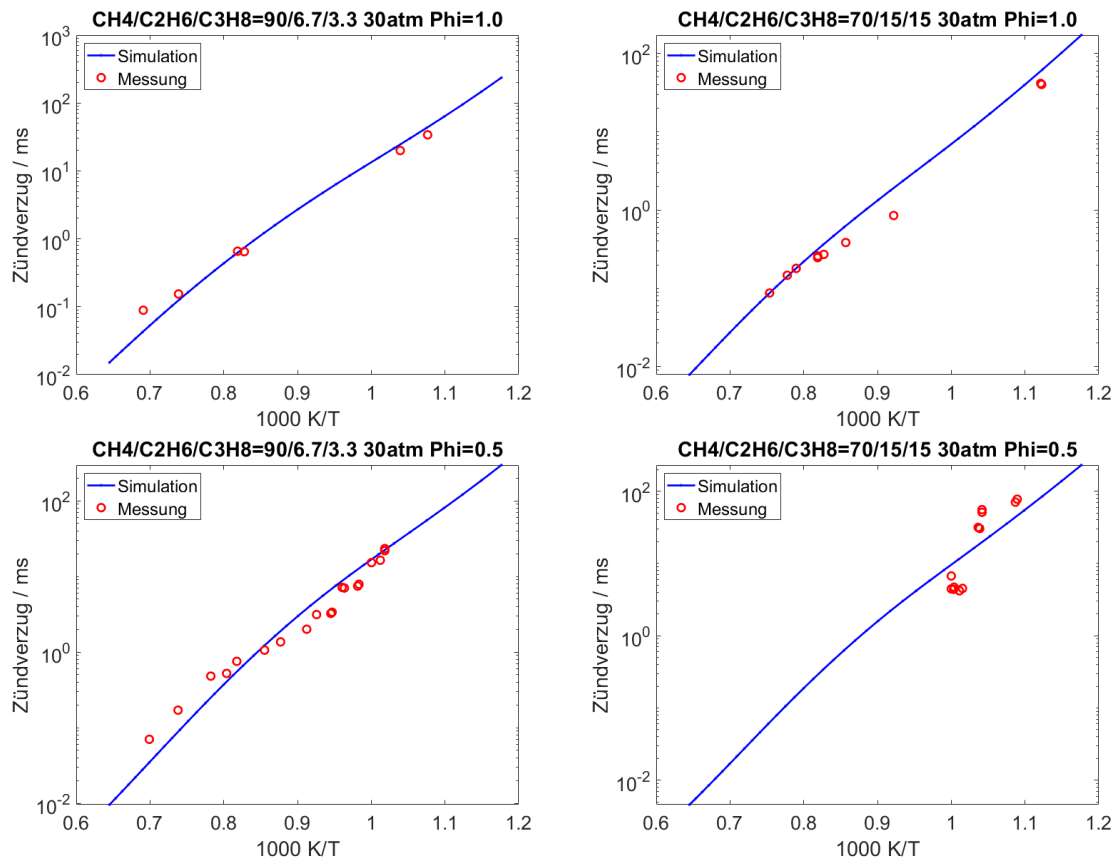


Abbildung 6.4: Vergleich Zündverzögerungen des kombinierten Reaktionsmechanismus mit Messdaten aus der Literatur [30] für zwei verschiedene Erdgasqualitäten bei stöchiometrischer und überstöchiometrischer Verbrennung

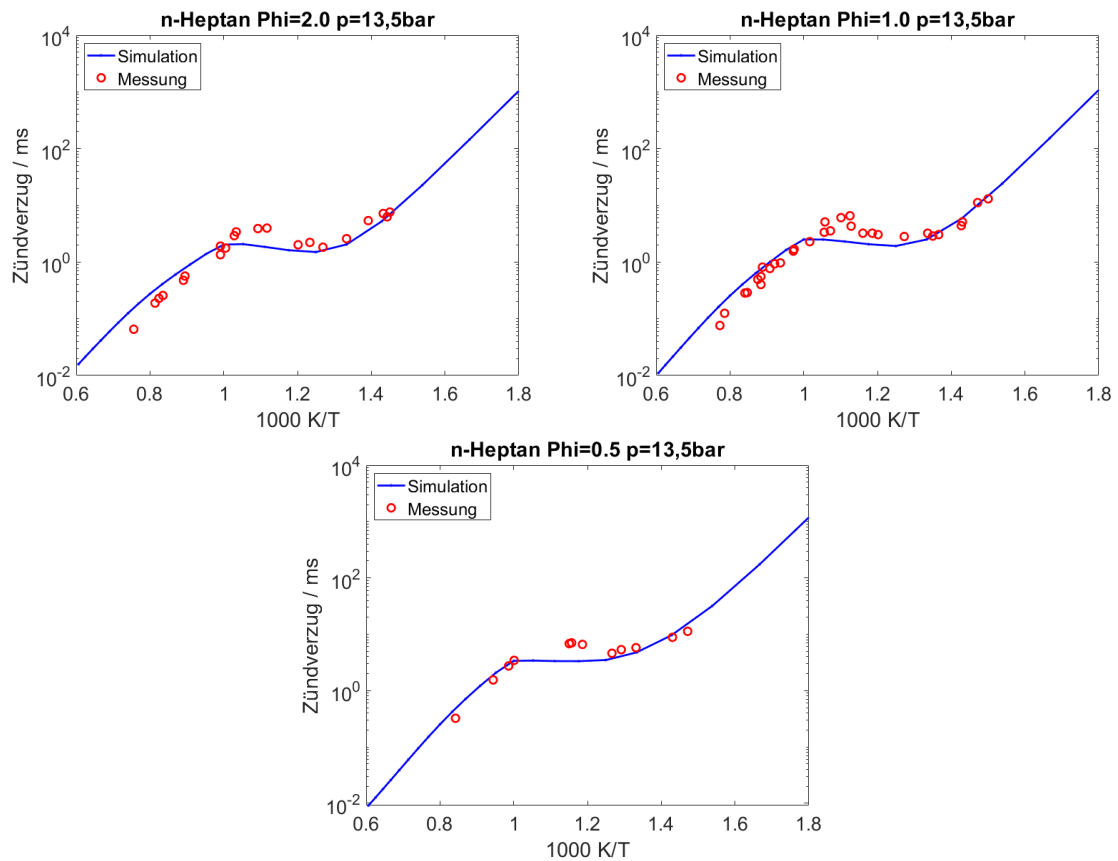


Abbildung 6.5: Vergleich der Zündverzögerungen des kombinierten Reaktionsmechanismus mit Messdaten aus der Literatur[52] für n-Heptan bei unterstöchiometrischer, stöchiometrischer und überstöchiometrischer Verbrennung

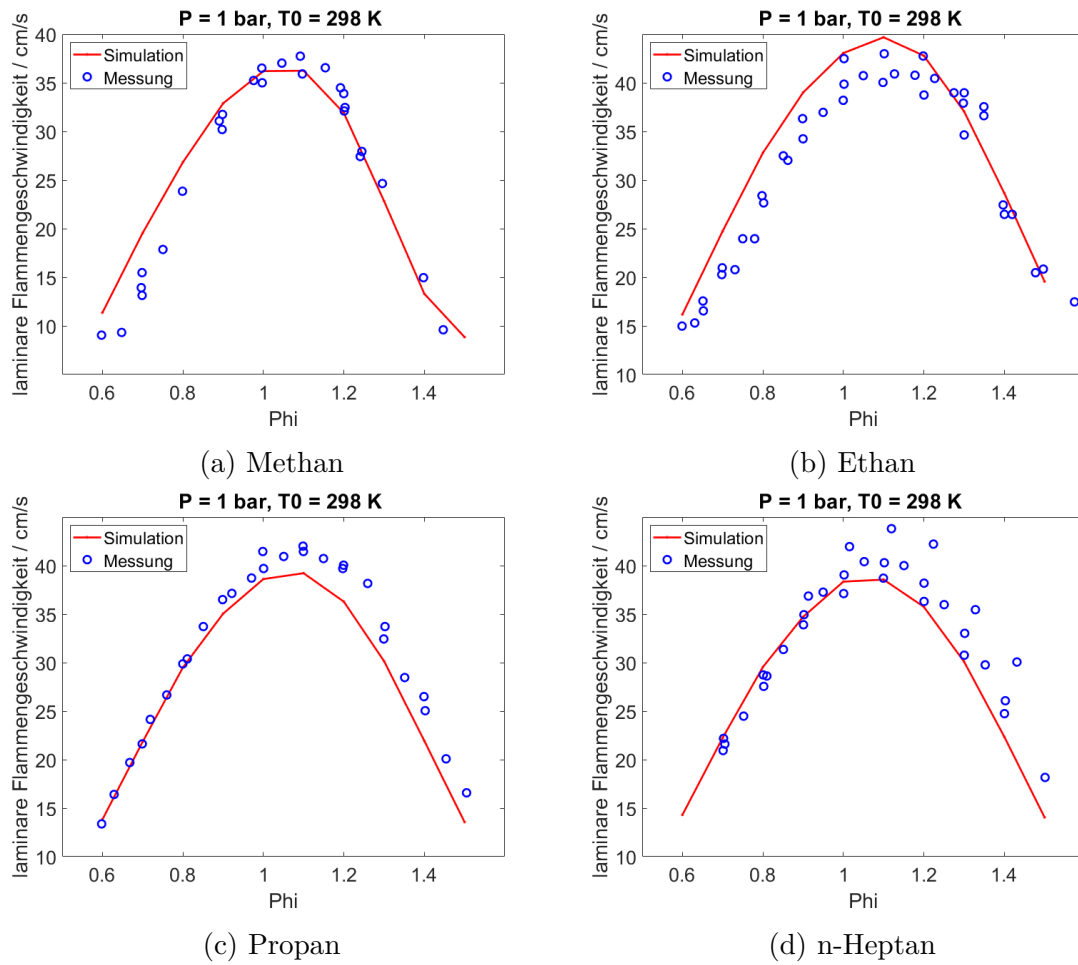


Abbildung 6.6: Vergleich der berechneten Flammengeschwindigkeit für wichtige Spezies des kombinierten Reaktionsmechanismus mit Messdaten aus der Literatur. Die Messdaten sind aus [41] entnommen.

6.3 Zusammenfassung

In den vorangegangenen Abschnitten dieses Kapitels ist die Entwicklung und Validierung des verwendeten Reaktionsmechanismus für die Dual-Fuel-Verbrennung beschrieben worden. Zu Beginn wurden die benötigten Anforderungen an den Mechanismus definiert. Darauf folgte ein Überblick über die in der Literatur existenten Mechanismen und deren Einordnung. Aufgrund von homogenen Reaktorrechnungen, bei denen die Zündverzüge von den verschiedenen Mechanismen bestimmt wurden, ist der USC Erdgasmechanismus als Ausgangsbasis für den Dual-Fuel-Mechanismus ausgewählt worden. Dieser wurde mit dem ERC n-Heptan Mechanismus kombiniert und die resultierende Reaktionskinetik ist erneut mit Messdaten für Zündverzug und laminare Flammengeschwindigkeit validiert worden.

7 Vorgehensweise 3D

Dual-Fuel-Simulation

In diesem Kapitel wird das verwendete Vorgehen zur Simulation eines Dual-Fuel-Motors aufgezeigt. Beginnend mit einer Konvergenzstudie wird die benötigte Zellweite anhand eines vereinfachten Modells dargestellt. Darauf hin kann das 3D-CAD-Modell des Versuchsträgers erstellt und anschließend gemäß den Anforderungen der Netz-unabhängigkeitsstudie vernetzt werden. Die Ladungswechselsimulation bringt die Anfangsbedingungen für die eigentliche Verbrennungssimulation. Ebenso sind deren Erkenntnisse Basis für den Tabellierungsprozess. Im Anschluss kann die eigentliche Verbrennungssimulation erfolgen.

7.1 Gitterauflösung

Insbesondere für die Verbrennungssimulation ist es wichtig eine geeignete Zellweite zu wählen. Sie hat Einfluss auf die Qualität der Ergebnisse und die benötigte Rechenzeit. Ist diese zu grob gewählt, so wird die Energiefreisetzung nicht richtig abgebildet. Aufgrund des erhöhten räumlichen Energietransfers bei großen Zellen erfolgt die Freisetzung viel zu intensiv. Zu feine Gitter bedeuten jedoch wiederum einen unnötig hohen Rechenaufwand, ohne die Genauigkeit der Ergebnisse signifikant zu verbessern. Um die optimale Zellweite zu erhalten, ist eine kubische Testgeometrie mittels des automatischen Gittergenerierungstools FAME Hexa erstellt worden. Diese Testgeometrie wurde mit unterschiedlichen Gitterweiten vernetzt. Anschließend wurde ein Testszenario mit einer fremdgezündeten Erdgasverbrennung aufgesetzt und simuliert. Als Anfangs- und Randbedingungen wurden die Zustände, wie sie bei einem Volllastpunkt des

Versuchsmotors zum Zeitpunkt der Einspritzung vorliegen, gewählt. Als Vergleichsgröße ist die Energiefreisetzung genutzt worden.

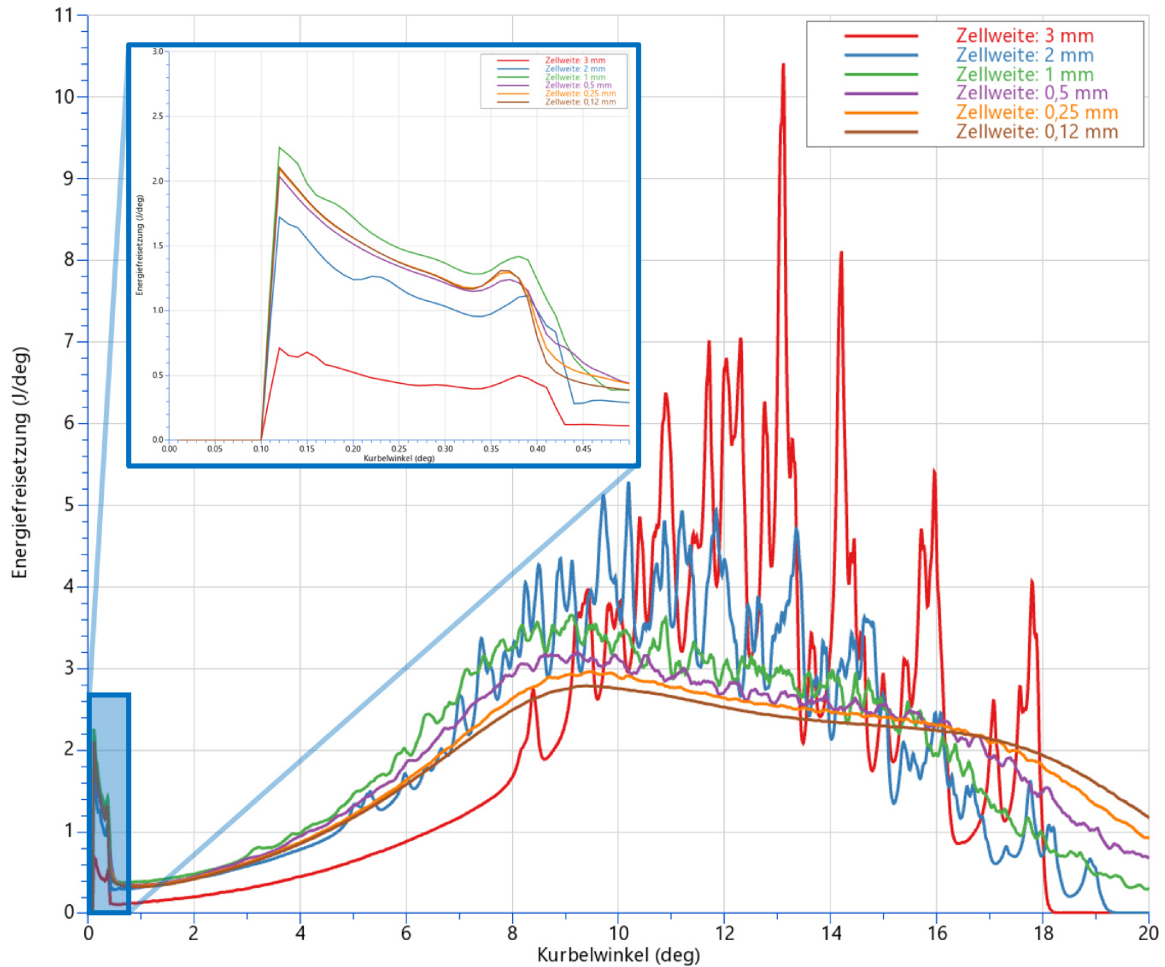


Abbildung 7.1: Gitterkonvergenzstudie für die Verbrennungssimulation mit TabkinTM, Vergleichsgröße ist die Energiefreisetzung für Zellgrößen von 0,12 mm bis 3 mm

In Abbildung 7.1 ist das Resultat der Gitterkonvergenzstudie dargestellt. Hier kann als optimale Zellweite eine Größe von 0,5 mm erkannt werden. Dies ist ein Kompromiss aus Genauigkeit und Rechengeschwindigkeit. Eine weitere Verfeinerungsstufe auf 0,25 mm würde die Genauigkeit nicht signifikant verbessern, jedoch die Anzahl an benötigten Gitterzellen sehr stark erhöhen. Dadurch würde der ohnehin hohe Rechenaufwand um ein Vielfaches steigen, wie in der Abbildung 7.2 ersichtlich ist. Daher wird bei der Gittererstellung als maximale Zellweite 0,5 mm für die Verbrennungsphase definiert.

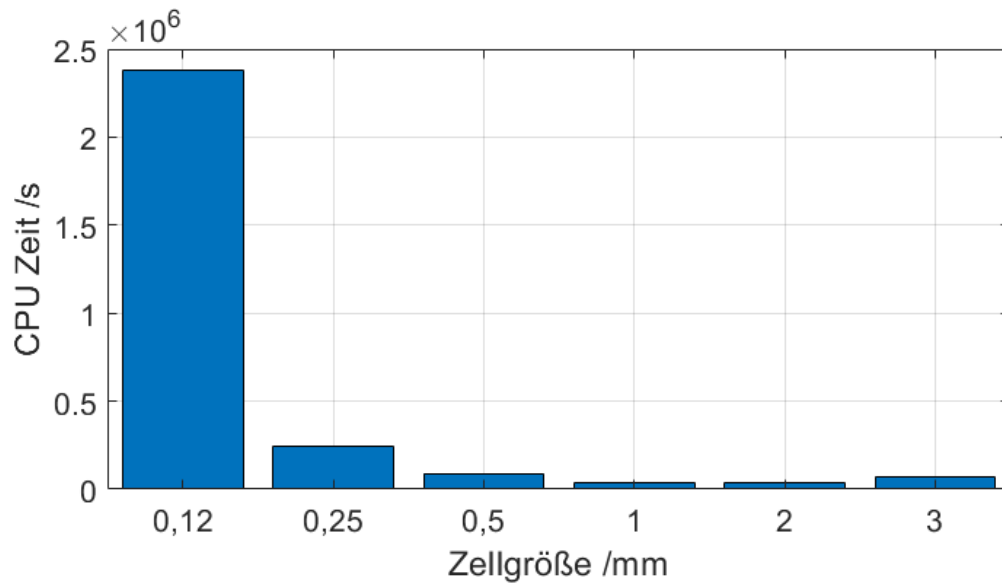


Abbildung 7.2: CPU Rechenzeiten der Gitterkonvergenzstudie für Zellgrößen von 0,12 mm bis 3 mm. Eine Verringerung der Zellgröße sorgt für exponentiellen Anstieg der benötigten Rechendauer.

7.2 Gittererstellung

Die 3D-CFD-Simulation von Verbrennungsmotoren stellt eine besondere Herausforderung an die numerischen Gitter. Durch die Bewegung von Kolben und Ventilen kommt es zu veränderlichen Geometrien über der Zeit. Dies macht es erforderlich, bewegliche Gitter zu erstellen. In AVL FIRE wird die Gitterbewegung nach folgendem Schema realisiert.

Die Topologie des Gitters wird immer nur zu diskreten und definierten Zeitpunkten geändert. Dies sind so genannte "Rezone Events". Bei diesen werden die Daten des 3D Strömungsfeldes durch ein Interpolationsverfahren von einem Gitter zum anderen übertragen. Zwischen diesen Events sind durch Streckung oder Stauchung von Gitterzellen leichte Veränderungen der Geometrie möglich. Ist keine weitere Streckung oder Stauchung machbar ohne das die Gitterqualität sich über definierte Kriterien, wie das Aspect-ratio, hinaus verschlechtert, so wird ein neues Rezone Event notwendig. Dieser Hintergrund stellt die Gittererstellung vor besondere Herausforderungen. Zum einen sorgen verzerrte Gitter zu einer Verschlechterung des Konvergenzverhaltens der Simulation und beeinflussen somit die Qualität der numerischen Ergebnisse, zum

anderen ist der Prozess des Rezones ebenso fehleranfällig, da die Übertragung der 3D Strömungsdaten mittels Interpolation auf das andere Gitter erfolgt. Es ist zwischen Grad der Verzerrung und Anzahl der Rezone Events abzuwägen.

AVL FIRE bietet unterschiedliche Möglichkeiten der Generierung von beweglichen Gittern. Die erste Möglichkeit ist die manuelle Erstellung. Hierbei werden die diskreten Zeitpunkte selbst ausgewählt, das Gitter erstellt und anschließend die Bewegung ausgeführt. Der große Vorteil dieser Methode ist, dass eine sehr hohe Gitterqualität möglich ist. Jedoch ist diese sehr zeitaufwändig und bei komplexen Geometrien relativ schwierig umsetzbar. Aufgrund des hohen Modellierungsaufwandes scheidet dieses Verfahren aus. Insbesondere weil bei Geometrieänderungen, wie sie zum Beispiel bei Anpassung der Ventilsteuerzeiten auftreten, das komplette Gitter von vorne generiert werden muss. Die weiteren Methoden zielen auf die automatische Vernetzung. Dafür stehen wiederum verschiedene Werkzeuge zur Auswahl. Eins dieser Werkzeuge ist ESE Engine. Es wurde speziell für die Simulation von Großmotoren entwickelt und erlaubt die Erstellung von großen Zellen im Brennraum, um die Gittergröße gering zu halten. Eine teilautonome Gittererzeugung ist realisierbar und ermöglicht leicht eine Änderung an der Brennraumgeometrie. Der interaktive Aufwand bei der Netzgenerierung ist für eine automatische Gittererzeugung trotzdem hoch und zeitaufwändig. Zudem bringt eine Änderung der Ventilsteuerzeiten große Anpassungen, die manuell ausgeführt werden müssen. Dies ist der große Nachteil dieser Methode. Zudem ist die resultierende Gitterqualität nicht auf dem, für diesen Anwendungsfall, gewünschtem Niveau. Daher wurde diese Herangehensweise verworfen. Die endgültig verwendete Methode basiert auf dem Modul FAME Engine Plus. Hierbei wird lediglich eine Oberfläche der Geometrie genutzt, die unterschiedlichen Bereiche sind über eindeutig definierte Bezeichnungen zu unterteilen. So sind Einlass- und Auslasskanäle, die einzelnen Ventile, Laufbuchse, Kolben, Zylinderkopf und weitere Bereich zu benennen. Anschließend erfolgt das Setup der Gittergenerierung, in dem für diese Bereiche und verschiedenen Zeitschritte die Zellweiten festzulegen sind. Im Anschluss wird vollkommen automatisiert ein Gitter aus Polyedern erstellt. In der Regel ist nur wenig Nacharbeit notwendig. Bereits bei der Gittererstellung erfolgt die Überprüfung der Gitterqualität. Im Vergleich zu den vorangegangenen Verfahren, ist dieses sehr effizient. Vor allem bei geometrischen Änderungen ist der Aufwand vergleichsweise gering. Bei der Änderung der Ventilsteuerzeiten müssen lediglich die neuen Ventilhubkurven eingelesen werden. Die Vernetzung erfolgt, wie zuvor, automatisch. Eventuell kann es notwendig sein, kleine Optimierungen

an den Einstellungen vorzunehmen. In Summe ist diese Herangehensweise empfehlenswert, insbesondere wenn oft geometrische Änderungen vollzogen werden.

7.3 Ladungswechselrechnung

Aufgrund der großen geometrischen Abmessungen des Versuchsmotors und der benötigten Gitterauflösung für die Verbrennungssimulation wurde die Simulation des Ladungswechsels von der Verbrennungssimulation separiert, siehe Abbildung 7.3.

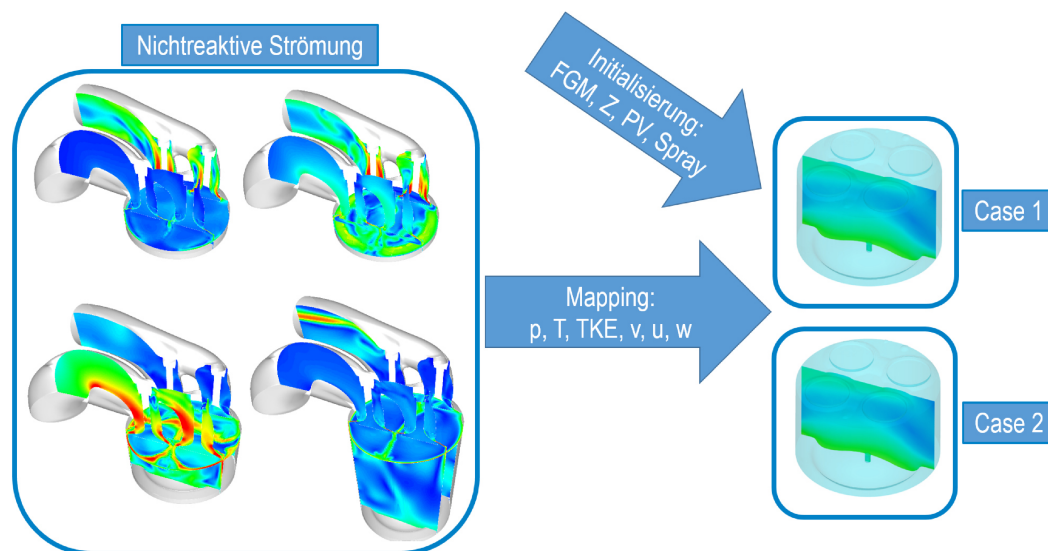


Abbildung 7.3: Schema der Vorgehensweise: nichtreaktive Ladungswechselrechnung wird als Anfangsbedingung für Verbrennungsrechnung genutzt. Variantenrechnungen, genannt Cases, können die selbe Ladungswechselrechnung als Ausgangsbasis nutzen.

Im ersten Schritt wird für die gegebenen Randbedingungen, wie Druck und Temperatur vor und nach Motor, eine nichtreaktive Strömung gerechnet. Diese umfasst die Ladungswechselphase, sowie die Verdichtung. Auf Basis dieser Berechnung können die Verbrennungssimulationen durchgeführt werden. Diese starten im Verdichtungsstakt und nutzen die Informationen über das inhomogene 3D Strömungsfeld der Ladungswechselrechnung als Anfangsbedingungen. Dieses Vorgehen ermöglicht es, die Gesamtrechnenzeit für verschiedene Variationsrechnungen zu reduzieren, sofern der Ladungswechsel unverändert

beibehalten werden kann. Möglichkeiten der Variation sind zum Beispiel Anpassungen am Dieselpilotspray, wie der Einspritzzeitpunkt oder Injektortyp.

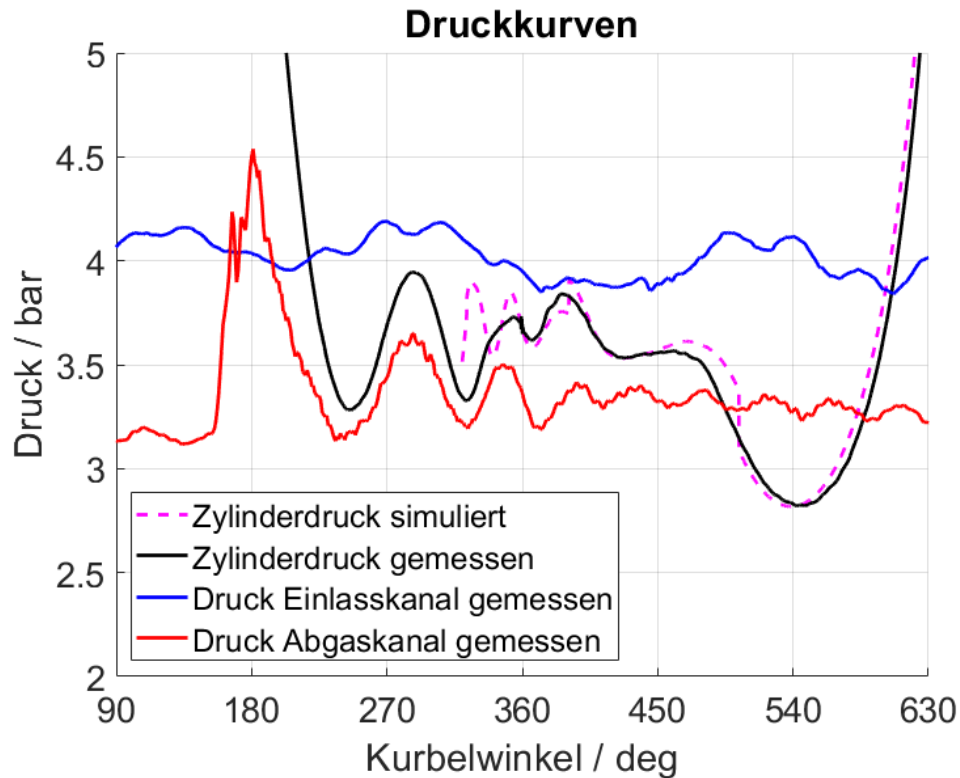


Abbildung 7.4: Validierung der Ladungswechselrechnung mittels Niederdruck-indizierung. Vergleich zwischen simulierten und experimentell bestimmten Zylinderdruckverlauf.

Die benötigten Randbedingungen, wie Temperatur und Druck vor und nach Motor, werden aus den bestehenden Messdaten des Einzylindermotors entnommen. Die Temperaturrandbedingungen an den Bauteilwänden sind nicht messtechnisch erfasst. Daher wurden diese anhand von Erfahrungswerten abgeschätzt. Um den Fehler der Anfangsbedingungen gering zu halten und genügend Zeit zum Einschwingen zu haben, startet die Ladungswechselsimulation in dem Ausschietakt. Somit wird der Brennraum mit frischer Ladeluft gefüllt, deren Eigenschaften bekannt sind. Zur Validierung werden die Ergebnisse mit den Messdaten der Niederdruck- und Hochdruckindizierung verglichen. Ein solcher Vergleich ist in der Abbildung 7.4 dargestellt.

7.4 Tabellierung des Reaktionsmechanismus

Die Tabellierung erfolgt über das Softwarepaket AVL Tabkin. Diese ist ein konsolenbasiertes Softwaretool zur Erstellung von Datenbanken aus Reaktionsmechanismen mit anschließender Tabellierung. Mittels einer Konfigurationsdatei ist die Datenbank zu definieren. Im Anschluss wird aus dieser die Tabelle erzeugt. Durch definierte Stützstellen, die den Zustand im chemischen Reaktor definieren, wie Druck, Temperatur und Spezieszusammensetzung, und der Interpolation zwischen diesen Stützstellen, wird die Datenbank und später die Tabelle in einem n-dimensionalen Raum aufgespannt. Die Dimension ist abhängig von der gewählten Konfiguration. Wichtige Größen als Stützstellen sind der Druck- und Temperaturbereich, der diskrete Mischungsbruch, die Zusammensetzung der Kraftstoffe, sowie der Reaktionsfortschritt.

In einem ersten Schritt müssen die Stützstellen definiert werden. Hierfür sind die Ergebnisse der Ladungswechselsimulation verwendet worden. Der Bereich mit den Zuständen vor der Dieselpiloteinspritzung hat eine geringe Bedeutung. Dieser kann mit wenigen Stützstellen abgebildet werden. Hingegen ist das Gebiet der Einspritzung und der anschließenden Zündungsphase sehr wichtig. Hier sind mehrere Stützstellen notwendig.

Zur Überprüfung der richtigen Auswahl der Stützstellen ist eine Visualisierung der Tabelle möglich. Eine Komplettdarstellung des mehrdimensionalen Raumes ist nicht machbar. So müssen für die Darstellung einige Größen fest definiert werden, wie in Abbildung 7.5. Hier sind für die Temperatur, den Druck und der Kraftstoffzusammensetzung feste Werte gewählt worden, um einen Ausschnitt der Tabelle abbilden zu können. Abbildung 7.5 zeigt auch die Bedeutung der richtigen Verteilung von Stützstellen. Dargestellt ist der Quelltherm des Reaktionsfortschrittes über Mischungsbruch und Fortschrittsvariable. Die obere Abbildung zeigt eine ungünstige Verteilung der Stützstellen. Insbesondere der Bereich um die Fortschrittsvariable 0,6 ist schlecht aufgelöst und nicht alle Details der Verbrennung können abgebildet werden. Hingegen zeigt die untere Abbildung eine gut aufgelöste Tabelle mit geeigneter Definition der Stützstellen. Es ist zu beachten, dass nicht unendlich viele Stützstellen definiert werden können. Für jede Stützstelle wird eine homogene Reaktorrechnung durchgeführt und die erhaltenen Resultate werden in einer Datenbank abgelegt. Im zweiten Schritt wird aus dieser Datenbank eine im FGM Verbrennungsmodell nutzbare Tabelle erstellt. Auf diese kann

der CFD-Löser zugreifen, um anhand vorhandener Zustände in der Rechendomain direkt die Lösung des Reaktionsmechanismus zu erhalten, wie in Abbildung 7.6 dargestellt ist. Dazu muss diese Tabelle im flüchtigen Speicher der Workstation beziehungsweise des Rechenknotens gehalten werden. Je mehr Stützstellen definiert werden, desto mehr Resultate werden in der Tabelle abgelegt. Dadurch steigt der Bedarf an benötigtem Arbeitsspeicher. Dies ist ein limitierendes Kriterium. Daher ist es besonders wichtig, die Stützstellen sinnvoll zu verteilen. Es ergibt sich daraus ein iterativer Prozess mit Tabellengenerierung und der visuellen Überprüfung dieser.

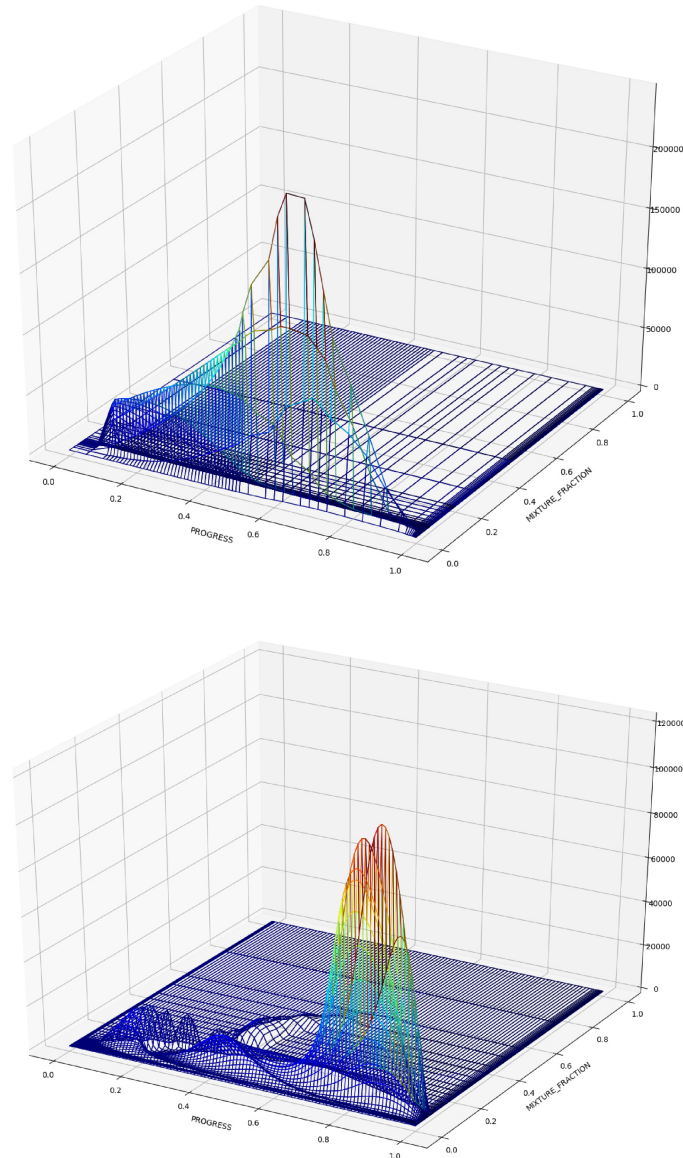


Abbildung 7.5: Gegenüberstellung der Visualisierung des Reaktionsquelltherms zweier Tabkin Tabellen. Die obere Abbildung zeigt eine Tabelle mit schlechter Verteilung der Stützstellen. Die Übergänge weisen hohe Gradienten auf. Dadurch können wichtige Details nicht abgebildet werden. Hingegen zeigt die untere Abbildung eine gute Verteilung der Stützstellen. Die Übergänge sind weich und die Verbrennung kann gut abgebildet werden.

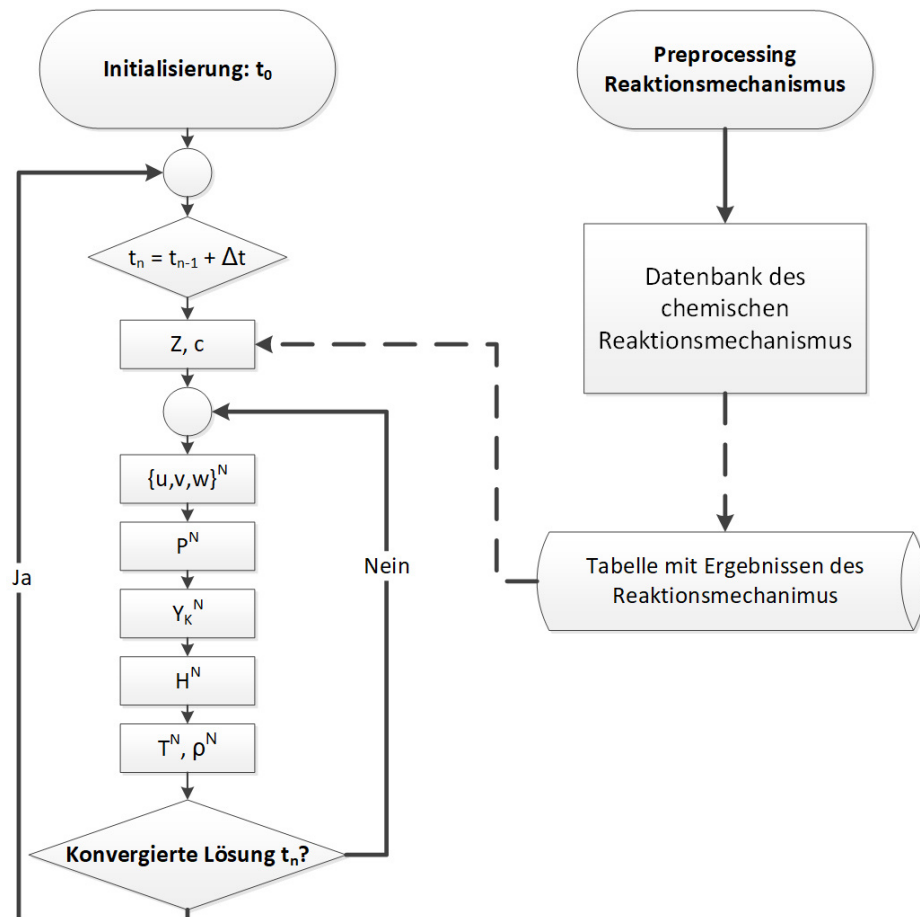


Abbildung 7.6: Tabellierung mit Tabkin™. Vor der eigentlichen Strömungssimulation wird mittels Rührreaktorsimulationen die Datenbank der Reaktionskinetik erstellt und tabelliert. Die Tabelle ist über eine geringe Anzahl von Kontrollvariablen, wie dem Mischungsbruch oder auch dem Reaktionsfortschritt definiert. Für diese Variablen sind in der Strömungssimulation Transportgleichungen zu lösen. Anhand dieser ist es möglich, den Ablauf der Verbrennung aus der Tabelle zu entnehmen und entsprechend auf das numerische Gitter zu übertragen.

7.5 Spraymodells des Pilotkraftstoffes

Zur Darstellung des Dieselsprays wird ein Euler-Lagrange Ansatz genutzt. Dies ist das gängige Vorgehen bei der motorischen Spraysimulation [63]. Dabei wird die kontinuierliche Phase nach den Grundgleichungen der Strömungsmechanik in Eulerscher Betrachtungsweise modelliert. Die disperse Phase des Sprays hingegen wird über die Lagrangesche Betrachtungsweise bestimmt. Für tiefergehende Grundlagen der Spraysimulation wird auf die Literatur wie zum Beispiel [47] verwiesen.

Aufgrund des Mangels an genauen Kenntnissen über den verwendeten Injektor, wie zum Beispiel der Düseninnengeometrie, musste auf die Modellierung des primären Strahlaufbruchs verzichtet werden. Zur Abbildung des sekundären Strahlaufbruchs fand das WAVE Child Modell Anwendung [78]. Bei diesem Modell erfolgt die Einbringung der Spraypakete mit dem Spritzlochdurchmesser. Die anschließende Durchmesseränderung erfolgt aufgrund der aerodynamischen Kräfte. Die Verdampfung erfolgte über das Modell von Abramzon [2], welches auf der klassischen Filmtheorie basiert und für die Tropfenverdampfung adaptiert worden ist. Zur Kalibrierung und Plausibilisierung des angewandten Modells sind Messdaten von einer Hochdruckeinspritzkammer [75] verwendet worden. Hierzu ist ein Modell mit einer Zylindergeometrie, ähnlich der Einspritzkammer, erstellt worden. Die Anfangs- und Randbedingungen sind entsprechend den Zuständen der Messung definiert worden. Als Vergleichsgröße zwischen Messung und Simulation dient die Eindringtiefe. Hierfür wurde sowohl bei der Messung, als auch bei der Simulation durch Mittlung über alle Spraykeulen die Eindringtiefe bestimmt.

Die Abbildung 7.7 zeigt den Vergleich der simulierten mit der experimentell bestimmten Eindringtiefe. Über iteratives Vorgehen, ist das Spraymodell angepasst worden, um möglichst hohe Übereinstimmung mit den Experimenten zu erzielen. Im Zeitbereich um 0,7 ms ist eine deutliche Unregelmäßigkeit in der Simulation ersichtlich. Hier wird die Eindringtiefe aufgrund numerischer Fehler überbestimmt. Dies kann durch Auswertung der 3D Daten erkannt werden.

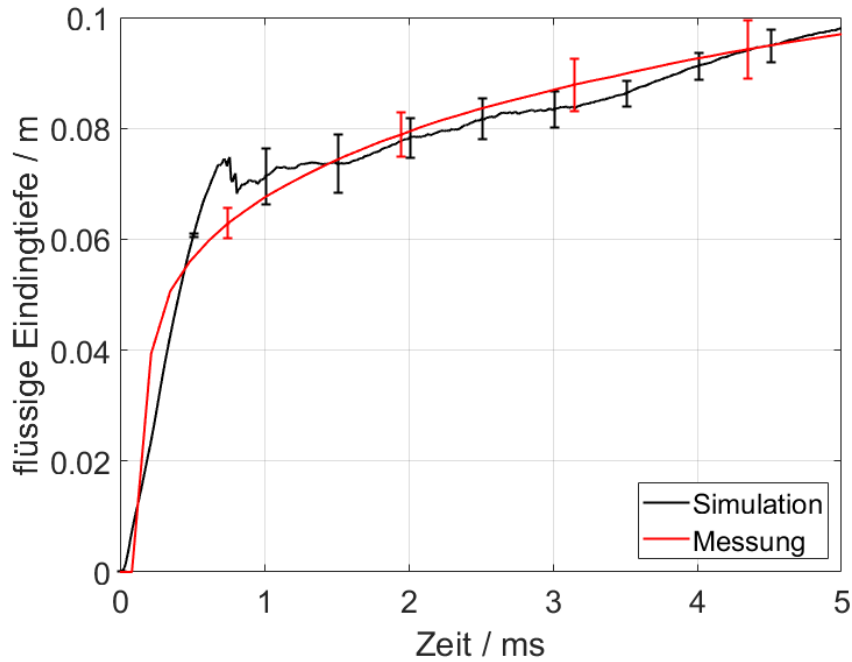


Abbildung 7.7: Vergleich der flüssigen Eindringtiefe von Simulation (rot) und Experiment an der Einspritzkammern (schwarz).

Die Abbildung 7.8 stellt die Simulation des Sprays zum genannten Zeitpunkt dar. Hier ist ersichtlich, dass einzelne Spraypakete nicht verdampfen und weit in den Brennraum eindringen. Diese fließen mit in die Berechnung der Eindringtiefe ein und sorgen somit für die Abweichung in diesem Zeitbereich. Aufgrund des langen Zündverzugs bei dem Dual-Fuel-Brennverfahren, bei dem die Zündung erst weit nach dem Einspritzende stattfindet, wird der Einfluss dieses Fehlers, der kurz nach Einspritzbeginn auftritt und sich anschließend normalisiert, als gering betrachtet.

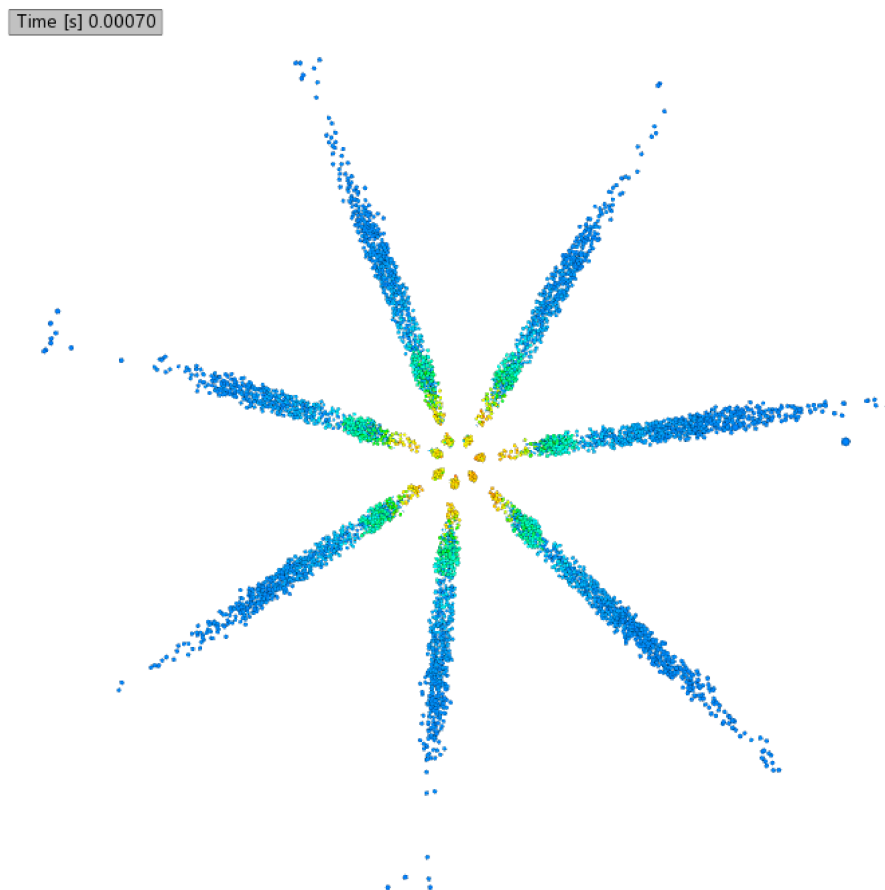


Abbildung 7.8: Darstellung des simulierten Spraybildes zum Zeitpunkt der Abweichung zwischen Simulation und Experiment. Durch numerischen Fehler verdampfen einzelne Parcels nicht, dadurch wird die Eindringtiefe überbestimmt.

7.6 Verbrennungssimulation

Nach Abschluss der Ladungswechselrechnung und der Tabellengenerierung folgt die eigentliche Verbrennungssimulation. Sie startet in der Kompressionsphase, nach dem Schließen der Einlassventile. Als Anfangsbedingungen werden die Daten der Ladungswechselrechnung genutzt. Dazu erfolgt die Übertragung der Daten des 3D Strömungsfeldes von der Ladungswechselsimulation auf das Gitter der Verbrennungssimulation. Dies hat den Vorteil, das Ladungswechsel und Verbrennung getrennt berechnet werden können. Dies spart zum einen Rechenzeit, da während der Ladungswechselphase die Transportgleichungen für die Kontextvariablen der Datenbank nicht mit berechnet werden müssen, und zum anderen ist es möglich, dass unterschiedliche Verbrennungssimulationen auf den selben Ladungswechsel zurückgreifen können. Nach dem 3D Strömungsfeld wird das Spraymodell und das FGM Verbrennungsmodell initialisiert, sowie die Tabkin Tabelle geladen. An dieser Stelle, können je nach Fall, unterschiedliche Randbedingungen getroffen und somit verschiedene Fälle simuliert werden. Das ermöglicht eine schnelle Variantengenerierung, sofern die Randbedingungen des Ladungswechsels beibehalten werden können, siehe Abbildung 7.3.

7.7 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wurde das allgemeine Vorgehen bei der genutzten CFD-Simulation erläutert. Zu Beginn wurde über eine Konvergenzstudie aufgezeigt, dass für diese Simulation der Verbrennung eine maximale Zellweite von 0,5 mm benötigt wird. Anschließend wurden die in AVL FIRE möglichen Vorgehensweisen der Gittererstellung genannt und die Auswahl des FAME Engine Plus Moduls begründet. Darauf hin ist der Workflow mit der von der Verbrennungssimulation getrennten Ladungswechselrechnung genannt, sowie der Tabellierungsprozess erläutert worden. Im letzten Abschnitt dieses Kapitel ist Ablauf der Verbrennungssimulation beschrieben, welche als Initialbedingungen die vorangegangene Ladungswechselsimulation verwendet.

8 Validierung

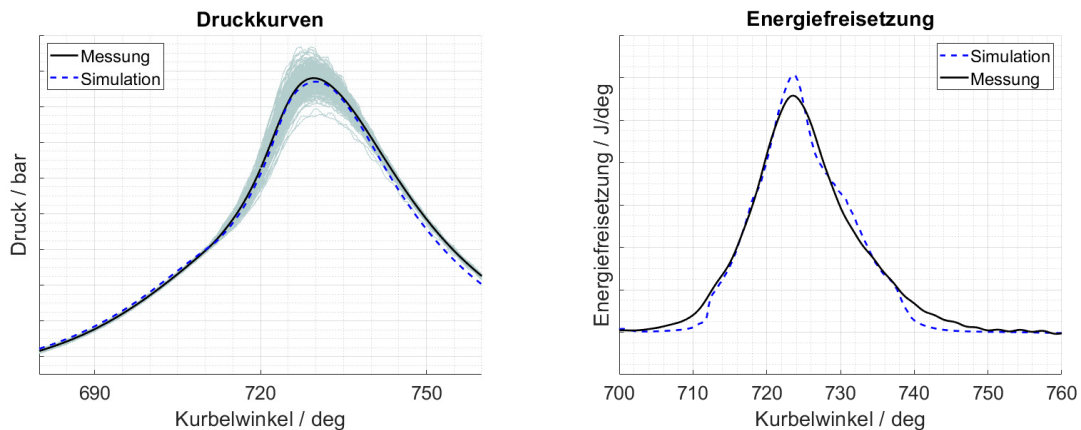
Der Inhalt dieses Kapitels umfasst die Validierung der Vorgehensweise und des verwendeten Modells. Hierfür wird ein Referenzfall genutzt. Auf diesen Referenzfall wird im späteren immer wieder Bezug genommen. Daraufhin erfolgt die Validierung bei unterschiedlichen Einspritzungen und eine Lastpunktvariation.

8.1 Validierung der Vorgehensweise

Im vorherigen Kapitel 7 ist das Vorgehen bei der Dual-Fuel-Simulation aufgezeigt worden. Die Richtigkeit dieser Herangehensweise ist mittels Validierung zu beweisen. Zu diesem Zweck ist ein Referenzfall definiert worden. Er entstammt aus den zur Verfügung stehenden Messdaten. Gewählt wurde ein Vollastpunkt mit zentraler Injektorlage. Die Motorkonfiguration stimmt mit dem Serienzustand überein. Die Dieselpilotmenge wird mit einer einzelnen Einspritzung in den Brennraum eingebracht. Der Einspritzzeitpunkt ist das Basistiming mit 30 °KW vor ZOT.

Für den Referenzfall sind 250 Zyklen am Prüfstand gemessen worden. Mittels eines auf Matlab basierenden Druckverlaufsanalysetools wurde über Mittelungs- und Glättungsverfahren ein mittlerer Druckverlauf berechnet. In der Abbildung 8.1a ist ein Vergleich zwischen diesem gemittelten Druckverlauf in schwarz und dem Druckverlauf der Simulation in blau gestrichelt dargestellt. Zusätzlich finden sich in der Grafik die 250 Einzelzyklen in hellgrau. Dies soll ein Gefühl für die Betriebsstabilität des Betriebspunktes vermitteln. Der Vergleich zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Die Kompressionsphase liegt leicht über den Messwerten, die durch die Modellannahmen begründet ist. So wird auf den Feuersteg verzichtet, was Einsparungen an Gitterzellen und damit Rechenzeit bewirkt. Gleichwohl wird auch der Blow-by und Bauteilelastizität vernachlässigt. Nichtsdestotrotz liegen die Kurven gut übereinander und insbesondere

der, für diese Art von Dual-Fuel-Motoren typisch lange, Zündverzug wird sehr gut abgebildet. Sowohl Simulation, als auch Messung zeigen zum gleichen Zeitpunkt den Anstieg im Druckverlauf. Zudem wird der Spitzendruck hinreichend genau erreicht. Der Zeitpunkt des Spitzendrucks ist bei Simulation und Messung identisch und der Fehler liegt bei 2 bar oder 1,1 %.



- (a) Validierung des Referenzfalls mit Messdaten. Blau gestrichelt dargestellt ist die Hochdruckphase des Zylinderdruckverlaufs der Simulation, schwarz durchgezogen der aus 250 Einzelzyklen gemittelte Druckverlauf des Experimentes und in hellgrau die 250 Einzelzyklen. Es zeigt sich eine sehr gute Übereinstimmung von Simulation und Experiment.
- (b) Validierung des Referenzfalls mit Messdaten. Blau gestrichelt dargestellt ist der Brennverlauf der Simulation, schwarz durchgezogen der Brennverlauf des Experimentes, welcher aus dem gemittelten Druckverlauf über ein 0D-Modell berechnet wurde.

Abbildung 8.1: Validierung des Referenzfalls mit Messdaten vom Einzylinder Forschungsmotor.

Lediglich in der Ausbrandphase sinkt der Zylinderdruck in der Simulation etwas stärker als im Experiment. Der Hauptgrund für dieses Verhalten wird hauptsächlich im Wandwärmemodell verortet. Zusätzlich ist in Abbildung 8.1b der Vergleich der Brennverläufe dargestellt. Der Brennverlauf kann im Experiment nicht direkt gemessen werden. Dieser wird über das Druckverlaufanalysetool unter Nutzung von Modellannahmen berechnet. Hingegen kann bei der Simulation der Brennverlauf direkt als umgesetzte Energie ausgegeben werden. Aufgrund dieser Unterschiede sind bei dem direkten Vergleich besondere Vorsicht walten zu lassen. Trotzdem sind die charakteristischen Punkte wie Brennbeginn, 50 %-Umsatzpunkt und Brennende vergleichbar.

8.2 Validierung für unterschiedliche Betriebspunkte

8.2.1 Lastpunktvariation

Zur Validierung des Workflows ist es essentiell, neben der Volllast auch geringe Lasten abzubilden. In den experimentellen Untersuchungen wurden die Lasten in 25 % Schritten variiert. Daraufhin ist auch die Simulationen in dieser Weise durchgeführt worden. Bei der Simulation jedes neuen Lastpunktes ist der gesamte Arbeitsablauf mit Ladungswechselrechnung, Tabellierung und anschließender Verbrennungssimulation komplett neu zu vollziehen, da sich die Randbedingungen vor und nach Motor, insbesondere der Lade- und Abgasgegendruck, aufgrund der Betriebsweise stark ändern. Für die beiden geringen Lasten (50 % und 25 %) ist zudem ein neues Gitter erstellt worden, da hier andere Steuerzeiten der Ventile vorliegen, um unterschiedliche Millergrade zu erreichen. In der Abbildung 8.2 ist ein Vergleich von vier typischen Lastpunkten, wie sie auch am Versuchsmotor gefahren wurden, dargestellt. Es wurden 25 %, 50 %, 75 % sowie 100 % Last simuliert und mit Messdaten verglichen.

Es besteht eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Insbesondere die beiden hohen Lasten werden sehr gut abgebildet. Aber auch die zwei geringeren Lasten passen sehr gut, trotz leichter Abweichungen, welche immer noch innerhalb der Schwankungsbreite des Betriebspunktes liegen.

Gut zu sehen ist, wie sich bei gleichbleibenden Steuerzeiten der Zündverzug hin zu kleineren Lasten sukzessive verlängert. Dies wird durch die geringeren Zylinderdrücke und Zylindertemperaturen zum Einspritzzeitpunkt, der bei allen Lasten konstant bei 30 °KW vor ZOT liegt, begründet. Zwischen den Lasten 75 % und 50 % findet eine Veränderung der Steuerzeiten statt. Aufgrund des schwachen Millergrades bei den geringen Lasten sind die Zylindertemperaturen hier höher, als dies bei gleichbleibenden Steuerzeiten der Fall wäre. Dies begründet den Sprung zwischen den mittleren Lasten.

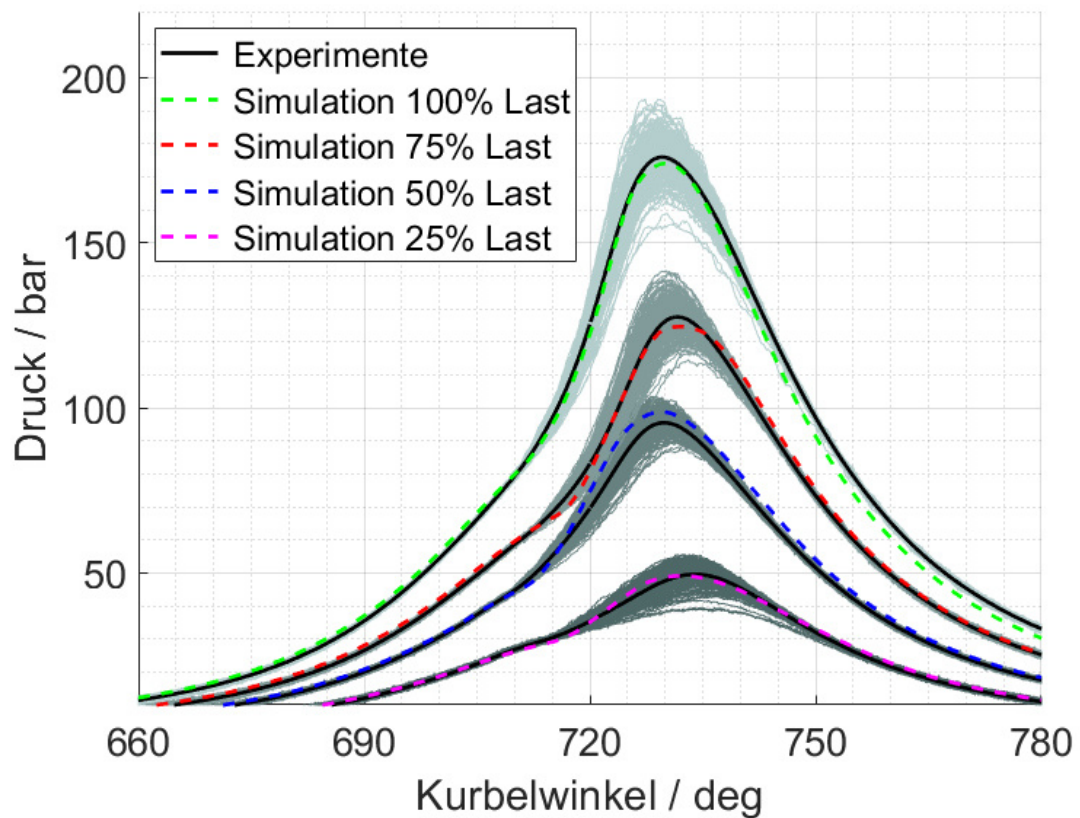


Abbildung 8.2: Validierung des Simulationsmodells für unterschiedliche Lastpunkte. 100 %, 75 %, 50 % und 25 % Last jeweils im Vergleich zu dem gemittelten Zylinderdruckverlauf und den zugehörigen Einzeldruckverläufen.

8.2.2 Variation des Dieselpiloteinspritztimings

Dual-Fuel-Motoren zeigen ein inverses Verhalten des Zündverzuges auf den Einspritzzeitpunkt. In [32] wurde aufgezeigt, dass sich der Zündverzug mit späterer Einspritzung, die sich aber immer noch vor ZOT befindet, verkürzt. Dies ist ein interessanter Aspekt, der Dual-Fuel-Verbrennung, der auch zu validieren ist. Dementsprechend wurden Simulationen, ausgehend vom Referenzfall, durchgeführt. Der Einspritzzeitpunkt wurde dabei nach früh oder spät verstellt. Die Resultate und der Vergleich zu den Messdaten ist in der Abbildung 8.3 dargestellt.

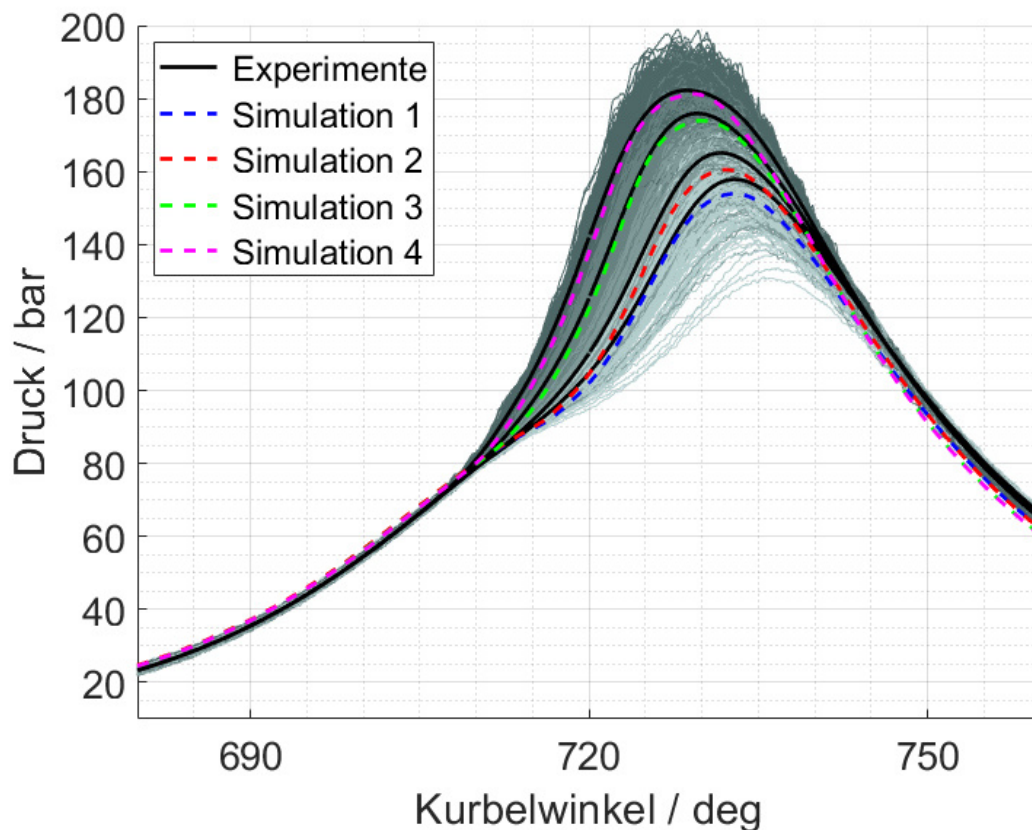


Abbildung 8.3: Validierung für unterschiedliche Einspritzzeitpunkte bei 100% Last. Einspritzbeginn zwischen 40 und 20°KW vor ZOT jeweils im Vergleich zu dem gemittelten Zylinderdruckverlauf und den zugehörigen Einzeldruckverläufen.

Bei dieser Simulation wurde auf eine Neuberechnung des Ladungswechsels, sowie einem erneuten Tabellierungsprozess verzichtet. Wie in Abschnitt 7.3 beschrieben, wurde eine Variantenrechnung mit identischen Anfangsbedingungen durchgeführt. Am Prüfstand jedoch sind die Randbedingungen nie vollkommen gleichbleibend, daher erklären sich die leichten Abweichungen zwischen Simulation und Experiment in einzelnen Fällen. Im Ganzen wird das Verhalten sehr gut wiedergegeben. So wie in den Experimenten verkürzt sich der Zündverzug in den Simulationen bei späterem Einspritzbeginn. Dieses Verhalten, das maßgeblich durch die Reaktionskinetik gesteuert wird, kann mittels des tabellierten Reaktionsmechanismus sehr gut abgebildet werden. Dies zeigt auch den Vorteil dieses Vorgehens. Konventionelle Verbrennungsmodelle, die in der Regel nur für eine Kraftstoffspezies entwickelt worden sind, stoßen hier an ihre Grenzen.

Hintergrund für dieses inverse Verhalten kann in der Zylindertemperatur und dem Zylinderdruck zu Einspritzbeginn verortet werden. Der Zündverzug des Dieselpilotsprays ist sehr stark temperaturabhängig. Mit steigendem Zylinderdruck steigt auch die Temperatur im Brennraum, dadurch sinkt der Zündverzug. Dies wiederum beeinflusst einen weiteren Effekt. Aufgrund des kürzeren Zündverzuges hat das Dieselspray weniger Zeit sich im Brennraum zu verteilen und abzumagern, dies verkürzt zusätzlich den Zündverzug. Weiterhin verändert der Zylinderdruck die Ausbildung des Sprays. Bei geringeren Drücken und damit geringerer Gasdichte reduzieren sich die aerodynamischen Kräfte auf das Spray. Dies wirkt sich negativ auf die Zerstäubung aus und die Kraftstofftropfen bleiben größer. Dadurch ist der Wärmeübergang vom Gas in die Tropfen aufgrund der geringeren Kontaktfläche weniger intensiv. Dies hat wiederum eine schlechtere Verdampfung und damit eine Verlängerung der Zündverzugszeit zur Folge.

In der Abbildung 8.4 sind Schnitte aus den 3D-CFD-Simulationen für zwei verschiedene Einspritzzeitpunkte dargestellt. Es ist der Massenanteil des Pilotkraftstoffes abgebildet, Abbildung 8.4a zeigt die frühe und Abbildung 8.4b die späte Einspritzung. Es ist jeweils ein Zeitpunkt 1 °KW und 5 °KW nach Einspritzbeginn visualisiert. Es ist gut zu erkennen, dass die Spraykeulen bei der frühen Einspritzung bereits kurz nach Einspritzbeginn vergleichsweise weit in Brennraum eindringen. Hingegen bleibt das Spray bei der späten Einspritzung mehr zentral und kompakt und begünstigt somit die frühe Zündung.

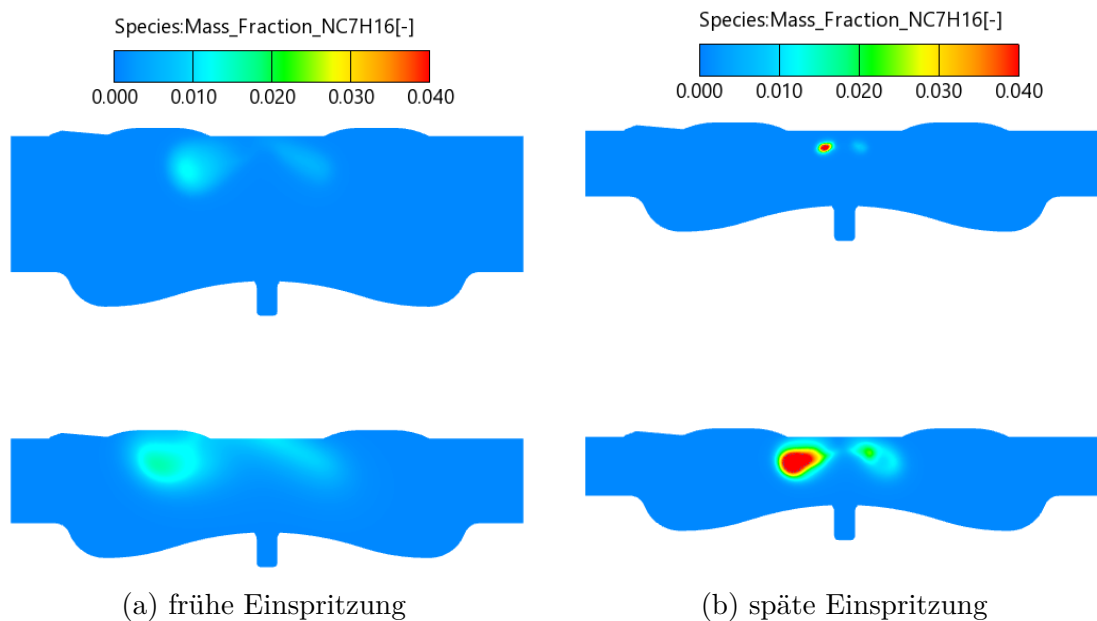


Abbildung 8.4: Darstellung des Massenanteils von n-Heptan bei früher und später Einspritzung. Obere Bilder zeigen einen Zeitpunkt 1°KW und untere Bilder 5°KW nach Einspritzbeginn. Die frühe Einspritzung erlaubt ein weites Verteilen des Pilotkraftstoffs im Brennraum und zur Abmagerung des Sprays.

8.2.3 Mehrfacheinspritzung des Dieselpilotsprays

Eine weitere Möglichkeit beim Dual-Fuel-Brennverfahren ist die Mehrfacheinspritzung. Dieser Ansatz ist bereits aus dem konventionellen Dieselmotoren bekannt. In diesem Fall wird weit vor der eigentlichen Haupteinspritzung eine Menge Pilotkraftstoff in den Brennraum eingebracht. Diese Menge verhält sich aufgrund der noch geringen Brennraumtemperatur weitestgehend nichtreaktiv, es erfolgt keine erkennbare Energiefreisetzung. Jedoch treten einige Vorreaktionen auf. Dies begünstigt die spätere komplett reaktive Haupteinspritzung. Bei Betrachtung der CFD-Ergebnisse zeigt sich, dass die Haupteinspritzmenge in eine Wolke der Voreinspritzung gesprüht wird, wie in Abbildung 8.5 zu sehen ist. Weiterhin stellt Abbildung 8.6 dar, dass bereits vor der eigentlichen Haupteinspritzung Formaldehyd gebildet wird. Es laufen bereits Vorreaktionen ab, die den Zündprozess der Haupteinspritzmenge begünstigen und dadurch den Zündverzug reduzieren.

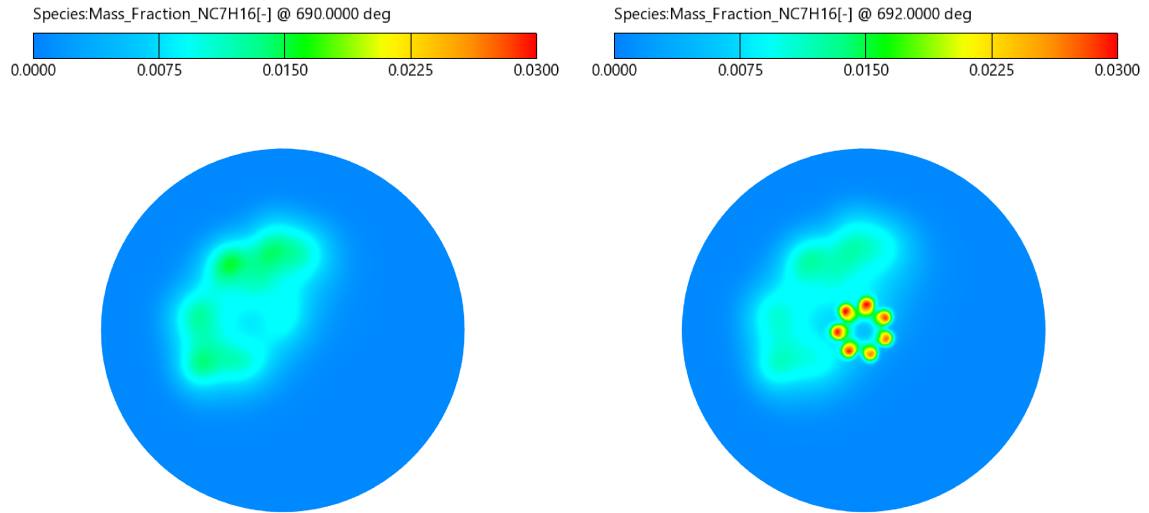


Abbildung 8.5: Darstellung des Massenanteils von n-Heptan bei der Mehrfacheinspritzung. Links ist der Zeitpunkt vor und rechts während der Haupteinspritzung dargestellt. Es ist zu sehen, wie die Haupteinspritzmenge in die bestehende Wolke der Voreinspritzung eingebracht wird.

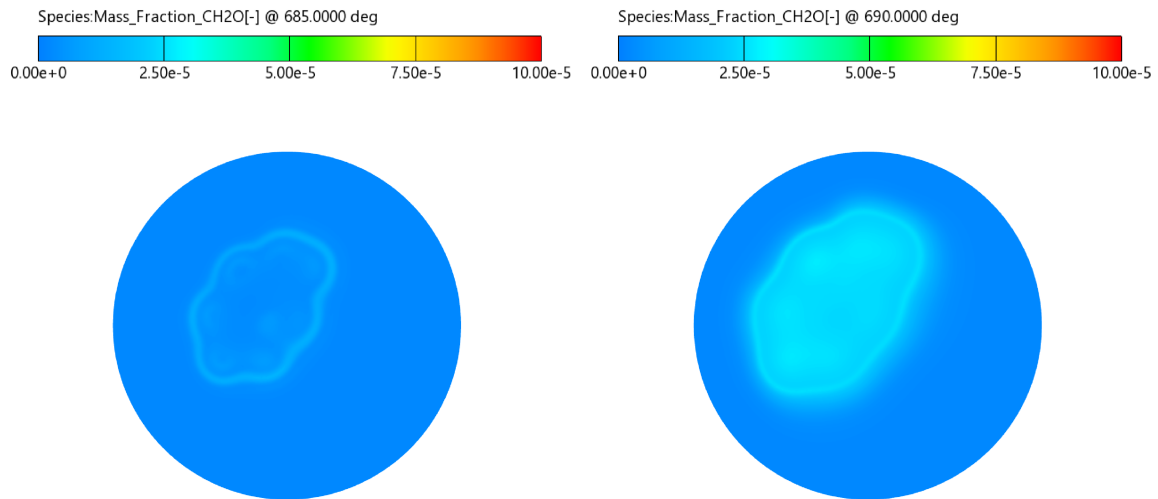


Abbildung 8.6: Darstellung des Massenanteils von Formaldehyd bei der Mehrfacheinspritzung für zwei unterschiedliche Zeitpunkte. Sichtbar ist die Bildung von Formaldehyd vor der eigentlichen Haupteinspritzung. Dies ist Indiz für bereits ablaufende Reaktionsprozesse, die den Zündprozess der Haupteinspritzmenge begünstigen.

Die Abbildung 8.7 stellt den Vergleich von Messung und Simulation sowohl für den Referenzfall als auch für die Mehrfacheinspritzung dar. Bei dieser Mehrfacheinspritzung ist die Gesamtmasse des Pilotkraftstoffs im Vergleich zum Referenzfall gleich gehalten worden. Dieser wurde in zwei unterschiedlich große Portionen unterteilt. Die Voreinspritzung ist mit der 1,5 fachen Masse der Haupteinspritzung die größere Menge. Aufgrund von Verbrennungsstabilität und Klopfneigung wurde bei der Mehrfacheinspritzung der Ladedruck leicht angehoben. Daher ergibt sich der höhere Zylinderspitzenndruck bei der Mehrfacheinspritzung gegenüber dem Referenzfall. Die Simulation der Mehrfacheinspritzung deckt sich sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen. Wie bereits im vorherigen Kapitel erwähnt, kann die Abbildung dieses Verhaltens als Vorteil gegenüber konventionellen Verbrennungsmodellen betrachtet werden. Die Dual-Fuel-Mehrfacheinspritzung ist ein stark reaktionskinetisch getriebenes Verfahren. Erst durch Nutzung von detaillierten Reaktionsmechanismen ist dieses Brennverfahren simulativ realisierbar.

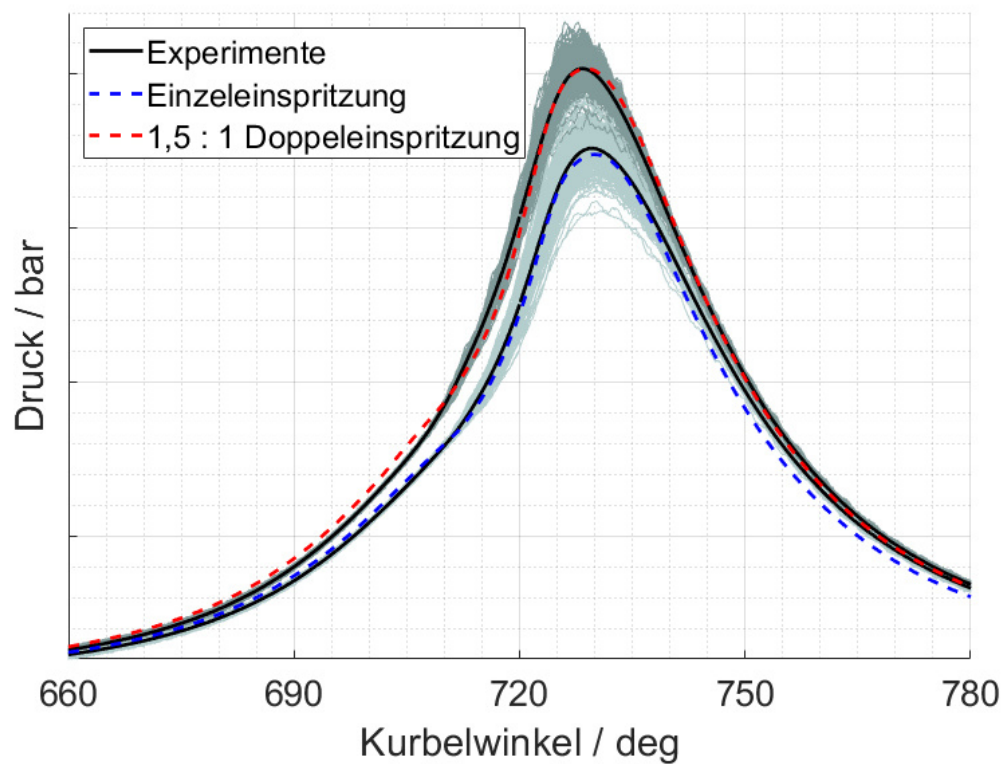


Abbildung 8.7: Validierung für unterschiedliche Einspritzstrategien bei 100% Last. Vergleich zwischen einer Einzeleinspritzung mit einer Doppeleinspritzung. Die Doppeleinspritzung besteht aus einer frühen Voreinspritzung, die eine 1,5 fache Menge der Haupteinspritzung hat. Die kumulierten Einspritzmassen bei Einfach- und Mehrfacheinspritzung sind nahezu identisch.

8.3 Zusammenfassung

Die Validierung ist ein wichtiger Bestandteil bei der Erstellung von numerischen Modellen. Erst sie erlauben eine Aussage über die Plausibilität dieser. Darum ist aus den vorhandenen Messergebnissen der Prüfstandsversuche ein geeigneter Messpunkt als Referenz definiert worden. Dieser wurde als Ausgangsbasis für die weiteren Untersuchungen genutzt. Hierfür wurde ein Vollastpunkt bei Nenndrehzahl mit einem Basis Einspritztiming gewählt. An diesem konnte die Plausibilität der Herangehensweise bewiesen werden. Darauf folgend ist das numerische Modell ebenso bei verschiedenen Lastpunkten angewandt und anhand von Messdaten validiert worden. Die Simulationen von unterschiedlichen Einspritzzeitpunkten sowie die Anwendung einer Mehreinspritzstrategie zeigen gute Übereinstimmung mit den zugehörigen Messdaten. Die Möglichkeit, Einspritzzeitpunktvariationen und Mehrfacheinspritzungen abbilden zu können, zeigt den Vorteil, welche die Nutzung von detaillierten Reaktionsmechanismen gegenüber konventionellen Verbrennungsmodellen hat.

9 Ergebnisse

9.1 Vergleich zentrale - dezentrale Einspritzung

Bei aktuellen Dual-Fuel-Motoren sind unterschiedliche Konfigurationen des Einspritzsystems möglich. So kann zum einen im Zentrum des Brennraums sich ein PLD-Injektor befinden, der den konventionellen Dieselpilotbetrieb bis zu Vollast abbilden kann. Zusätzlich ist ein Commonrailinjektor dezentral, zwischen den Ventilen angeordnet, der für die Einbringung der Dieselpilotmenge im Gasbetrieb dimensioniert ist. Eine weitere Option ist die Nutzung des zentralen PLD-Injektors mit einem nah und damit relativ zentral angeordneten Commonrailinjektor, der ebenso für die Pilotmenge im Gasbetrieb ausgelegt ist. Die dritte Option besteht aus einem zentral angeordneten Commonrailinjektor, der sowohl für die kleinen Pilotmengen, als auch im reinen Dieselpilotbetrieb genutzt werden kann. Diese werden auch Wide-Range Injektoren genannt. Bei dieser Variante ist unter Umständen, je nach Düsenkonfiguration und Injektorauslegung, kein Vollastbetrieb im reinen Dieselpilotmodus möglich. Im Folgenden ist ein Vergleich zwischen zwei dezentralen und einem zentralen Injektor gezogen worden. Die folgende Tabelle 9.1 gibt einen Überblick über die drei untersuchten Injektoren. Als numerisches Ausgangsmodell ist der in Kapitel 8 erwähnte Referenzfall genutzt worden. Daraus wurden die drei Simulationen mit den unterschiedlichen Injektoren abgeleitet.

Tabelle 9.1: Übersicht der untersuchten Injektoren

Position	Dezentral	Dezentral	Zentral
Spritzlochanzahl	2	4	7
Spritzdurchmesser	0,263 mm	0,183 mm	0,25 mm
Höhenwinkel	130 °	130 °	140 °
Q_{hyd} in ccm/30s	350	350	1375

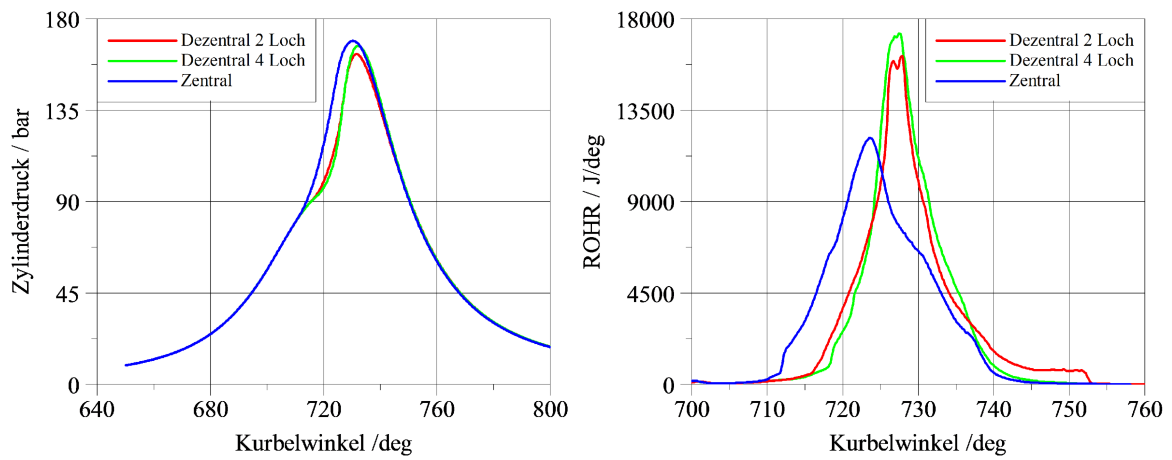


Abbildung 9.1: Darstellung des Druckverlaufs und der Energiefreisetzung bei den unterschiedlichen Injektorpositionen. Das dezentrale Einbringen des Pilotkraftstoffs führt zu verlängertem Zündverzug und zu steileren Druckanstiegsgradienten.

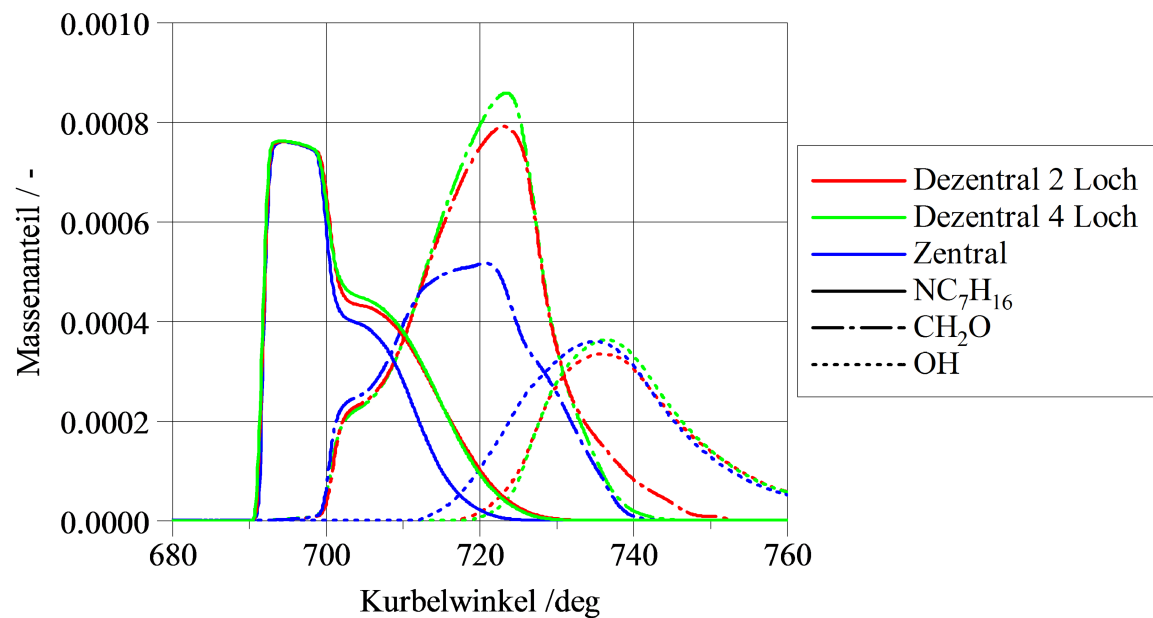


Abbildung 9.2: Massenanteile verschiedener Spezies im Vergleich für die dezentralen sowie zentrale Injektorposition.

Bei dem Vergleich der Ergebnisse in Abbildung 9.1 wird der Einfluss der Injektorposition deutlich. Die Randbedingungen wie Einspritzmasse, Einspritztiming, Ladedruck und Gasmasse wurden für diese Untersuchungen gleich gehalten. Die zentrale Einspritzung zeigt einen merklich kürzeren Zündverzug. Dies begünstigt einen stabileren Motorlauf mit geringeren Zyklus zu Zyklus Schwankungen. Die dezentralen Einspritzungen zeigen beide ein ähnliches Verhalten.

Die Zündprozesse von Kohlenwasserstoffen beginnen gemäß Kapitel 4.1.3 mit einer zweistufigen Zündung. Während der Einleitung der Zündung, wird durch die Kaltflamreaktionen Formaldehyd CH_2O gebildet [9]. Dieses kann sehr gut mittels optischer Messtechniken gemessen werden und wird daher bei experimentellen Versuchen als Indiz für Vorreaktionen verwendet [29]. Somit ist die Vorverbrennungsphase gut beschreibbar. Zu dem Zeitpunkt, bei dem die anschließende Hochtemperaturverbrennung einsetzt, wird das Formaldehyd schnell abgebaut [25] [46], es folgt die Bildung des OH-Radikals. Daher erfolgt die Detektion der Hochtemperaturverbrennung aufgrund der OH-Radikalbildung. Auch dieses ist mittels optischer Messtechnik gut zu bestimmen und wird daher in Experimenten genutzt [68] [70].

Da sowohl Formaldehyd als auch OH-Radikale bei messtechnischen Untersuchungen angewandt werden können, bietet es sich an, diese ebenso in den numerischen Simulationen zu betrachten. Zwar wurden bei den getätigten Experimenten keine optische Messtechnik angewandt. Nichtsdestotrotz kann hier der Vorteil des detaillierten Einblicks durch die Simulation aufgezeigt werden.

Die unterschiedlichen Spritzlochanzahlen haben einen geringeren Einfluss im Vergleich zur Position im Brennraum. Wie in Abbildung 9.2 sichtbar ist, unterscheiden sich der dezentrale 2 Loch und der dezentrale 4 Loch Injektor nur wenig zueinander. Dieses Resultat passt zu den Ergebnissen in [57], wo die Änderung der Spritzlochzahl von 4 auf 7 die Verbrennung nur leicht beeinflusst. Die größten Unterschiede liegen erwartungsgemäß in der Position des Injektors. So wird bei der zentralen Einspritzung das n-Heptan früher und stärker abgebaut. Dies erfolgt aufgrund der günstigen zentralen Position und der sphärischen Ausbreitung des Sprays. Jedoch bildet sich das Formaldehyd CH_2O bei allen drei Untersuchungen zum nahezu gleichen Zeitpunkt. Das bedeutet, dass die Vorreaktionen in den betrachteten Fällen ähnlich beginnen. Bei der zentralen Einspritzung jedoch setzt die Hochtemperaturverbrennung zeitiger

ein. Deutlich wird dies durch den frühzeitigeren Abbau des Formaldehydes. Die OH-Radikalbildung setzt früher ein, was mit dem Verbrennungsbeginn korreliert.

Gleiches zeigt der zeitliche Verlauf der dreidimensionalen Ergebnisse in den Abbildungen 9.3 und 9.4. Hier werden für die drei Simulationen sowohl der Massenanteil von n-Heptan, als auch die Fortschrittsvariable als Isoflächen dargestellt. Hier zeigt sich, dass im Fall der zentralen Einspritzung das Dieselpilotspray sphärisch im Brennraum verteilt, dabei aber kompakt bleibt. Hingegen bei den beiden dezentralen Injektoren dringt die n-Heptanwolke weit in den Brennraum ein und bietet die Möglichkeit einer lokal stärkeren Abmagerung. Daraus resultieren die längeren Zündverzögerungen bei dieser Konfiguration. Im weiteren Verlauf ist ersichtlich, dass, während bei der zentralen Injektorposition die Zündung und damit die Ausbreitung der Flamme vom Zentrum aus erfolgt, bei beiden dezentralen Injektorlagen die Zündung eher im Randbereich stattfindet. Es entstehen an verschiedenen Positionen Zündherde. Daraufhin bilden sich zwei Flammenfronten aus, die aufeinander zulaufen, bis sie sich letztendlich zu einer vereinigen. Die zentrale Injektorlage zeigt hingegen das Zünden nahe des Zentrums und das Durchbrennen einer Flammenfront ausgehend vom Zentrum nach außen weg.

In der Arbeit von Henke et. al. [33] wird der Vergleich zwischen der dezentralen und zentralen Injektorposition anhand von Messdaten gezogen. Es wurde dargestellt, dass die zentrale Injektorposition geringere zyklische Schwankungen und einen früheren 50-Prozent Umsatzpunkt aufweisen. Diese Resultate werden anhand der Simulation bestätigt. Aufgrund des weiteren Eindringens in den Brennraum und der damit verbundenen Abmagerung der Dieselpilotwolke kommt es zu längeren Zündverzögerungen. Diese sind anfälliger für Veränderungen im Strömungsfeld. Zudem bilden sich die Zündorte an gegenüberliegenden Stellen im Brennraum aus, was die Ausbildung zweier Flammenfronten zur Folge hat. Beide Effekte wirken sich negativ auf die Verbrennungsstabilität aus und erhöhen die zyklischen Schwankungen. Zudem sorgt der verzögerte Brennbeginn für eine Verlagerung der Verbrennungsphase in die Expansion, was den späteren 50-Prozent Umsatzpunkt bei den dezentralen Injektorlagen erklärt.

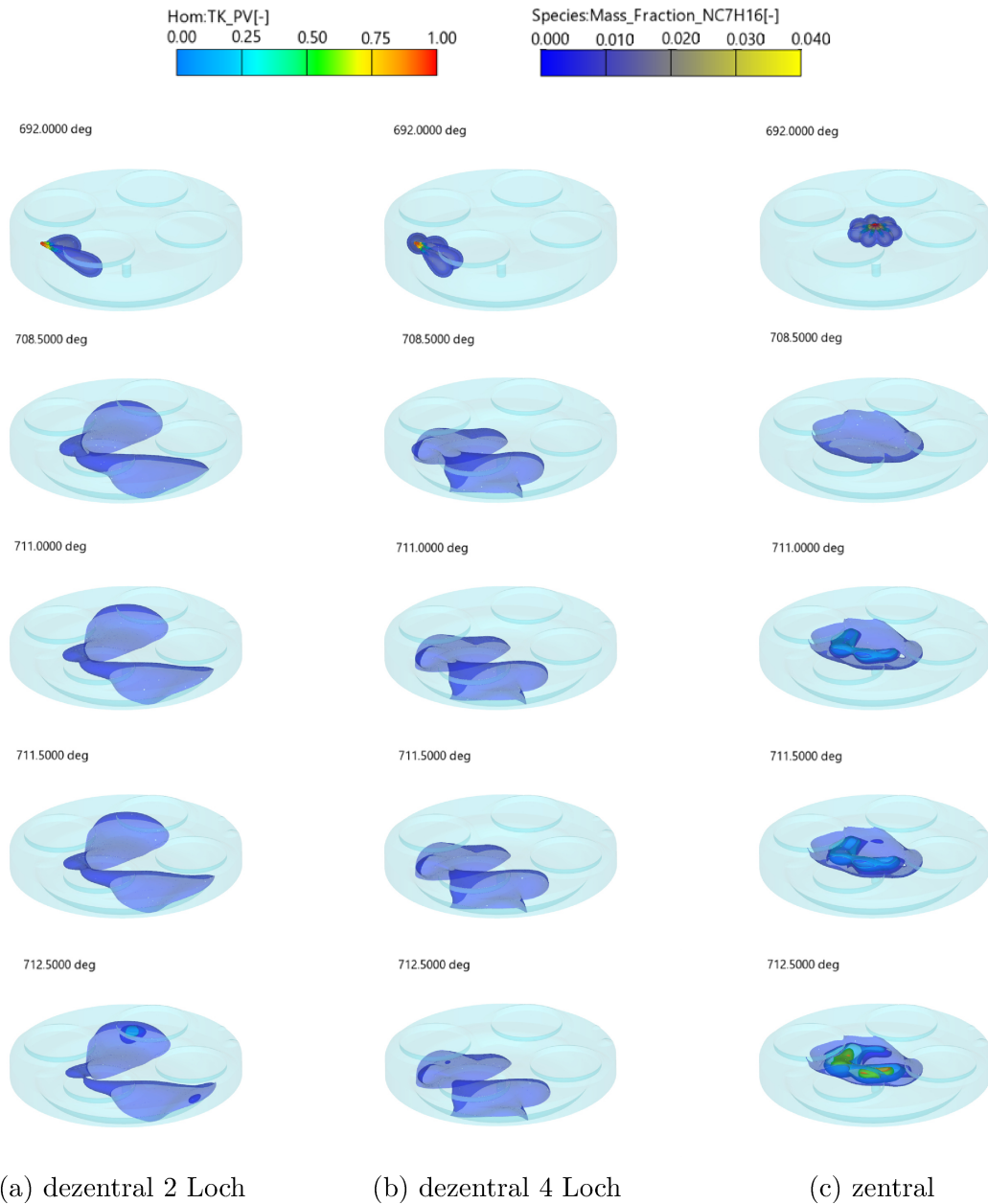


Abbildung 9.3: Zeitlicher Verlauf des n-Heptan Massenbruches, sowie der Reaktionsfortschrittsvariablen als Isoflächen für die verschiedenen Injektorpositionen. Die zentrale Injektorposition ist geprägt von einer kompakten Dieselpilotwolke und einer Flammenenfrontverbrennung beginnend von einem zentralen Zündort. Bei beiden dezentralen Injektorlagen wird ein weites Eindringen in den Brennraum deutlich, was eine Abmagerung und dadurch einen längeren Zündverzug begünstigt. Daraufhin bilden sich im Wandbereich zwei Zündorte aus. Diese sorgen für das Entstehen von zwei sich gegenläufigen Flammenfronten.

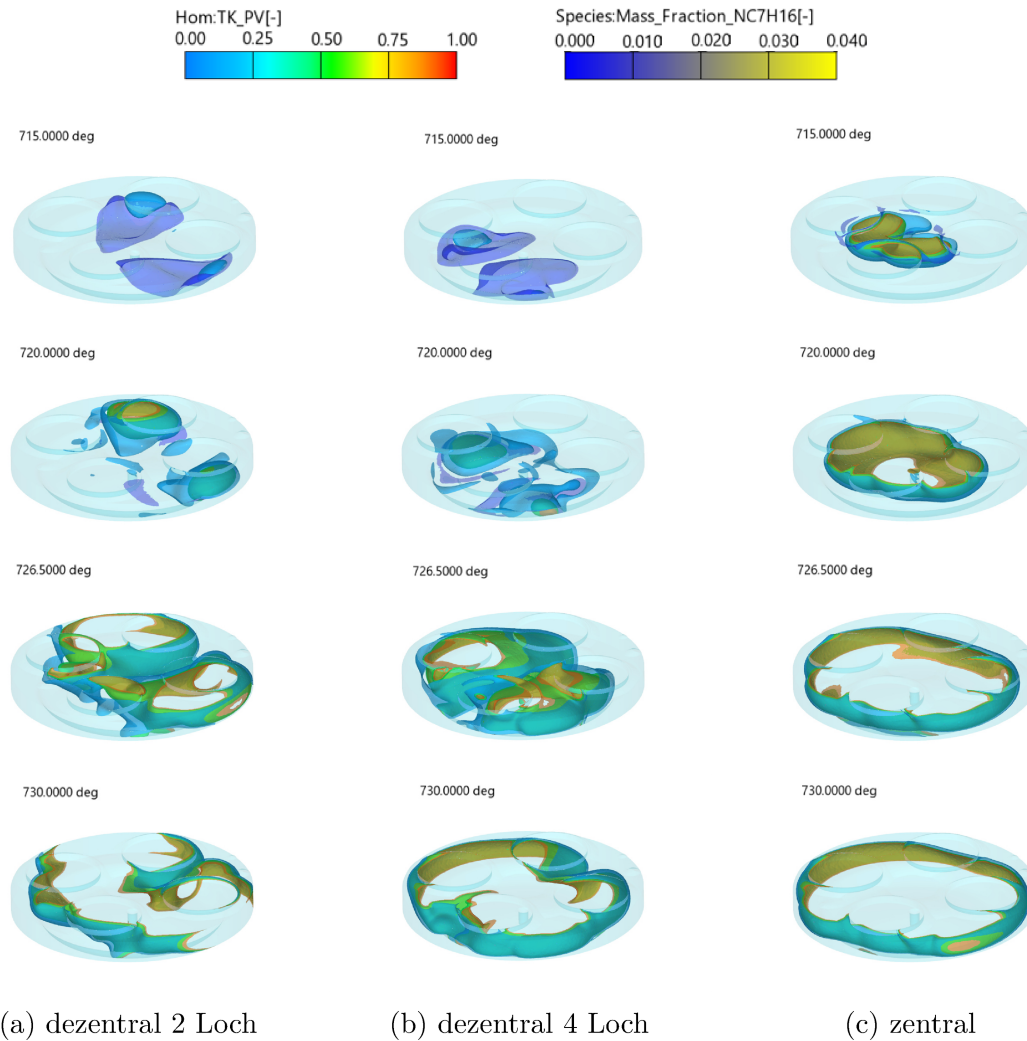


Abbildung 9.4: Zeitlicher Verlauf des n-Heptan Massenbruches, sowie der Reaktionsfortschrittsvariablen als Isoflächen für die verschiedenen Injektorpositionen. Die zentrale Injektorposition ist geprägt von einer kompakten Dieselpilotwolke und einer Flammenfrontverbrennung beginnend von einem zentralen Zündort. Bei beiden dezentralen Injektorlagen wird ein weites Eindringen in den Brennraum deutlich, was eine Abmagerung und dadurch einen längeren Zündverzug begünstigt. Daraufhin bilden sich im Wandbereich zwei Zündorte aus. Diese sorgen für das Entstehen von zwei sich gegenläufigen Flammenfronten.

9.2 Kolben- und Zylinderkopfvariation

Eine weitere Untersuchung betrifft das Verhalten unterschiedlicher Zylinderköpfe und Kolbenkronen, siehe Abbildung 9.5. Neben dem Zylinderkopf der Serie und dem Serienkolben existieren ein weiterer Zylinderkopf und drei weitere Kolbenkronen. Die Serienkonfiguration entstammt dem Dieselmotorprinzip, dem dieser Motor vorausging. So weist die Kolbenkrone ein Dieselmotor typisches Design auf und der Zylinderkopf ist für minimale Strömungsverluste drallarm ausgelegt. Bei dem zweiten Zylinderkopf sind die Ventiltaschen maskiert. Somit wird im Brennraum eine Drallbewegung erzeugt, die den Verbrennungsprozess verbessern soll. Die weiteren Kolbenkronen wurden anhand dem Design der Kolben für die reinen Gasmotoren entworfen. Die dieseltypischen Designmerkmale der geschwungenen Kolbenoberfläche sind hier nicht vorhanden. Die Kolbenkrone in Version 2 weist eine tiefe flache Mulde auf. Kolbenkrone Version 3 ist eine niedrig flache Mulde und nähert sich einem flachen Kolben an und die Version 4 ähnelt einer Badewannenform. Hier geht die Mulde langsam in den Quenchbereich über.

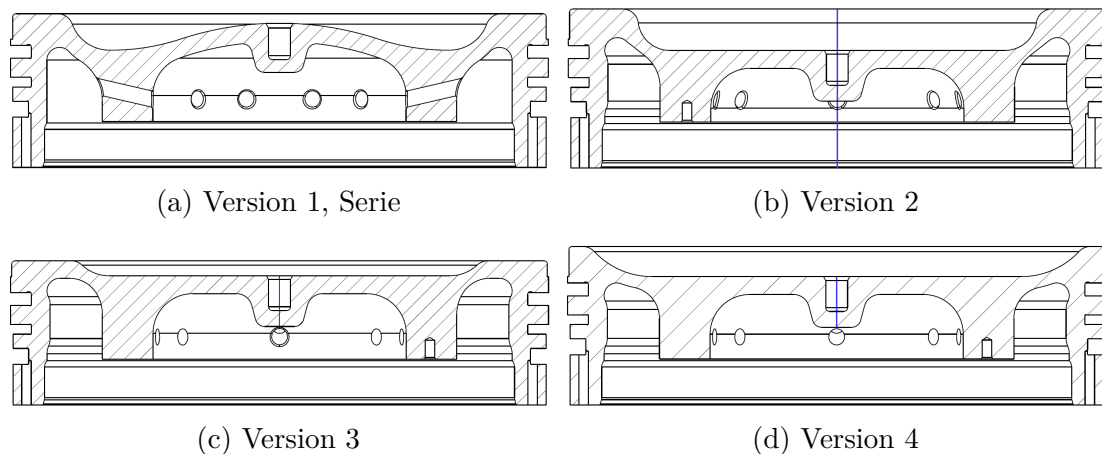


Abbildung 9.5: Zeichnungen der unterschiedlichen Kolbenkronen, (a) Serienmulde, (b) tiefe flache Mulde, (c) niedrig flache Mulde und (d) Badewannenform

In Summe stehen somit vier unterschiedliche Kolbenkronen und zwei verschiedene Zylinderköpfe zu Verfügung. Daraus ergeben sich acht Kombinationsmöglichkeiten, die im Rahmen dieser Arbeit untersucht wurden.

Die Simulationen wurden im Vorfeld, bevor die experimentellen Untersuchungen gestartet sind, durchgeführt. Aus diesem Grund konnte nicht auf Messdaten zur Definition der Randbedingungen zurückgegriffen werden. Zur Lösung sind deshalb die Randbedingungen des Referenzfalls gewählt worden. Dies ermöglicht einen Vergleich zwischen den einzelnen Simulationen, sorgt aber aufgrund abweichender Randbedingungen nur zu einem bedingten Vergleich mit den anschließend erfolgten Experimenten.

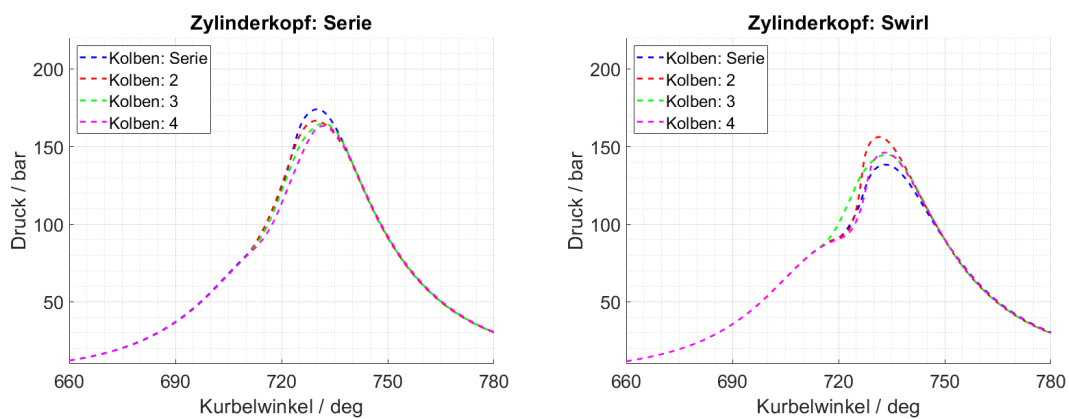


Abbildung 9.6: Darstellung der Zylinderdruckverläufe der Kolben- und Zylinderkopfvariation. Vergleich zwischen den numerischen Ergebnissen der verschiedenen Kolbenkronen. Links für den Serienzylinderkopf und rechts für den Zylinderkopf mit Drall.

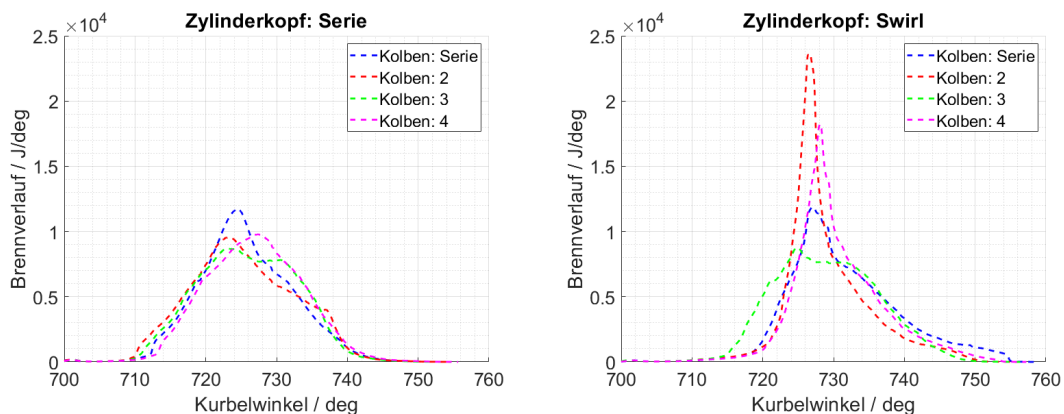


Abbildung 9.7: Darstellung der Energiefreisetzung der Kolben- und Zylinderkopfvariation. Vergleich zwischen den numerischen Ergebnissen der verschiedenen Kolbenkronen. Links für den Serienzylinderkopf und rechts für den Zylinderkopf mit Drall.

Das Ziel war die Potenzialabschätzung der unterschiedlichen Konfigurationen. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 9.6 und 9.7 dargestellt. Bei dem Serienzylinderkopf zeigt sich, dass dieser sich im Vergleich mit den übrigen Varianten sehr gut verhält. Als vielversprechende Variante kann der Kolben 2 gesehen werden. Er zeichnet sich durch einen kürzeren Zündverzug aus. Das Potential der Kolben 3 und 4 wird hingegen nicht hoch eingeschätzt. Diese Versionen weisen sich durch einen längeren Zündverzug und dazu durch eine längere Brenndauer aus. Bei dem Vergleich zwischen dem Serienzylinderkopf und dem Zylinderkopf mit Swirl zeigt die Simulation eine starke Erhöhung des Zündverzuges aufgrund des Swirls. Hier wurde eine Verdünnung des Dieselpilotsprays aufgrund der Ladungsbewegung beobachtet. In den Vergleichen zu den später erfolgten experimentellen Untersuchungen ist ersichtlich, dass die Simulation des drallarmen Serienzylinderkopfes sehr gut vorausgesagt werden kann, was in Abbildung 9.8 zu sehen ist. Jedoch bei den Vergleichen des Zylinderkopfs mit Swirl wird ein gegenläufiges Verhalten deutlich. Die Experimente zeigen, dass der Swirl keinen negativen Einfluss auf den Zündverzug hat und im Gegenteil sogar zu einer Verkürzung des selbigen beiträgt. Üblicherweise erfolgt im FGM-Modell eine turbulenz-chemie Kopplung über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Dafür wird eine β -PDF genutzt [1]. Durch Erweiterung der Dimensionen der FGM Datenbank um die Varianzen wird das Kopplungsmodell verbessert [14]. In der vorliegenden Version von AVL TABKIN™ ist eine Funktionalität des geteilten Hauptspeichers bisher nicht implementiert. Das bedeutet, dass für jeden benutzten CPU Kern die komplette Datenbank in den Hauptspeicher geladen werden muss. Erschwerend kommt hinzu, dass die Rechengitter für einen Motor dieser Dimension und der benötigten Zellgröße selbst einen hohen Hauptspeicherbedarf hat. Aus diesem Grund kann die Datenbank eine gewisse Dateigröße nicht überschreiten, damit die Simulation auf der vorhandenen Hardware durchgeführt werden kann. Die Anwendung der Varianzen führt zu einem exponentiellen Anwachsen der Datenbankgröße, daher wurden diese zunächst bei dem Tabellierungsprozess vernachlässigt. Es ist anzunehmen, dass der Einfluss des Swirls ohne die β -PDF mit den Varianzen nicht korrekt abgebildet werden kann. An diesem Punkt sind noch weitere Untersuchungen notwendig. Dies kann erfolgen sobald die Funktionalität des geteilten Hauptspeichers implementiert ist. Diese Problematik wurde mit dem Softwarehersteller bereits diskutiert und soll in einer der nächsten, zukünftigen Versionen umgesetzt werden. Dadurch werden weitere Freiheiten in der Datenbankgestaltung möglich.

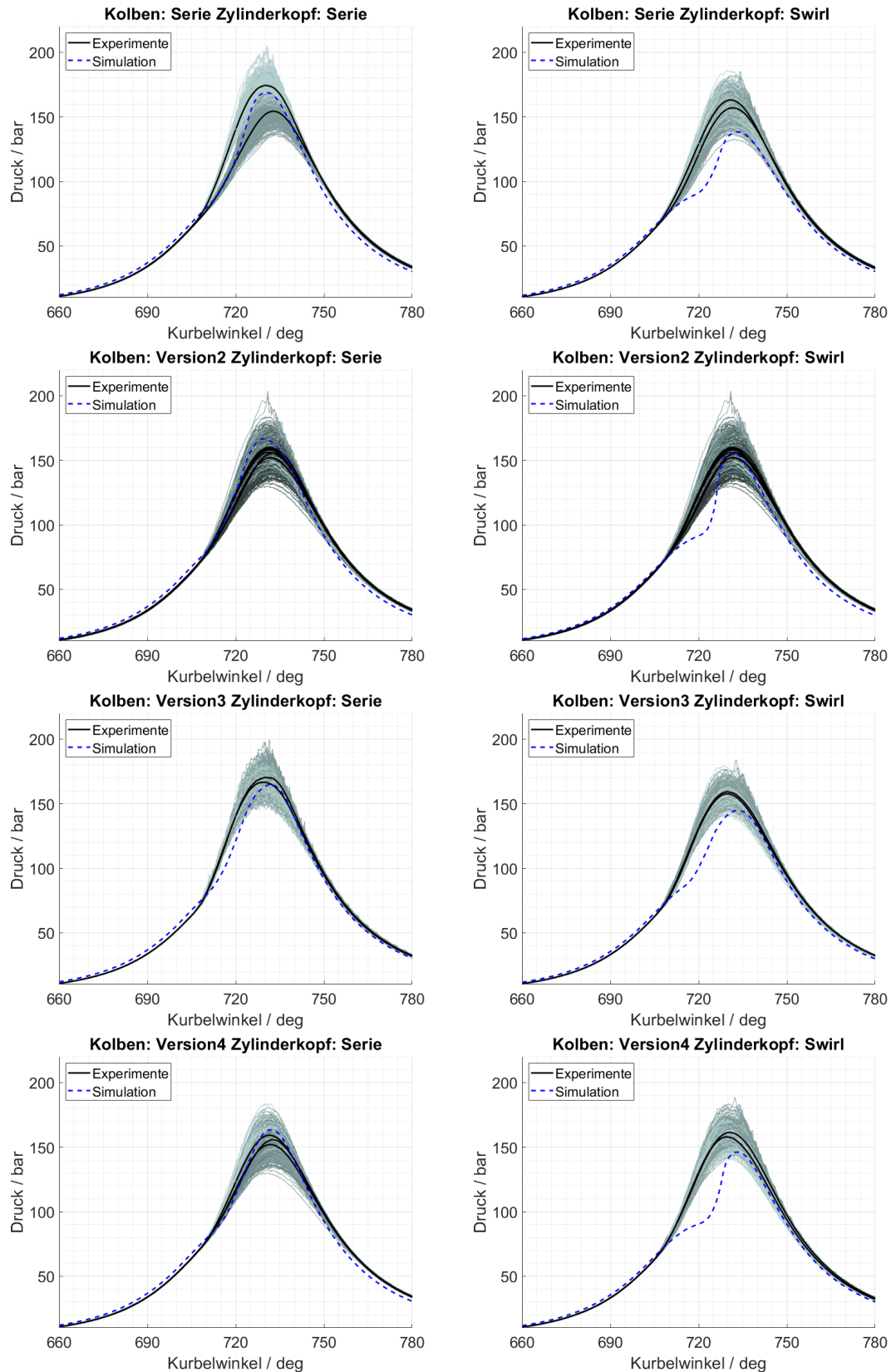


Abbildung 9.8: Darstellung der Zylinderdruckverläufe der Kolben- und Zylinderkopfvariation. Die Simulationen wurden vor den Experimenten durchgeführt. Daher wurden als Randbedingungen die Werte vom Referenzfall übernommen. Bei dem drallarmen Zylinderkopf der Serie bildet die Simulation das Experiment gut ab. Jedoch bei dem Zylinderkopf mit erhöhten Swirl zeigt die Simulation einen verlängerten Zündverzug.

Bei der Betrachtung der Simulationen mit dem Drall erzeugenden Zylinderkopf und den Experimenten in Abbildung 9.9 ist trotz des Unterschiedes im Zündverzug der gleiche Trend zwischen den verschiedenen Kolbenkronen ersichtlich. Der Serienkolben zeigt den geringsten und der Kolben2 den höchsten Zylinderspitzenndruck, die zugehörigen Werte von Kolben3 und Kolben4 liegen nah beieinander zwischen diesen.

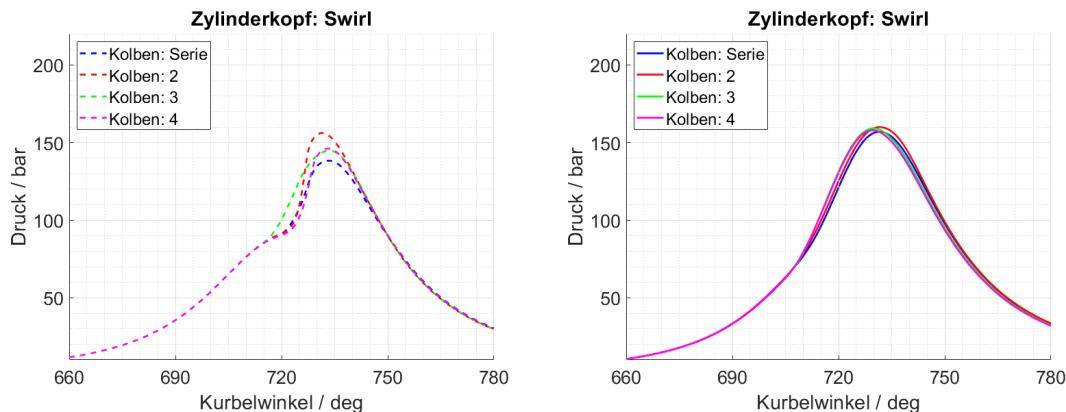


Abbildung 9.9: Darstellung der Zylinderdruckverläufe der Kolbenvariation unter Anwendung des Zylinderkopfes mit erhöhtem Drall. Vergleich zwischen den numerischen Ergebnissen und den experimentellen Untersuchungen. Links für die Simulation und rechts für die Experimente. Trotz der unterschiedlichen Zündverzüge zwischen Simulation und Experiment zeigen die verschiedenen Kolbenkronen die gleichen Tendenzen.

9.3 Zusammenfassung

Das Ergebniskapitel zeigt die Ergebnisse zwei numerischer Untersuchungen. Zunächst wurden die dezentrale und die zentrale Injektorposition verglichen. Es zeigt sich der Vorteil bei der zentralen Einspritzposition. Die vorteilhaftere Position im Brennraum begünstigt die Zündung der Dieselpilotmenge und sorgt somit für kürzere Zündverzüge und stabileren Motorlauf. Zusätzlich wird die Ausbildung von mehreren gegenläufigen Flammenfronten vermieden.

Weiterhin wurden vier unterschiedliche Kolbenkronen und zusätzlich ein weiterer Zylinderkopf simuliert. Bei Verwendung des drallarmen Serienzylinderkopfes zeigen

die vorab simulierten Ergebnisse gute Übereinstimmung mit den später erfolgten experimentellen Untersuchungen.

Hingegen bei der Konfiguration mit dem zweiten Zylinderkopf, der einen erhöhten Drall im Brennraum generiert, spiegeln die Experimente die zuvor getätigten Simulationen nur bedingt wieder. Der Zündverzug ist in der Simulation länger als bei den Experimenten. Als Ursache wird hier die notwendige Vernachlässigung der Varianz des Mischungsbruches vermutet. Die grundlegenden Eigenschaften der verschiedenen Kolbenkronen werden trotzdem abgebildet. Hierzu sind weitere Untersuchungen notwendig. Dies wird möglich, sobald die Funktionalität des Gemeinsamen Hauptspeichers in der CFD-Software implementiert ist.

10 Zusammenfassung und Ausblick

Das Ziel dieser Arbeit bestand darin eine Methodik zu entwickeln, mit der Dual-Fuel-Schiffsdieselmotoren simuliert werden können. Aufgrund der geometrischen Abmaße von Schiffsdieselmotoren und der benötigten Zellgröße in der Rechendomain wurde ein Ansatz mit im CDF-Solver direkt gelöster chemischen Reaktionskinetik verworfen. Daher wurde ein Vorgehen auf Basis einer Reaktionsfortschrittsvariablen gesucht. Aufgrund der monovalenten Kraftstofffähigkeit gängiger Verbrennungsmodelle wurde der FGM-Ansatz mit tabellierter Reaktionskinetik gewählt. Dafür wurde ein geeigneter Reaktionsmechanismus benötigt. Anhand von Literaturdaten sind eine Reihe von Mechanismen auf die Praktikabilität für die Anwendung in der Dual-Fuel-Verbrennung untersucht worden. Hierfür sind homogene Reaktorrechnungen, eindimensionale Gegenstromflammen und experimentelle Daten von Flammrohren und Rapid Compression Machines, die der Literatur entstammen, genutzt worden. Die Untersuchungen haben ergeben, dass die Mechanismen, welche von Hause aus die Reaktionspfade für Erdgas und n-Heptan enthalten, für die Dual-Fuel-Verbrennungssimulation nicht geeignet sind. Daher wurde der USC Mech Version II [91] für Erdgas mit dem ERC Mechanismus [71] für n-Heptan kombiniert. Die simulativen Reaktoruntersuchungen dieses kombinierten Reaktionsmechanismus passen gut zu den experimentellen Daten der Literatur.

Anhand des Reaktionsmechanismus ist eine Gitterkonvergenzstudie durchgeführt worden. Als Ergebnis hat sich eine Zellweite von 0,5 mm herausgestellt. Dies ist der beste Kompromiss zwischen Simulationsgenauigkeit und benötigter Rechenzeit. Diese Zellweite wurde anschließend bei der Gittererstellung für die Verbrennungsphase beachtet.

Die Simulation des Dual-Fuel-Schiffsdieselmotors wurde in zwei Teile gesplittet. Zunächst erfolgt die Simulation der Ladungswechselphase. Hier wird auf die Verwendung des Verbrennungsmodells verzichtet. Dies hat zum einen den Vorteil, dass ab dem Zeitpunkt

des Schließens des Einlassventils, bei dem die anschließende Verbrennungsrechnung initialisiert wird, eine Variantenrechnung durchgeführt werden kann. Zum anderen muss die Datenbank mit dem tabellierten Reaktionsmechanismus nicht im Hauptspeicher gehalten werden, siehe Kapitel 9.2. Dadurch kann die maximale CPU-Anzahl erhöht und die Rechendauer für diesen Zeitbereich verringert werden.

Die Validierung des Modells erfolgte anhand von experimentellen Messdaten, die an dem Einzylinderforschungsmotor aufgenommen wurden. Dazu ist ein Referenzfall definiert worden, der einen Volllastpunkt bei Nenndrehzahl darstellt. Um die Validierung zu untermauern, sind Varianten mit veränderten Einspritzzeitpunkten der Dieselpilotmenge und eine Lastpunktvariation durchgeführt worden. Zusätzlich wurde die Option einer Mehrfacheinspritzung untersucht. Diese Ergebnisse zeigen eine sehr gute Übereinstimmung von den Simulationen mit den Messdaten.

Weitere Betrachtungen erfolgten zu verschiedenen Injektorpositionen. Zwei dezentrale und ein zentraler Injektor sind miteinander verglichen worden. Während die beiden dezentralen Injektorlagen ein ähnliches Verhalten aufzeigten, manifestierten sich in der zentralen Lage die Vorteile. Aufgrund der günstigen Lage mitten im Brennraum wird das Dieselpilotspray vergleichsweise schwach verweht und magert weniger ab. Dadurch ergibt sich ein, im Vergleich, kürzerer Zündverzug, was die Ausbildung von Zyklus-zu-Zyklus Schwankungen reduziert.

Die Vorabberechnung von unterschiedlichen Kolbenkonfigurationen in Kombination mit dem Serienzylinderkopf zeigen eine gute Übereinstimmung mit den im Nachhinein erfolgten experimentellen Untersuchungen am Einzylinder Forschungsmotor. Hingegen bei der Verwendung des zweiten Zylinderkopfes, der durch Maskierung der Einlassventiltaschen für einen erhöhten Drall im Brennraum sorgt, ist ein gegenläufiges Verhalten von Simulation und Experiment zu beobachten. Der Grund wird in der Vernachlässigung der Varianz bei der Tabellierung des Reaktionsmechanismus vermutet. Die Vernachlässigung erfolgte aufgrund der in Kapitel 9.2 erwähnten Speicherproblematik, welche eine Limitierung der Datenbankgröße erforderlich macht. Diese Problematik ist mit dem Softwareentwickler bereits diskutiert und soll in einem zukünftigen Update gelöst werden. Ohne diese Limitierung ergeben sich eine Reihe von Freiheiten in der Datenbankgestaltung. So werden die Untersuchungen einer Reihe weiterer Aspekte der Dual-Fuel-Verbrennung mittels Simulation möglich. Eine Option ist die Anwendung eines Emissionsmodells zur Bestimmung der Stickstoffoxidemissionen. Mit Wissen um

die Emissionen erhöht sich die Aussagefähigkeit der Simulationsergebnisse. Insbesondere die Stickstoffoxidemissionen sind eine der Hauptlimitierungen bei Schiffsdieselmotoren nach MARPOL Annex VI [40], die von der International Maritime Organization getroffen wurden und damit ein wichtiges Kriterium bei der Auslegung von Schiffsdieselmotoren sind. Ein weiterer Aspekt ist die Anwendung eines Klopfwahrscheinlichkeitsmodells. Auch dieses ist bereits in der Tabellierungssoftware implementiert, konnte jedoch auch aufgrund der weiteren Dimension in der Tabelle des Reaktionsmechanismus und dem damit verbundenen Anstieg des Speicherbedarfs in dieser Arbeit nicht angewandt werden. Die Untersuchung des Klopfens ist bei Dual-Fuel-Motoren ein wichtiges Themengebiet, da hierdurch die möglichen Betriebsgrenzen aufgezeigt werden können.

Die Implementierung der genannten Optimierungen ermöglichen, dass durch die hier präsentierte Herangehensweise ein prädiktives Werkzeug für die Dual-Fuel-Simulation zur Verfügung steht, mit dem selbst großvolumige Brennräume, wie sie in Schiffsdieselmotoren auftreten, abgebildet werden können.

Literaturverzeichnis

- [1] *AVL FIRE: General Gas Phase Reactions Module manual* .
- [2] Abramzon and Sirignana. Droplet Vaporization Model for Spray Combustion Calculations. *AIAA 26th Aerospace Sciences Meeting*, 1988.
- [3] Andree, Goryntsev, Theile, Henke, Schleef, Nocke, Tap, Buchholz, and Hassel. Numerical simulation of a large bore dual fuel marine engine using tabulated detailed reaction mechanisms. In *ASME 2019 Internal Combustion Engine Division Fall Technical Conference*.
- [4] Andree, Theile, Henke, Schleef, Cepelak, Nocke, Buchholz, and Hassel. Untersuchung der Dual Fuel Verbrennung für maritime Anwendungen durch Anwendung von 3D CFD und tabellierten Reaktionsmechanismen. Combustion Institue, german section.
- [5] Bakali, Dagaut, Pillier, Desgroux, Pauwels, Rida, and Meunier. Experimental and modeling study of the oxidation of natural gas in a premixed flame, shock tube, and jet-stirred reactor. *Combustion and Flame*, 137:109–128, 2004.
- [6] Blanquart and Pitsch. Thermochemical properties of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons (PAH) from G3MP2B3 calculations. *Journal of Physical Chemistry A*, pages 6510–6520, 2007.
- [7] W. Bohl. Technische Strömungslehre, 9. Auflage, Würzburg, 1991.
- [8] Boussinesq. *Théorie de l'écoulement tourbillonnant et tumultueux des liquides dans les lits rectilignes a grande section*. Gauthier-Villars et fils.

- [9] Bäuerle and Warnatz. Time-resolved investigation of hot spots in the end gas of an s. i. engine by means of 2-d double-pulse lif of formaldehyde. *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, 26:2619–2626, 1996.
- [10] Cheng and Oppenheim. Autoignition in methane-hydrogen mixtures. *Combustion and Flame*, 58:125–139, 1984.
- [11] Ciezki and Adomeit. Shock-tube investigation of self-ignition of n-heptane-air mixtures under engine relevant conditions. *Combustion and Flame*, 93:421–433, 1993.
- [12] Crossley, Dorko, Scheller, and Burcat. The effect of higher alkanes on the ignition of methane-oxygen-argon mixtures in shock waves. *Combustion and Flame*, 19:373–378, 1972.
- [13] Decan, Lucchini, D’Errico, and Verhelst. A Coupled Tabulated Kinetics and Flame Propagation Model for the Simulation of Fumigated Medium Speed Dual-Fuel Engines. Technical report, SAE Technical Paper, 2019.
- [14] Donini, Bastiaans, van Oijen, and de Goey. A 5-D implementation of FGM for the large eddy simulation of a stratified swirled flame with heat loss in a gas turbine combustor. *Flow, turbulence and combustion*, 98(3):887–922, 2017.
- [15] Eder, P. an Pirker, and Wimmer. Multidimensional Modeling of Injection an Combustion Phenomena in a Diesel Ignited Gas Engine. *SAE Technical Paper*, (2017-01-0559).
- [16] Eder, Ban, Pirker, Vujanovic, Priesching, and Wimmer. Development and Validation of 3D-CFD Injection and Combustion Models for Dual Fuel Combustion in Diesel Ignited Large Gas Engines. *energies*, (11).
- [17] Einstein. Die Grundlage der allgemeinen Relativitätstheorie. *Annalen der Physik*, 49:769–822, 1916.
- [18] Eubank, Rabinowitz, Gardiner, and Zellner. Shock-initiated ignition of natural gas-Air mixtures. *Symposium (International) on Combustion*, 18:1767–1774, 1981.
- [19] Ferziger and Peric. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer, 1 edition, 2008.

-
- [20] Frenklach and Bornside. Shock-initiated ignition in methane-propane mixtures. *Combustion and Flame*, 56:1–27, 1984.
- [21] Fröhlich. *Large Eddy Simulaton turbulenter Strömungen*. Teubner, 1 edition, 2006.
- [22] Gauthier, Davidson, and Hanson. Shock tube determination of ignition delay times in full-blend and surrogate fuel mixtures. *Combustion and Flame*, 139:300–311, 2004.
- [23] Gerlinger. *Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. Springer-Verlag, 2005.
- [24] Goy, Moran, and Thomas, editors. *Autoignition Characteristics of Gaseous Fuels at Representative Gas Turbine Conditions*. American Society of Mechanical Engineers, 2014.
- [25] Graf, Gronki, Schulz, Baritaud, Cherel, Duret, and Lavy. In-Cylinder Combustion Virtualisation in an Anti-Igniting Gasoline Engine using Fuel-Tracer- and Formaldehyde-LIF Imaging. *SAE Technical Paper 2001-01-1924*.
- [26] Griffiths, Halford-May, and Mohammed. Spontaneous ignition delays as a diagnostic of the propensity of alkanes to cause engine knock. *Combustion and Flame*, 111:327–337, 1997.
- [27] Gulder. SAE Paper 841000. In *West Coast International Meeting & Exposition*, 1984.
- [28] Harndorf. Vorlesungsskript Verbrennungskraftmaschinen 4, 2012.
- [29] Harrington and Smyth. Laser-induced fluorescence measurements of formaldehyde in a methane/air diffusion flame. *Chemical Physics Letters*, 202:196–202, 1993.
- [30] Helay, Curran, Dooley, Simmie, Kalitan, Petersen, and Bourque. Methane/Propane Mixture Oxidation at High Pressures and at High, Intermediate and Low Temperatures. *Combustion and Flame*, 155:451–461, 2008.
- [31] Henke, Andree, Buchholz, and Theile. Pilot Injection Strategies for Medium-speed Dual-fuel Engines. *MTZ Industrial*.

- [32] Henke, Buchholz, Schleef, Wolfgramm, Graumüller, Andree, and Fink. Pilot-Einspritzstrategien für mittelschnelllaufende Dual-Fuel-Motoren. *Proceedings 10. Dessauer Gasmotoren-Konferenz*, pages 111–124, 2017.
- [33] Henke, Schleef, Cepelak, Buchholz, Andree, and Theile, editors. *Investigation of the Dual-Fuel Combustion Process with Different Pilot Injector Positions*, number 364.
- [34] Herzler, Jerig, and Roth. Shock tube study of the ignition of lean n-heptane/air mixtures at intermediate temperatures and high pressures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30:1147–1153, 2005.
- [35] Higgin and Williams. A shock-tube investigation of the ignition of lean methane and n-butane mixtures with oxygen. *Symposium (International) on Combustion*, 12:579–590, 1969.
- [36] Hockett, Hampson, and Marchese. Development and Validation of a Reduced Chemical Kinetic Mechanism or Computational Fluid Dynamics Simulation of Natural Gas/Diesel Dual-Fuel Engines. *Energy and Fuels*, 30:2414–2427.
- [37] Homann. *Reaktionskinetik*. Steinkopff, 1975.
- [38] Huang and Bushe. Experimental and kinetic study of autoignition in methane/ethane/air and methane/propane/air mixtures under engine-relevant conditions. *Combustion and Flame*, 144:74–88, 2006.
- [39] Huang, Hill, Bushe, and Munshi. Shock initiated ignition in homogeneous methane-hydrogen-air mixtures at high pressure. *International Journal of Chemical Kinetics*, 38:221–233, 2006.
- [40] IMO. Prevention of Air Pollution from Ships. <http://www.imo.org/en/ourwork/environment/pollutionprevention/airpollution/pages/air-pollution.aspx>.
- [41] Jerzembeck, Peters, Pepiot-Desjardins, and Pitsch. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline: Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, pages 292–301, 2009.

-
- [42] Johannesson. NGVA Europe Position Paper: LNG, a Sustainable Fuel for all Transport Modes. 2014.
- [43] Joos. *Technische Verbrennung*. Springer.
- [44] Krishnan, Ravikumar, and Bhaskaran. Experimental and analytical studies on the ignition of methane-acetylene mixtures. *Combustion and Flame*, 49:41–50, 1983.
- [45] Krishnan and Srinivasan. Multi-zone modelling of partially premixed low-temperature combustion in pilot-ignited natural-gas engines. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part D: Journal of Automobile Engineering*, 224(12):1597–1622, 2010.
- [46] Lachaux and Musculus. In-cylinder unburned hydrocarbon visualization during low-temperature compression-ignition engine combustion using formaldehyde PLIF. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31:2921–2929, 2007.
- [47] Lakshminarayanan and Aghav. *Modelling diesel combustion*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [48] Lamoureux and Paillard. Natural gas ignition delay times behind reflected shock waves: Application to modelling and safety. *Shock Waves*, 13:57–68, 2003.
- [49] Laurien and Oertel. *Numerische Strömungsmechanik*, volume 5. Springer.
- [50] Lecheler. *Numerische Strömungsberechnung*. Vieweg+Teubner, 2 edition.
- [51] Li and Williams. A Reduced Reaction Mechanism for Predicting Knock in Dual-Fuel Engines. *SAE Technical Paper 2000-01-0957*.
- [52] Liu, Hewson, Chen, and Pitsch. Effects of strain rate on high-pressure nonpremixed n-heptane autoignition in counterflow. *Combustion and Flame*, 137:320–339, 2004.
- [53] Liu and Karim. A predictive Model for the Combustion process in Dual Fuel Engines. *SAE Technical Paper*, (952435).
- [54] Lu, Law, Yoo, and Chen. Dynamic Stiffness Removal for Direct Numerical Simulations. *Combustion and Flame*, 156:1542–1551, 2009.

- [55] Maas and Pope. Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. *Symposium (International) on Combustion*, 24:103–112.
- [56] Maghbouli, Saray, Shafee, and Ghafouri. Numerical study of combustion and emission characteristics of dual-fuel engines using 3D-CFD models coupled with chemical kinetics. *Fuel*, 106:98–105, 2013.
- [57] Malin, Kiesling, Redtenbacher, and Wimmer. Einfluss der Diesel-Piloteinspritzung auf die Verbrennung in Diesel-Gas Dual Fuel Motoren. In Tschöke and Marohn, editors, *10. Tagung 2016, Diesel- und Benzindirekteinspritzung*. Springer Vieweg.
- [58] E. Mancaruso, L. Sequino, B. M. Vaglieco, M. C. Cameretti, R. De Robbio, and R. Tuccillo. CFD Analysis of the Combustion Process in Dual-Fuel Diesel Engine. Technical report, SAE Technical Paper, 2018.
- [59] Mansha, Hassan, Saleemi, and Ghauri. Detailed Kinetic Mechanism of CNG Combustion in an IC Engine. *Advances in Chemical Engineering and Science*, 1:102–117, 2011.
- [60] McBride, Gordon, and Reno. Coefficients for Calculating Thermodynamic and Transport Properties of Individual Species. NASA Technical Memorandum 4513.
- [61] Mechanical and A. E. C. Research). Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, 2016.
- [62] Mehl, Pitz, Westbrook, and Curran. Kinetic Modeling of Gasoline Surrogate Components and Mixtures under Engine Conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33:193–200, 2011.
- [63] Merker and Teichmann. *Grundlagen Verbrennungsmotoren*, volume 9 of *ATZ/MTZ-Fachbuch*. Springer Vieweg.
- [64] Metcalfe, Burke, Ahmed, and Curran. A Hierarchial and Comparative Kinetic Modeling Study of C1-C2 Hydrocarbon an Oxygenated Fuels. *Wiley Online Library*.

-
- [65] Minetti, Carlier, Ribaucour, Therssen, and Sochet. A rapid compression machine investigation of oxidation and auto-ignition of n-Heptane: Measurements and modeling. *Combustion and Flame*, 102:298–309, 1995.
- [66] Najar. Numerische Analyse des Einflusses von Spritzlochgeometrien auf Gemischbildungsvorgänge bei mittelschnelllaufenden Schiffsdieselmotoren.
- [67] Najar, Fink, Pinkert, and Harndorf. Entwicklung eines anwendungsorientierten Modells zur Beschreibung der Kraftstoffstrahlausbreitung im Brennraum. *MTZ Motortechnische Zeitschrift*.
- [68] Najm, Paul, Mueller, and Wyckoff. On the Adequacy of Certain Experimental Observables as Measurements of Flame Burning Rate. *Combustion and Flame*, 113:312–332, 1998.
- [69] Neely, Sasaki, Huang, Leet, and Stewart. New Diesel Emission Control Strategy to Meet US Tier 2 Emissions Regulations. *SAE technical paper*.
- [70] O'Connor and Musculus. Optical Investigation of the Reduction of Unburned Hydrocarbons Using Close-Coupled Post Injections at LTC Conditions in a Heavy-Duty Diesel Engine. *SAE Int. J. Engines*, 6(1).
- [71] Patel, Kong, and Reitz. Development and Validation of a Reduced Reaction Mechanism for HCCI Engine Simulations. *SAE Technical Paper 2004-01-0558*, 2004.
- [72] Peng and Robinson. A new TWO-Constant Equation of State. *Industria and Engineering Chemistry Fundamentals*, 15(1).
- [73] Petersen, Hall, Smith, Vries, Amadio, and Crofton, editors. *Ignition of Lean Methane-Based Fuel Blends at Gas Turbine Pressures*, 2008.
- [74] Petersen, Kalitan, Simmons, Bourque, Curran, and Simmie. Methane/Propane oxidation at high pressures: Experimental and detailed chemical kinetic modeling. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31:447–454, 2007.
- [75] Pinkert. Experimentelle Analyse des Einflusses unkonventioneller Düsengeometrien auf den Gemischbildungsprozess mittelschnelllaufender Dieselmotoren.

- [76] Pitzer. Corresponding states of perfect liquids. *Journal of chemical physics*, 7:583–590.
- [77] Ranzi, Frassoldati, Grana, Cuoci, Faravelli, Kelley, and Law. Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 38:468–501, 2012.
- [78] R. Reitz et al. Modeling atomization processes in high-pressure vaporizing sprays. *Atomisation and Spray technology*, 3(4):309–337, 1987.
- [79] Reynolds. An Experimental Investigation of the Circumstances which determine whether the motion of water shall be direct sinuous, and of the law of resistance in parallel channels. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 174:935–982.
- [80] Ritzke, Andree, Theile, Henke, Schleef, Nocke, and Hassel. Simulation of a Dual-Fuel Large Marine Engines using combined 0/1-D and 3-D Approaches. In *Proceedings of the CIMAC Congress, Helsinki, Finland*, pages 6–10, 2016.
- [81] Schlichting and Gersten. *Grenzschicht-Theorie*. Springer, 10 edition.
- [82] Shen, Steinberg, Vanderover, and Oehlschlaeger. A Shock Tube Study of the Ignition of n-Heptane, n-Decane, n-Dodecane, and n-Tetradecane at Elevated Pressures. *Energy and Fuels*, 23:2482–2489, 2009.
- [83] Silke, Curran, and Simmie. The influence of fuel structure on combustion as demonstrated by the isomers of heptane: a rapid compression machine study. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30:2639–2647, 2005.
- [84] Smith, Golden, Frenklach, Moriarty, Eiteneer, Goldenberg, Bowman, Hanson, Song, Gardiner, Lissianski, and Qin. GriMech. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 2000.
- [85] Spadaccini and Colket. Ignition delay characteristics of methane fuels. *Progress in Energy and Combustion Science*, 20:431–460, 1994.
- [86] Stiesch. *Modelling Engine Spray and Combustion Processes*. Springer, 2003.

-
- [87] Sung, Li, and Law. Structure and Sooting Limits in Counterflow Methane/Air and Propane/Air Diffusion Flames from 1 to 5 Atmospheres. *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, pages 1523–1530, 1998.
- [88] Tanaka, Ayala, Keck, and Heywood. Two-stage ignition in HCCI combustion and HCCI control by fuels and additives. *Combustion and Flame*, 132:219–239, 2003.
- [89] Turns. *An Introduction to Combustion*. McGraw Hill, 2 edition.
- [90] van Oijen and de Goey. Modelling of Premixed Laminar Flames using Flamelet-Generated Manifolds. *Combustion Science and Technology*, 161:113–137.
- [91] Wang and et. al. USC Mech Version II. High-Temperature Combustion Reaction Model of H₂/CO/C₁-C₄ Compounds., 2007.
- [92] Warnatz, Maas, and Dibble. *Combustion*, volume 4. Springer.
- [93] Warnatz, Maas, and Dibble. *Verbrennung*, volume 3. Springer.
- [94] Weininger. SMILES, a Chemical Language and Information System. 1. Introduction to Methodology and Encoding Rules. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, Vol. 28, No. 1, 1988.
- [95] Wilcox. *Turbulence Modeling for CFD*. DCW Industries Inc., 2 edition.
- [96] Zellner, Niemitz, Warnatz, Gardiner, Eubank, and Simmier. Hydrocarbon induced acceleration of Methane-Air Ignition. *Progress in Astronautics and Aeronautics*, 88:252–272, 1983.

Erklärung

Ich erkläre, die Arbeit:

Numerische 3D-CFD-Simulation des Dual-Fuel-Brennverfahrens für maritime Anwendungen
unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen

selbstständig verfasst und keine anderen Hilfsmittel als angegeben verwendet zu haben.
Insbesondere wörtliche und sinngemäße Übernahmen aus anderen Werke kenntlich
gemacht zu haben. Teile diese Dissertation wurden vorab in den folgenden Publikationen
veröffentlicht: [3], [4], [31] und [80].