

Dissertation

Numerische Brennverfahrensauslegung von Großgasmotoren für unterschiedliche Kraftstoffe

zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der technischen Wissenschaften (Dr. techn.) unter der Leitung von

Prof. Dr. Thomas Lauer

Institut für Fahrzeugantriebe & Automobiltechnik
Technische Universität Wien

und (Zweitgutachter)

Prof. Dr. Friedrich Dinkelacker

Institut für Technische Verbrennung
Leibniz Universität Hannover

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für Maschinenwesen und Betriebswissenschaften

von

Dipl. -Ing. Werner E. E. Holly, B.Sc.

Matrikelnummer 0725453
Rainergasse 17/32, 1040 Wien

Danksagung

Mein Dank gilt Allen, die mich bei der Durchführung dieser Arbeit und während meiner Assistentenzeit unterstützt haben.

Herrn Prof. Dr. Geringer möchte ich für die Möglichkeit danken, als Projektassistent am Institut für Fahrzeugantriebe tätig gewesen zu sein. Besonders schätze ich, dass er jederzeit ein offenes Ohr hatte und seine unbürokratische und lösungsorientierte Herangehensweise bei diversen Problemen.

Als erster Gutachter möchte ich Herrn Prof. Dr. Lauer für die Bereitstellung des interessanten Themengebietes, die motivierenden Diskussionen und die detaillierte Korrektur dieser Arbeit danken.

Ebenfalls möchte ich mich bei Prof. Dr. Dinkelacker für seine Rolle als zweiter Gutachter, die Durchführung des lehrreichen Verbrennungsseminars und die konstruktiven und abwechslungsreichen Korrekturen an dieser Arbeit danken.

Weiters möchte ich mich bei den Mitarbeitern der Firma AVL bedanken, die mich mit ihrer Freundlichkeit, ihren Enthusiasmus und Kompetenz des Öfteren begeistert haben.

Ein großer Dank gilt auch meinen Kollegen am Institut, im speziellen dem Arbeitsbereich Simulation. Ohne die großartige Gemeinschaft und die hilfreichen und freundschaftlichen Interaktionen wäre die Durchführung dieser Arbeit um ein vielfaches zehrender gewesen.

Zu guter Letzt möchte ich meinen Eltern für die Unterstützung während meiner Ausbildung danken und für die Verlässlichkeit die sie mir zukommen ließen.

Kurzfassung

Die wesentlichen Faktoren, die den Betriebsbereich und damit eine weitere Wirkungsgradsteigerung von Großgasmotoren einschränken, sind die klopfende Verbrennung und die Stickoxidbildung. Diese Arbeit behandelt deshalb die Modellierung dieser Prozesse mittels Reaktionskinetik im Rahmen eines prädiktiven Ladungswechselmodells. Mithilfe dieses Modells wurde das Betriebsverhalten eines Großgasmotors untersucht und im Hinblick auf höchste Wirkungsgrade optimiert.

Um ein prädiktives 1D-Verbrennungsmodell für den Versuchsmotor abzuleiten, beschäftigt sich der erste Teil dieser Arbeit mit der detaillierten Untersuchung des Brennverfahrens. Dafür wurde einerseits eine 3D-LES-Berechnung mit 29 gefeuerten Zyklen durchgeführt. Aufgrund der hohen Modellierungstiefe konnte die Flammenausbreitung in der Vorkammer und im Zylinder sowie dessen zyklischen Schwankungen analysiert werden. Um die Sensitivität des Brennverfahrens gegenüber Betriebspunktvariationen zu bewerten, wurden andererseits Indizierdaten vom Motorprüfstand ausgewertet. Durch die Adaption eines bestehenden Verbrennungsmodells konnte der Brennverlauf von Gasmotoren mit Vorkammerzündkerze mit hoher Genauigkeit abgebildet werden. Des Weiteren zeigten die experimentellen Daten, dass eine klopfende Verbrennung vor allem bei Zyklen mit kurzer Zündverzugszeit eintritt. Um den Einsatz der Reaktionskinetik im Ladungswechselmodell zu ermöglichen, wurde ein Zyklusschwankungsmodell entwickelt und in das prädiktive Verbrennungsmodell implementiert. Die Selbstzündung des Endgases sowie die Stickoxidbildung wurden mit einem stochastischen Reaktormodell untersucht und dabei passende Reaktionsmechanismen validiert und reduziert. Diese wurden ebenfalls in das prädiktive Motormodell implementiert. Durch die Abbildung der geschwindigkeitsbestimmenden Elementarreaktionen konnte eine hohe Modellierungstiefe für die kinetisch kontrollierten Prozesse erreicht werden. Um den breiten Anwendungsbereich zu verdeutlichen, wurde das prädiktive Motormodell für unterschiedliche Kraftstoffmischungen und Betriebsparameter validiert.

Im letzten Teil der Arbeit wird das prädiktive Motormodell eingesetzt, um optimale Betriebspunkte in Abhängigkeit eines gegebenen Brenngases darzustellen. Dabei wurde eine systematische Variation der Miller-Steuerzeit und des Ladedrucks betrachtet. Es zeigte sich, dass hohe Ladedrücke und aggressive Miller-Strategien vorteilhaft für hohe Wirkungsgrade sind. Um den Wirkungsgrad für unterschiedliche Kraftstoffmischungen zu steigern, wurde das Motormodell mit einem Optimierungsalgorithmus gekoppelt. Betriebsgrößen wie die Miller-Steuerzeit, Ladedruck, Äquivalenzverhältnis, Zündzeitpunkt und das Verdichtungsverhältnis wurden variiert, um für unterschiedliche gesetzliche NO_x -Grenzwerte den optimalen klopfreien Betriebspunkt zu ermitteln. Die Optimierungen wurden für unterschiedliche Kraftstoffmischungen mit einer Methanzahl zwischen 100 und 43 durchgeführt. Des Weiteren wurde die Auswirkung von hohen Inert-Anteilen im Kraftstoff ermittelt.

Zukünftig soll der vorgestellte Ansatz den Entwicklungsprozess von neuen und noch effizienteren Großgasmotoren unterstützen und so einen Beitrag zu einer effizienteren Energieerzeugung leisten.

Abstract

The main limiting factors for the thermal efficiency of large gas engines are the knocking combustion and the nitric oxide emissions. The aim of the presented work is, therefore, to model these effects with reaction kinetic in the framework of a predictive 1D model. Consequently, the model was used to investigate the operating behaviour of the gas engine and to optimise the engines fuel consumption for different given fuel mixtures.

To obtain a predictive 1D combustion model, the first part of this thesis deals with a comprehensive investigation of the combustion process. The combustion of 29 consecutive cycles was simulated with a 3D LES approach and due to the high model depth, the flame propagation in the prechamber and cylinder including their cyclic variations could be observed. Afterwards, experimental test bench data were analysed in order to quantify the effect of varied operating parameter on the combustion process. Based on these investigations, a combustion model for gas engine application was adapted and modified. Therefore, the predictive 1D model was able to predict the heat release of the combustion for large gas engine with prechamber spark plug in good agreement with the test bench data.

Further, the cycle resolved measurements showed a strong correlation between the knocking combustion and the cyclic variations, which mainly comes from the flame kernel development. To enable the usage of reaction kinetic in the process simulation, a cyclic variation model was developed and implemented into the 1D combustion model.

The self-ignition of the unburned zone and the nitric oxide emissions were investigated with a stochastic reactor model and suitable reaction mechanisms were validated. Subsequently, the mechanisms were implemented into the predictive 1D engine model. The modelling of the rate-determining elementary reaction enabled a high model depth for the kinetic controlled processes. To show the wide scope, the 1D engine model was validated for different fuel mixtures and operating parameters.

The last part of this thesis concentrates on the analysis of the engines operating behaviour. Therefore, a systematic variation of the miller timing and load revealed, that early miller strategies and high loads are suitable for good thermal efficiencies. The process simulation software was further coupled with an optimisation algorithm in order to optimise the fuel consumption for different fuel mixtures. Operating parameters like the miller timing, boost pressure, equivalence ratio, spark timing and compression ratio were varied to explore the optimal none knocking operating point for different nitric oxide emission limits. The minimal fuel consumption for different fuel mixtures with a methane number between 100 and 43 was determined and the effect of high inert admixtures to the fuel will be shown.

In future, the presented numerical approach can support the development process of new large gas engines with even higher thermal efficiencies and therefore contribute to a sustainable energy production.

Nomenklatur

Abkürzungen

| | |
|-------------------------------|--|
| ACMAES | Active Covariance Matrix Adaption |
| BHKW | Blockheizkraftwerk |
| Btu | British thermal unit |
| C ₂ H ₆ | Summenformel für Ethan |
| CFD | Computational Fluid Dynamics |
| CH ₄ | Summenformel für Methan |
| CNG | Komprimiertes Erdgas (en: compressed natural gas) |
| Da | Damköhler-Zahl |
| DKFT | Dimensionslose Kennzahl der Flammentheorie |
| DNS | Direct numerical simulation |
| DOE | Design of Experiment |
| ECFM-3Z | 3-Zones Extended Coherent Flame Model |
| ES | Evolution Strategie |
| EVS | Einlassventil schließt |
| FFG | Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft |
| FSD | Flammenoberflächendichte (en: flame surface density) |
| GCA | Gas Exchange and Combustion Analysis Software |
| GuD | Gas-und-Dampf-Kombikraftwerk |
| HO ₂ | Hydroperoxyl-Radikal |
| Ka | Karlovitz-Zahl |
| KM | Kraftstoffmischung |
| KW | Kurbelwinkel |
| LES | Large Eddy Simulation |
| LNG | Flüssigerdgas (en: liquified natural gas) |
| MZ | Methanzahl |

| | |
|-----------------|--|
| NO _x | Summe der NO- und NO ₂ -Emission |
| OCGE | Open Chamber Gas Engine-Verbrennungsmodell |
| OH | Hydroxyl-Radikal |
| PC | Vorkammerzündkerze (en: prechamber) |
| PCSI | Prechamber Spark Ignited Gas Engine-Verbrennungsmodell |
| PSO | Partikelschwarmoptimierung |
| RANS | Reynolds-Averaged Navier-Stokes |
| RP | Verbrennungsfortschritt (en: reaction progress) |
| SCE | Einzylinder-Forschungsmotor (en: single-cylinder engine) |
| SRM | Stochastisches Reaktormodell |
| TA-Luft | Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft |
| TPA | Three Pressure Analysis |
| VSC | Vienna Scientific Cluster |
| WDF | Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion |
| ZOT | Oberer Totpunkt bei Zündung |

Formelzeichen

| | | |
|----------------------------|---|-------|
| $\sqrt[3]{V_c}$ | Charakteristische turbulente Längenskala im OCGE | mm |
| $C_1 - C_8$ | Zusätzliche Modellkonstanten für das OCGE | - |
| $C_{L1} - C_{L4}$ | Polynomkoeffizienten zur Approximation der laminaren Flammendicke | - |
| C_{ROHR} | Modellkonstante des OCGE für den Heizverlauf | - |
| $C_{S1} - C_{S4}$ | Polynomkoeffizienten zur Approximation der laminaren Flammengeschwindigkeit | - |
| C_{Tad1} - C_{Tad2} | Polynomkoeffizienten zur Approximation der adiabaten Flammentemperatur | - |
| $\frac{dQ_F}{d\alpha}$ | Wärmefreisetzung durch das OCGE-Modell | J/°KW |

| | | |
|----------------------|---|-------------------|
| $\frac{d\alpha}{dt}$ | Winkelgeschwindigkeit des Motors | 1/sec |
| H_u | Unterer Heizwert | J/kg |
| ID_{CAD} | Zündverzugszeit (Berechnungsgröße des OCGE) | °KW |
| L_F | Laminare Flammendicke | m |
| l_t | Integrales Längenmaß | m |
| $m_{F,av}$ | Verfügbare Kraftstoffmaße im Zylinder (Berechnungsgröße des OCGE) | g |
| $m_{F,f}$ | Kraftstoffmasse in der Flammenfront (Rechengröße des OCGE) | g |
| $m_{F,ub}$ | Unverbrannte Kraftstoffmaße im Zylinder (Berechnungsgröße des OCGE) | g |
| P_{MAX} | Spitzendruck | bar |
| P_{mi} | Indizierter Mitteldruck | bar |
| p_o | Referenzdruck (Berechnungsgröße des OCGE) | bar |
| P_T | Steigung von γ_{FC} bei einem Wert von 0.5 (Berechnungsgröße des OCGE) | - |
| r_{ff} | Radius der Flammenfront (Berechnungsgröße des OCGE) | mm |
| T_{ad} | Adiabate Flammentemperatur (ermittelt durch die Reaktionskinetik bei $T_u=900K$ und $p_c=100bar$) | K |
| T_o | Referenztemperatur (Berechnungsgröße des OCGE) | K |
| T_u | Temperatur der unverbrannten Zone | K |
| u' | Turbulente Schwankungsgeschwindigkeit | m/s |
| v_{lam} | Laminare Flammengeschwindigkeit (Berechnungsgröße des OCGE) | m/s |
| v_{turb} | Turbulente Flammengeschwindigkeit (Berechnungsgröße des OCGE) | m/s |
| ν_u | Kinematische Viskosität der unverbrannten Ladung | m ² /s |
| γ_{FC} | Gewichtungsfunktion des OCGE (Wertebereich zwischen 0 und 1) | - |
| $\eta_{indiziert}$ | Indizierter Wirkungsgrad | % |
| μ_T | Verbrennungsfortschritt, bei dem γ_{FC} einen Wert von 0.5 annimmt (Berechnungsgröße des OCGE) | - |
| BSFC | Effektiver spezifischer Kraftstoffverbrauch | g/(kW*h) |

| | | |
|---------------|--|--------------------------------|
| <i>COV</i> | Variationskoeffizient | % |
| MFB | Mass fraction burned (umgesetzte Kraftstoffmasse) | % |
| <i>p</i> | Zylinderdruck | bar |
| <i>s</i> | Flammendicke (Abstimmungsgröße des OCGE) | mm |
| <i>sl</i> | Laminare Flammengeschwindigkeit (ermittelt mittels Reaktionskinetik) | m/s |
| <i>tkE</i> | Spezifische turbulente kinetische Energie | m ² /s ² |
| ZZP | Zündzeitpunkt | KWnZOT |
| ε | Verdichtungsverhältnis | - |
| ϕ | Äquivalenzverhältnis | - |

Inhaltsverzeichnis

| | |
|--|-----------|
| 1. Einleitung | 1 |
| 1.1. <i>Motivation</i> | 1 |
| 1.2. <i>Einteilung von gasförmigen Kraftstoffen</i> | 3 |
| 2. Stand der Technik | 5 |
| 2.1. <i>Einteilung von Gasmotoren</i> | 6 |
| 2.2. <i>Thermodynamische Auslegung von Gasmotoren</i> | 8 |
| 2.3. <i>Numerische Brennverfahrenmodellierung</i> | 9 |
| 2.3.1. Allgemein | 9 |
| 2.3.2. 3D-CFD Ansätze | 11 |
| 2.3.3. 1D-Brennverfahrenmodellierungen von Großgasmotoren | 13 |
| 2.3.4. Modellansätze für zyklische Schwankungen | 15 |
| 3. Ziel der Forschungsaktivität | 18 |
| 4. Untersuchung des Brennverfahrens | 20 |
| 4.1. <i>Vergleich unterschiedlicher Zündkonzepte</i> | 20 |
| 4.2. <i>Analyse der Flammenausbreitung mittels CFD</i> | 23 |
| 4.2.1. Modellbeschreibung | 24 |
| 4.2.2. Vergleich zwischen LES- und RANS-Berechnung | 26 |
| 4.2.3. Untersuchung der zyklischen Schwankungen | 37 |
| 4.3. <i>Experimentelle Untersuchungen zum Brennverfahren</i> | 46 |
| 4.3.1. Einfluss der Betriebsparameter auf die Vorkammerverbrennung | 47 |
| 4.3.2. Einfluss der Betriebsparameter auf die Flammenausbreitung im Zylinder | 49 |
| 5. Prädiktives Ladungswechselmodell | 52 |
| 5.1. <i>Beschreibung des 1D-Motormodells</i> | 52 |
| 5.2. <i>Adaptionen am prädiktiven Verbrennungsmodell</i> | 54 |
| 5.2.1. Berechnung der laminaren Flamme und Implementierung ins Ladungswechselmodell | 57 |
| 5.3. <i>Validierung anhand experimenteller Ergebnisse</i> | 59 |
| 5.4. <i>Erweiterung für unterschiedliche Miller-Zyklen</i> | 61 |
| 6. Entwicklung des 0D-Zyklusschwankungsmodells | 64 |
| 6.1. <i>Experimentelle Untersuchungen der zyklischen Schwankungen</i> | 66 |
| 6.2. <i>Modellierung der zyklischen Schwankungen</i> | 68 |

| | | |
|------------|--|------------|
| 6.2.1. | Methodischer Ansatz | 68 |
| 6.2.2. | Ableiten der Eingangsparameter des Zyklusschwankungsmodells | 69 |
| 6.2.3. | Ableiten des Zyklusschwankungsmodells | 73 |
| 6.2.4. | Implementierung des Zyklusschwankungsmodells ins 1D- Motormodell | 76 |
| 6.3. | <i>Validierung anhand experimenteller Ergebnisse</i> | 77 |
| 7. | Modellierung der kinetisch kontrollierten Prozesse | 80 |
| 7.1. | <i>Methodik</i> | 80 |
| 7.2. | <i>Klopfende Verbrennung</i> | 80 |
| 7.2.1. | Wahl des Reaktionsmechanismus | 80 |
| 7.2.2. | Modellierung der klopfenden Verbrennung mit dem SRM | 81 |
| 7.2.3. | Implementierung der Reaktionskinetik in das 1D-Modell | 86 |
| 7.2.4. | Berechnung des Klopfverhaltens mit dem prädiktiven Motormodell | 89 |
| 7.3. | <i>Stickoxidbildung</i> | 90 |
| 7.3.1. | Analyse der Stickoxidbildung mittels SRM | 90 |
| 7.3.2. | Ableiten eines NO _x -Reaktionsmechanismus für den 2-Zonen Ansatz | 91 |
| 7.3.3. | Modellierung der Stickoxidbildung mit dem 1D-Modell | 95 |
| 8. | Analyse und Optimierung der thermodynamischen Motorauslegung | 97 |
| 8.1. | <i>Thermodynamische Untersuchung des Verbrennungsprozesses</i> | 98 |
| 8.2. | <i>Numerische Optimierung des Motorprozesses</i> | 107 |
| 8.2.1. | Optimierungsrandbedingungen | 109 |
| 8.2.2. | Ergebnisse der Optimierungsläufe | 110 |
| 9. | Zusammenfassung | 116 |
| 10. | Literaturverzeichnis | 119 |
| 11. | Anhang | 127 |
| 11.1. | <i>Polynomkoeffizienten für die laminare Flamme</i> | 127 |
| 11.2. | <i>Validierung des Zyklusschwankungsmodell anhand von vier Betriebspunkten</i> | 128 |
| 11.3. | <i>Reaktionsmechanismus für die Stickoxidbildung</i> | 128 |
| | Lebenslauf | 131 |

1. Einleitung

1.1. Motivation

Die steigenden anthropogenen Treibhausgasemissionen und der Klimawandel machen ein Umdenken in der Energieversorgung notwendig [1, 2]. Erdgas hat von allen fossilen Energieträgern den höchsten Wasserstoffanteil. Das hohe Wasserstoff-Kohlenstoff Verhältnis reduziert im Vergleich zu Schweröl die CO₂-Emissionen um zirka 25 % [3]. Durch die saubere Verbrennung von gasförmigen Kraftstoffen ist zudem der Schadstoffausstoß sehr gering. Deswegen stellen Erdgas und methanhaltige Kraftstoffe in vielen Bereichen eine sinnvolle Alternative zu Kohle, Diesel, Benzin oder Schweröl dar. Aus ökonomischem Gesichtspunkt ist Erdgas ebenfalls eine interessante Alternative, da sich insbesondere in Amerika aufgrund der Fracking Methode der Gaspreis in den letzten Jahren vom Ölpreis entkoppelt hat und seither deutlich unter diesem liegt, siehe Abbildung 1.

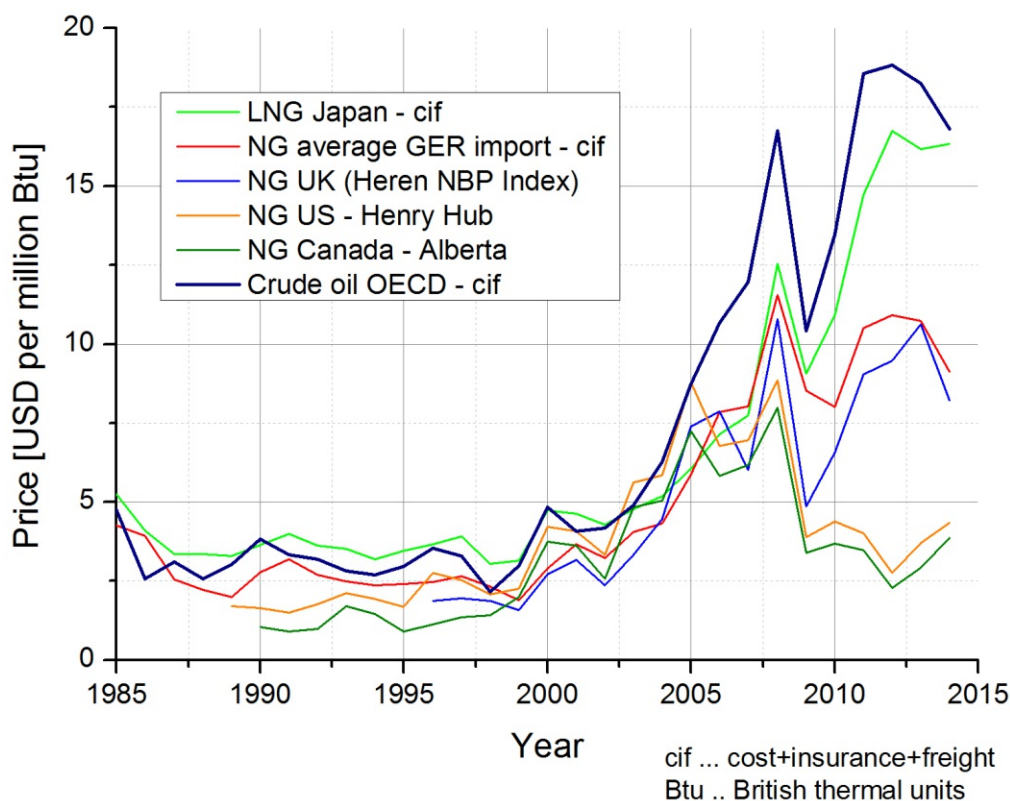
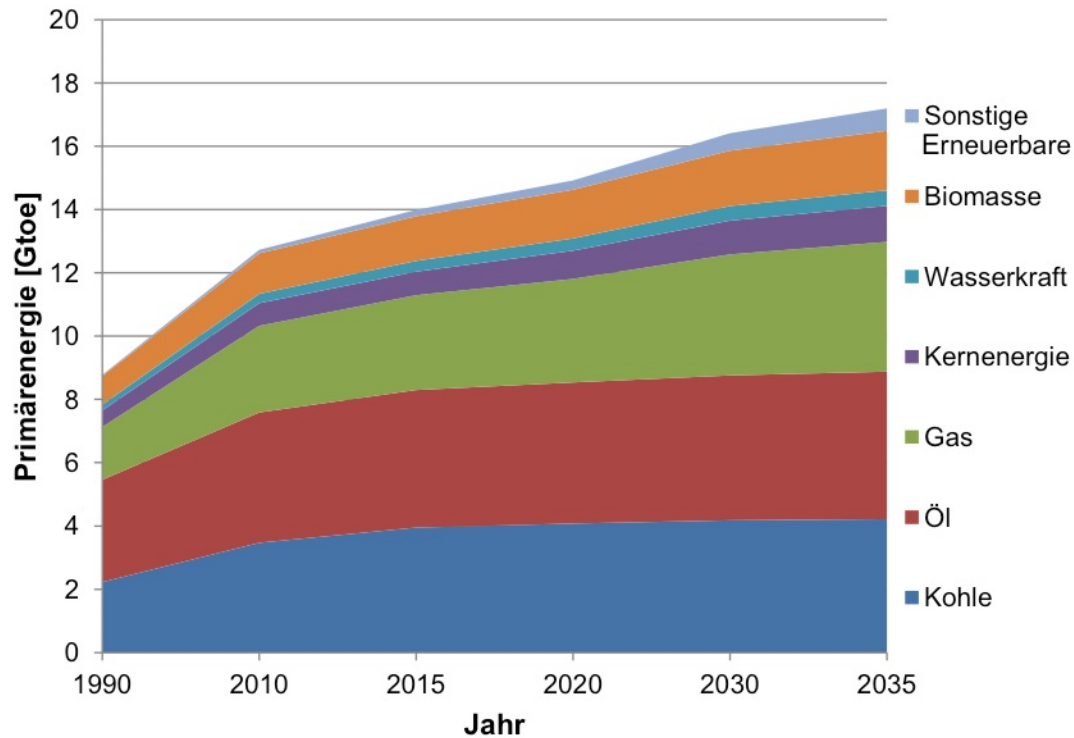


Abbildung 1: Entwicklung des Gaspreises im Vergleich zu Erdöl [4]

Auch zukünftig ist anzunehmen, dass der Gaspreis deutlich unter dem Ölpreis liegen wird. Zusammen mit der Versorgungssicherheit durch das bereits bestehende Erdgasnetz und die großen geologischen Reserven macht dieser Umstand Erdgas zu einem sehr attraktiven

Primärenergieträger [5, 6]. Dies zeigt sich auch in der Entwicklung des weltweiten Primärenergiebedarfs in [Abbildung 2](#). Neben Biomasse wird Erdgas das größte Wachstumspotenzial aller Energiequellen für die nächsten 20 Jahre zugeschrieben. Zu beachten ist weiters, dass ein großer Anteil von Biomasse in gasförmige Kraftstoffe umgewandelt werden kann.



[Abbildung 2](#): Weltweiter Primärenergiebedarf nach Energiequellen [7]

Für die Stromerzeugung aus gasförmigen Kraftstoffen stehen unterschiedliche Motorenkonzepte zur Verfügung, siehe [Abbildung 3](#). Gas-und-Dampf-Kombikraftwerke (GuD) erreichen dabei die höchsten Wirkungsgrade. Allerdings ist mit Blick auf den Leistungsbereich eine klare Abgrenzung zum Gasmotor gegeben. Mit einem Leistungsbereich von 100 KW bis 80 MW stellt der Gasmotor eine flexible Basis für die Verwertung von gasförmigen Kraftstoffen in Blockheizkraftwerke (BHKW) zur zentralen und dezentralen Energieversorgung oder als Notstromaggregat dar [8-10]. Zudem liegen die erreichbaren Wirkungsgrade von Gasmotoren deutlich über jenen von Gasturbinen mit ähnlicher Leistung.

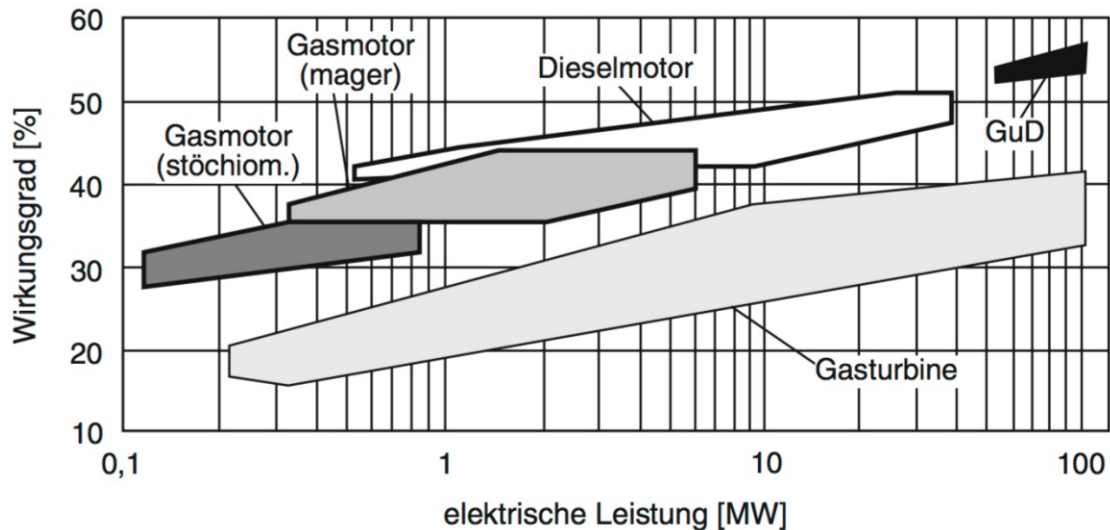


Abbildung 3: Wirkungsgrade und Leistungsbereiche verschiedener Motorkonzepte, Stand 2008 [11]

Der mobile Einsatz in PKWs, LKWs oder Lokomotiven ist ebenfalls möglich. In letzter Zeit findet der Gasmotor auch als Schiffsantrieb bei LNG-Tankern Anwendung oder kann als *Dual Fuel*-Variante den Schadstoffausstoß von Containerschiffen in Low-Emission-Areas reduzieren.

Großgasmotoren können mit einer großen Bandbreite an Gasen betrieben werden. Dazu zählen neben Erdgas und Synthesegasen auch Schwachgase aus Biomasse und Grubengas [12, 13]. Das folgende Kapitel gibt einen Überblick über verschiedene Brenngase und ihre Nutzung im stationären Gasmotor.

1.2. Einteilung von gasförmigen Kraftstoffen

Es gibt eine Reihe von unterschiedlichen Entstehungs- bzw. Produktionsmechanismen für gasförmige Kraftstoffe. Demzufolge schwankt die Zusammensetzung stark und es ergeben sich größere Unterschiede bei den chemischen und physikalischen Eigenschaften als bei flüssigen Kraftstoffen. Die Gasarten können nach van Basshuysen [14] in fossil, biologisch und technisch erzeugte Gase eingeteilt werden. Einen Überblick gibt Tabelle 1:

| | | CH ₄ | C ₂ H ₆ | C _x H _y | H ₂ | CO ₂ | CO | N ₂ | O ₂ |
|------------------|------------------------------|-----------------|-------------------------------|-------------------------------|----------------|-----------------|-------|----------------|----------------|
| Fossile Gase | Erdgas | 65-99 | 0-25 | 0-18 | - | 0-3 | - | 0-15 | - |
| | Erdölbegleitgas | 35-90 | 2-20 | 5-25 | 0-0.5 | 15-45 | - | 0-45 | 0-0.5 |
| | Grubengas | 25-50 | 0-1 | - | - | 0-3 | - | 30-65 | 9-12 |
| | Flüssiggas | - | - | 100 | - | - | - | - | - |
| Biologische Gase | Biogas | 45-70 | - | - | - | 25-40 | - | 1-12 | 0-3 |
| | Deponiegas | 40-60 | - | - | - | 30-40 | - | 5-20 | 0-4 |
| | Klärgas | 55-70 | - | - | - | 30-40 | - | - | 0-2 |
| Technische Gase | Stahlgas | 0-30 | - | 0-1 | 0-65 | 0-25 | 5-70 | 0-55 | 0-1 |
| | Gase aus Vergasungsprozessen | 0-12 | 0-4 | 0-6 | 12-45 | 0-25 | 12-45 | 0-60 | 0-3 |
| | Wasserstoff | - | - | - | 100 | - | - | - | - |

Tabelle 1: Einteilung von gasförmigen Kraftstoffen nach [14]; Angaben in Vol-%

Speziell biologisch erzeugte Gase der zweiten Generation bieten ein großes Potential für eine mittelfristige Energiewende [12]. Die stark variierenden Eigenschaften erschweren allerdings die Auslegung und den Betrieb des Gasmotors. Für die motorische Verbrennung sind die Klopfestigkeit und der Energieinhalt wichtige Eigenschaften. Die Klopfestigkeit wird durch die Methanzahl¹ (MZ) quantifiziert [15] und nimmt Werte zwischen null (Wasserstoff) und 155 an (Bsp. Deponiegas). Der Heizwert der unterschiedlichen Mischungen variiert zwischen 0.5 und 34 kWh/Nm³. Speziell der Einsatz von Schwachgasen und die schnelle Änderung der Gaszusammensetzung stellen große Ansprüche an das Brennverfahren [16]. Der Robustheit des Brennverfahrens und der optimalen Auslegung dessen kommt daher eine entscheidende Bedeutung zu.

¹ Methanzahlen zwischen null und 100 kennzeichnen eine Klopfestigkeit wie eine Referenzmischung aus Wasserstoff (0) und Methan (100). Für Mischungen mit höherer Klopfestigkeit werden Referenzmischungen aus Methan und Kohlendioxid herangezogen.

2. Stand der Technik

In den letzten 30 Jahren vollzog sich eine rasante Weiterentwicklung des Gasmotors. Startend von freisaugenden und stöchiometrisch betriebenen Motoren wurden Mitte der 80er-Jahre lediglich moderate Mitteldrücke und Wirkungsgrade erreicht, siehe [Abbildung 4](#). Die Verwendung von Schwachgasen war dabei nur bedingt realisierbar. Entwicklungsmeilensteine wie die Turboaufladung und das Mager-Brennverfahren ermöglichen heute eine Verdopplung der Leistung und gleichzeitig eine signifikante Steigerung des Wirkungsgrades.

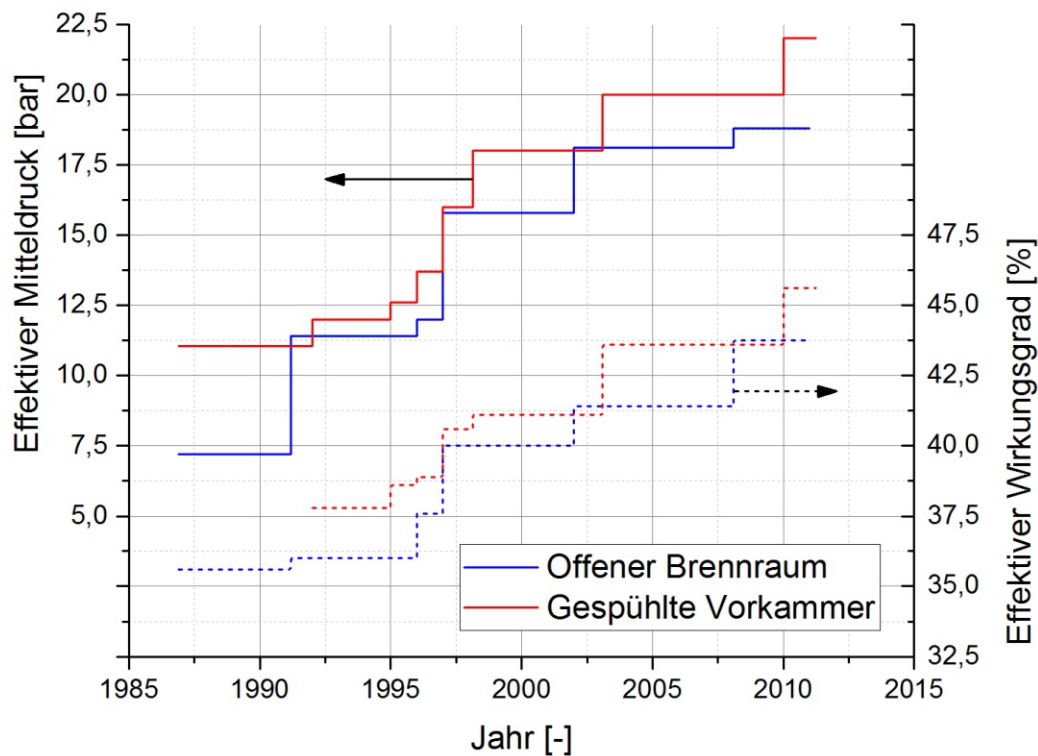


Abbildung 4: Entwicklung des Mitteldrucks und des Wirkungsgrades von Großgasmotoren über die letzten 30 Jahre [17]

Die starke Gemisch-Abmagerung lässt zudem den Einsatz von Schwachgasen zu [18]. Die Auswirkungen des kraftstoffarmen Gemisches auf den Motorbetrieb sind exemplarisch in [Abbildung 5](#) ersichtlich. Durch den geringen Kraftstoffanteil im Brennraum nimmt die Klopfneigung ab (rote Linie) und hohe Lasten können realisiert werden. Die gleichzeitige Abnahme der Spitzentemperatur führt zu einer Reduktion der Stickoxidemissionen (gelbe Linie). Dadurch weisen Großgasmotoren im Magerbetrieb niedrige Rohemissionen auf und kommen ohne Abgasnachbehandlung aus. Aufgrund des geringen Kohlenwasserstoffanteils ergeben sich beim Magerbrennverfahren günstigere kalorische Eigenschaften. Zusammen

mit geringeren Wandwärmeverlusten infolge reduzierter Spitzentemperaturen ergibt sich eine Steigerung des Wirkungsgrades (grüner Pfeil).

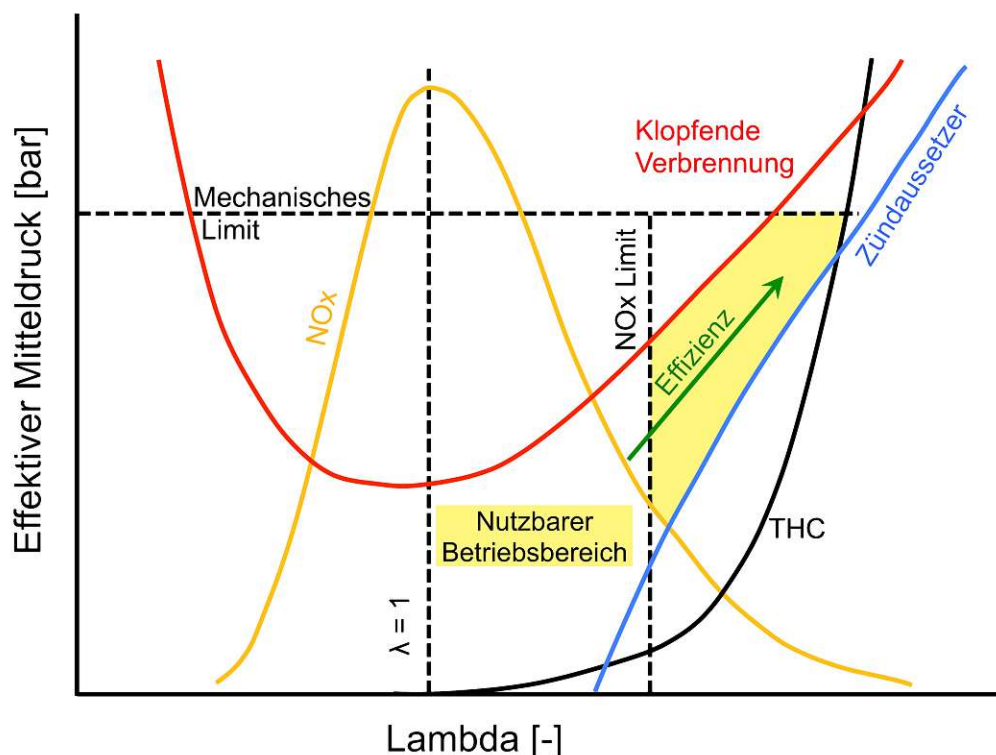


Abbildung 5: Betriebsbereich von Gasmotoren [19]

Dem gegenüber stehen steigende zyklische Schwankungen (blaue Linie) und unverbrannte Kohlenwasserstoffe (schwarze Linie). Die Grenze der Gemisch-Abmagerung ist letztendlich durch Zündaussetzer gegeben. Eine sorgfältige Applikation des optimalen Betriebspunktes ist für einen sauberen und effizienten Betrieb entscheidend. Durch konstruktive Maßnahmen am Zündkonzept kann die Stabilität des Brennverfahrens weiter gesteigert werden. Das folgende Kapitel zeigt in Abhängigkeit der Baugröße die sich im Einsatz befindlichen Zündkonzepte.

2.1. Einteilung von Gasmotoren

Der Gasmotor deckt heutzutage einen großen Einsatzbereich ab. Anhand der Baugröße und der Arbeitsdrehzahl gibt Tabelle 2 eine entsprechende Einteilung:

| | Drehzahl [min^{-1}] | Bohrung [mm] | Brennverfahren |
|----------------------|--------------------------------|--------------|-----------------------------|
| Kleine Schnellläufer | 1500-1800 | 100-145 | mager- oder stöchiometrisch |
| Große Schnellläufer | 1200-1800 | 155-200 | mager |
| Mittelläufer | 500-1000 | 200-510 | mager |
| Langsamläufer | 75-214 | 350-980 | mager |

Tabelle 2: Einteilung von Großgasmotoren nach Arbeitsdrehzahl [8]

Mit steigender Baugröße nimmt trotz sinkender Drehzahl die Leistung des Gasmotors zu. Abhängig von der Größe werden unterschiedliche Zündkonzepte angewendet, um die Abmagerungsgrenze zu erweitern. Abbildung 6 zeigt die drei verbreitetsten Brennverfahren:

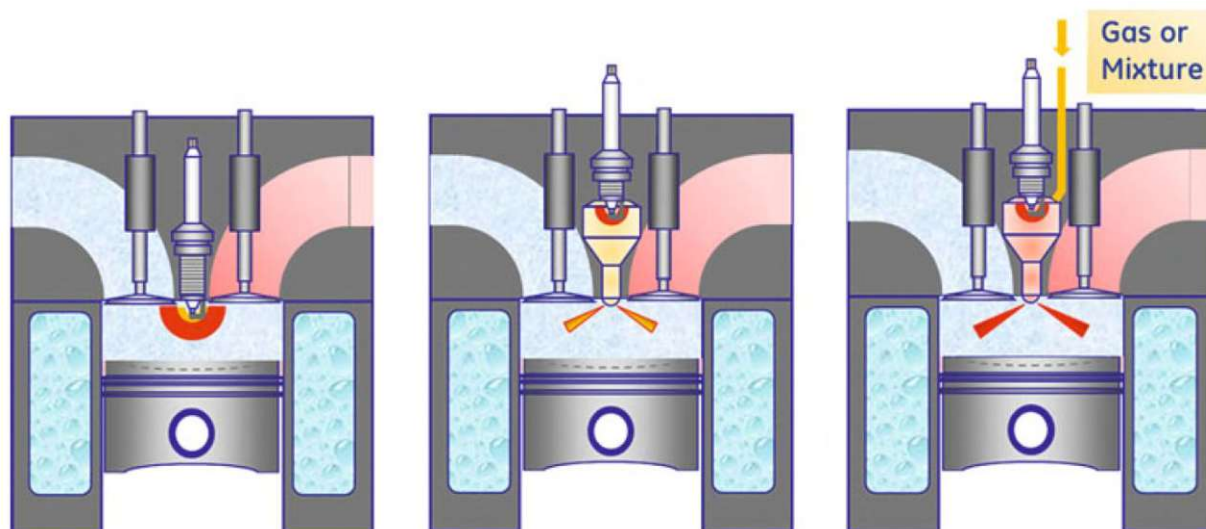


Abbildung 6: *Prinzipdarstellung von Brennverfahren mit offenem Brennraum (links), ungespülter Vorkammerzündkerze (Mitte) und gespülter Vorkammer (rechts) [14]*

Der Einsatz wird vorwiegend durch wirtschaftliche Gesichtspunkte geprägt. Die Investitionskosten für schnelllaufende Gasmotoren nehmen einen verhältnismäßig großen Anteil der Gesamtkosten ein, wodurch bei diesen Motoren auf die kostengünstigere direkte Zündung gesetzt wird. Bei mittel- und langsam laufenden Gasmotoren stehen hingegen die Betriebskosten im Mittelpunkt und die Mehrkosten werden somit für eine gespülte Vorkammer aufgewendet. Die Produktionskosten von Vorkammerzündkerzen sind vergleichbar mit denen einer direkten Zündung. Deswegen wird dieses Zündkonzept in jüngster Zeit vermehrt bei großen schnelllaufenden Gasmotoren eingesetzt.

Eine detaillierte Untersuchung der thermodynamischen Unterschiede dieser Zündkonzepte wird in Kapitel 4.1 diskutiert. Die Wahl des Zündkonzepts beeinflusst allerdings die Applikation des optimalen Betriebsbereichs. Die Abstimmung aller Entwicklungsparameter ist deswegen entscheidend. Aus diesem Grund geben die nächsten Kapitel einen Überblick über die wichtigsten Entwicklungsparameter und über das Vorgehen bei deren Auslegung.

2.2. Thermodynamische Auslegung von Gasmotoren

Moderne Technologien wie die Magerverbrennung, Hochenergie-Zündung-, Turboaufladung und Vorkammer-Brennkonzepete haben die Attraktivität des Gasmotors erheblich gesteigert. Allerdings führen sie auch zu großen Herausforderungen bei der Entwicklung und Auslegung einer neuen Gasmotoren-Baureihe. Die wichtigsten Parameter bei der Brennverfahrensentwicklung sind [17]:

- Ventilsteuerzeiten (Miller-Strategie)
- Verdichtungsverhältnis
- Aufladestrategie (ein- bzw. mehrstufige Aufladung)
- Zündzeitpunkt und Gemischzusammensetzung
- Ein- und Auslasskanalgeometrie (Strömungskoeffizienten)
- Zylinderinnenströmung (Drall- und Quetschströmung)
- Kolbengeometrie (Muldenkolben)
- Gemischbildung im Zylinder (Kanaleindüsung oder Direkteinblasung)
- Wahl des Hochenergie-Zündkonzepts
- Vorkammergeometrie und -material
- Gemischbildung in der Vorkammer
- Minimierung von Totvolumen im Brennraum

Für hohe Wirkungsgrade und gleichzeitig geringe Schadstoffemissionen ist eine optimale Wahl dieser Entwicklungsparameter notwendig. Diese optimale Wahl ist zusätzlich von der Kraftstoffzusammensetzung abhängig, wodurch sich ein extrem komplexer Entwicklungsprozess ergibt.

Um eine schnelle und kostengünstige Entwicklung durchzuführen, ist eine ausgereifte Entwicklungskette erforderlich. Typischerweise besteht sie aus drei Bausteinen [3, 17]: Relativ kostengünstige experimentelle Untersuchungen des Brennverfahrens können am Einzylinder-Versuchsmotor (*SCE*) durchgeführt werden. Dabei sind auch Variationen im Sinne einer *DOE* möglich, die den Entwicklungsparameterraum einschränken können. Die Ergebnisse der *SCE*-Analysen müssen anschließend am Vollmotor validiert werden. Zusätzlich sind Untersuchungen des Ladungswechsels, der Regelung und der Bauteilfestigkeit am Vollmotor möglich. Beide experimentellen Verfahren sind im Vergleich zu numerischen Untersuchungen allerdings kosten- und zeitintensiv. Deswegen hat die Simulation einen fixen Bestandteil im Entwicklungsprozess eingenommen [20].

Dabei werden sowohl dreidimensionale CFD-Simulationen als auch null- und eindimensionale Motorprozessrechnungen eingesetzt. Das Haupteinsatzgebiet der Ladungswechselrechnung ist die Vorooptimierung maßgeblicher Motorparameter (zum Bsp. Verdichtungsverhältnis, Steuerzeiten, etc.), um die Hardwarekonfigurationen für die *SCE*-Untersuchungen zu verringern. Daneben kann durch die eindimensionale Motorprozessrechnung sichergestellt werden, dass die Randbedingungen des Einzylinder-Versuchsmotors mit jenen des Vollmotors übereinstimmen. Für detaillierte Analysen des Brennverfahrens ist die CFD-Methodik erforderlich. Dabei können Optimierungen an der Gemischbildung und den Strömung bzw. Turbulenz bestimmenden Bauteilen vorgenommen werden. Allerdings ist die Anzahl an unterschiedlichen Konfigurationen bei der CFD-Simulation limitiert.

Um eine weitere Steigerung der Entwicklungsgeschwindigkeit zu erreichen, ist der breitere Einsatz der Simulation bei der Brennverfahrensentwicklung wünschenswert. Experimentelle Untersuchungen am *SCE* und am Vollmotor könnten damit auf ein Minimum reduziert werden. Der derzeitige Stand der Technik für die numerische Brennverfahrensentwicklung wird im Folgenden debattiert.

2.3. Numerische Brennverfahrensmodellierung

Wie im vorangegangenen Kapitel erläutert, besitzen numerische Entwicklungsmethoden in der Brennverfahrensentwicklung eine große Bedeutung. Seit der Jahrtausendwende wurden diesbezüglich große Fortschritte erzielt, wodurch die erzielbare Genauigkeit einen guten Standard annimmt. In diesem Kapitel wird eine Zusammenfassung über die Hintergründe von Brennverfahren gegeben und es wird auf den Stand der Technik in der numerischen Modellierung eingegangen. Daraus werden im Anschluss die Schwierigkeiten für den Anwendungsfall Großgasmotor erläutert und folglich Ansätze für dessen Weiterentwicklung vorgestellt.

2.3.1. Allgemein

Das Brennverfahren von Ottomotoren umfasst eine Vielzahl an Submechanismen, die sich über unterschiedliche Zeitskalen erstrecken [21], wodurch sich die hohe Komplexität der Modellierung ergibt.

Die Verbrennung wird durch eine externe Energiequelle eingeleitet und breitet sich anfänglich als laminare Flamme aus. Die Mechanismen hinter der laminaren Flamme sind einerseits die diffusive Wärmeleitung und andererseits die Hochtemperaturchemie in der

reaktiven Zone der laminaren Flamme [22, 23]. Durch die Wechselwirkung mit den Turbulenzwirbeln wird die Flammenoberfläche allmählich aufgefalted und gewellt. Die Zylinderinnenströmung und Turbulenz wird einerseits während des Ansaugtaktes gebildet, andererseits können auch Quetschströmung oder Einblasevorrichtungen gezielt eingesetzt werden. Diese turbulente Verbrennung ist makroskopisch weiterhin eine laminare Flamme, dessen reaktive Oberfläche durch die Faltung vergrößert wird und dadurch die Ausbreitungsgeschwindigkeit gesteigert wird. Die Faltung der Flamme wird durch die turbulenten Wirbel in der Strömung gesteuert, die sich über einen weiten Größenbereich erstrecken [24]. Dadurch ist die Wechselwirkung zwischen laminarer Flamme und Turbulenzwirbel modelltechnisch schwierig zu erfassen. Da diese turbulenten Wirbel weiters ein stochastisches Phänomen sind, unterscheidet sich das Strömungsfeld im Brennraum von Zyklus zu Zyklus. Besonders lokale Schwankungen im Bereich des Zündbereichs führen zu einer unterschiedlichen Flammenfrontentwicklung für jeden individuellen Zyklus und daher zu zyklischen Schwankungen.

Abgesehen von der eigentlichen Flammenausbreitung existieren zwei weitere kinetisch kontrollierte Mechanismen, die den Einsatzbereich des Brennverfahrens einschränken:

Durch die hohen Temperaturen und Drücke im Brennraum während der Verbrennung setzen im Endgas Reaktionen ein, die zu deren Selbstzündung führen. Durch die beinahe gleichzeitige Entzündung der gesamten unverbrannten Zone entstehen Druckwellen im Brennraum. Diese Druckwellen verursachen hohe lokale Drücke und können daher zu Bauteilschäden führen. Diese klopfende Verbrennung limitiert deshalb den maximalen Druck und (unverbrannte) Temperatur im Zylinder und damit die Effizienz des Brennverfahrens.

Die zweite Brennverfahrens-limitierung ist die Schadstoffbildung. Die wesentlichen Komponenten sind dabei Stickoxide, Ruß, Kohlenmonoxid und unverbrannte Kohlenwasserstoffe. Die genauen Entstehungsmechanismen unterscheiden sich für die einzelnen Komponenten und ihre Ausprägung hängt vom Motortyp bzw. vom Brennverfahren ab.

Eine möglichst umfassende Abbildung aller Mechanismen ist für eine detaillierte Simulation wünschenswert. Dies ist allerdings aufgrund der Komplexität nicht immer möglich. Dabei kann in Hinblick auf die Modellierungstiefe zwischen der 3D-CFD Simulation und der Ladungswechselrechnung unterschieden werden. Im Folgenden wird darauf näher eingegangen.

2.3.2. 3D-CFD Ansätze

Die möglichste umfassende Modellierung aller Phänomene eines Brennverfahrens ist das Ziel der 3D-CFD-Simulation. Eine vollständige Auflösung aller Turbulenzwirbel durch die Navier-Stokes Bilanzgleichungen wird als *Direct numerical simulation* (DNS) bezeichnet [24]. Diese Herangehensweise benötigt allerdings für praxisrelevante Ingenieursprobleme zu viel Rechenbedarf. Deshalb wurden unterschiedliche Vereinfachungen eingeführt, dessen unterschiedliche Vereinfachungen schematisch in Abbildung 7 dargestellt sind:

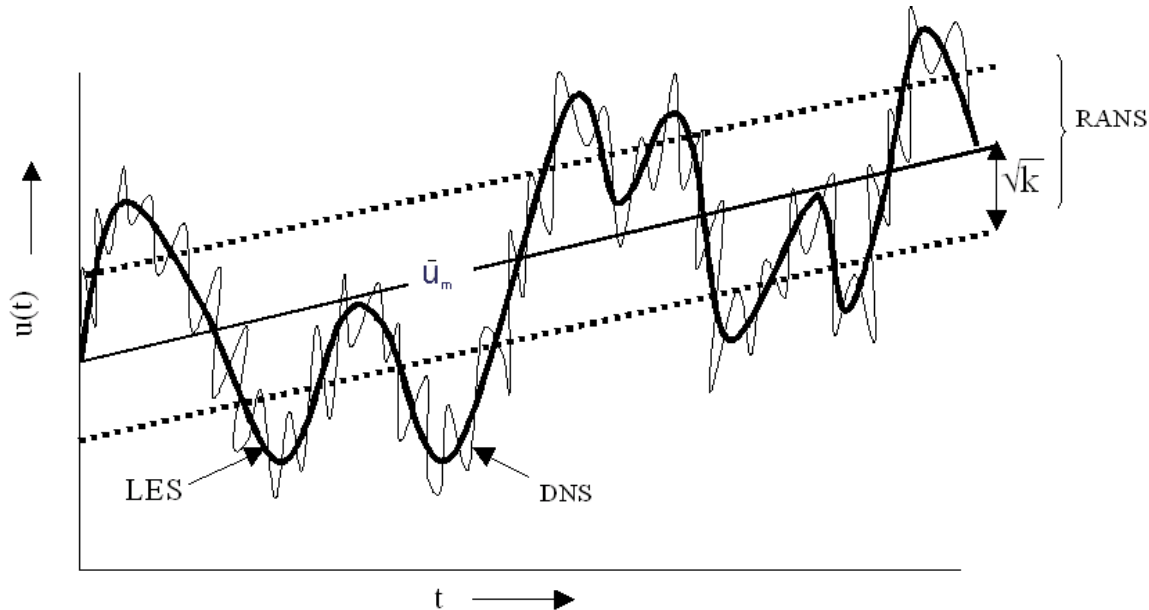


Abbildung 7: *Abbildung eines transienten lokalen Geschwindigkeitssignals einer turbulenten Strömung durch Direct numerical simulation (DNS), Large eddy simulation (LES) und Reynolds-gemittelte Lösung (RANS) [23]*

Für die Berechnung der Innzylinderströmung inkl. Verbrennung von Verbrennungsmotoren stellt die Large Eddy Simulation (LES) die realistisch umsetzbare Lösung mit der höchsten Modellierungstiefe dar. Bei ihr werden die Turbulenzwirbel, die größer als die räumliche Diskretisierung sind, direkt durch die Navier-Stokes Gleichungen aufgelöst. Dadurch können zyklische Schwankungen des ottomotorischen Brennverfahrens abgebildet werden. Die Turbulenzanteile mit einer Größenordnung kleiner der Zellgröße werden durch ein Turbulenzmodell abgebildet. Da diese kleinskaligen Turbulenzwirbel relativ problemunspezifisch sind, können sie mit guter Genauigkeit bereits mit einem einfachen algebraischen Submodell beschrieben werden.

Mehrere Beiträge in der Literatur behandeln die numerische Untersuchung des Brennverfahrens von PKW-Ottomotoren mit LES. Die ersten diesbezüglichen Untersuchungen konzentrierten sich auf das Strömungsfeld und deren Fluktuationen [25, 26]. Durch fundierte Validierung anhand optisch zugänglicher Versuchsmotoren konnte die

Numerik verbessert werden und eine gute Übereinstimmung des berechneten Strömungsfeldes inklusive Fluktuationen erreicht werden. Besonders die ausgeprägten Strömungsfluktuationen im Bereich der Zündkerze ließen wichtige Rückschlüsse auf die Entstehung der zyklischen Schwankungen zu. In weiterer Folge wurden auch LES-Untersuchungen inklusive Verbrennung durchgeführt [27-33]. Dabei zeigte sich, dass die LES die Verbrennung und deren Schwankungen zufriedenstellend abbilden kann. Es wurden dadurch neue Einblicke in die Flammenausbreitung gewonnen. Durch die Auflösung der zyklischen Schwankungen müssen allerdings mehrere Zyklen berechnet werden, um eine statistische Aussage über das Brennverfahren zu erhalten. Dadurch ist der Berechnungsaufwand der LES sehr groß und liegt in der Größenordnung von einigen 100.000 CPU-Stunden pro Betriebspunkt.

Aufgrund des deutlich geringeren Berechnungsaufwandes besitzt die RANS-Methodik im alltäglichen industriellen Entwicklungsprozess weiterhin die größte Verbreitung. Durch die Reynolds-Mittelung der Navier-Stokes-Gleichungen wird, wie in Abbildung 7 ersichtlich, eine gemittelte Lösung des Strömungsfeldes berechnet. Um den Einfluss der Turbulenz zu berücksichtigen, ist der Einsatz deutlich komplexerer Turbulenzmodelle notwendig. Informationen über die zyklischen Schwankungen können nicht mehr gewonnen werden. Stattdessen sind die Hauptaugenmerke dieser Simulationen die optimale Auslegung der Zylinderinnenströmung und Gemischbildung [34-36].

Aufgrund der besseren Genauigkeit und der gesteigerten Computerperformance ist allerdings damit zu rechnen, dass die LES in naher Zukunft auch in industrielle Entwicklungsprozesse verstärkt Einzug halten wird [37]. Das Einsatzgebiet könnte beispielsweise in einer sehr frühen Konzeptphase liegen, in der kaum oder nur wenige Versuchsträger für die Validierung zur Verfügung stehen und so die Unsicherheit von RANS-Simulation groß ist.

Wie bereits erläutert sind neben der Flammenausbreitung auch die kinetisch kontrollierten Prozesse für das Brennverfahren von Bedeutung. Diese können im Rahmen der CFD-Simulation räumlich abgebildet werden. Speziell die Klopfmodellierung besitzt eine große Bedeutung, da die Klopfneigung eines Brennverfahrens maßgeblich für die Effizienz des Brennverfahrens verantwortlich ist. Einfache Modelle wie das von Douaud [38] basieren auf einem empirischen Ansatz von Livengood [39], bei dem eine Arrhenius-Funktion für die Bruttoreaktion in Abhängigkeit von Druck und Temperatur integriert wird. Das Erreichen eines definierten Integralwertes kennzeichnet den Start der Selbstzündung. Diese Ansätze beschreiben allerdings die klopfende Verbrennung nur in einem sehr engen Betriebsbereich und nur für eine definierte Kraftstoffzusammensetzung [40]. Reaktionskinetische Ansätze

beschreiben alle Elementarreaktionen einer Selbstzündung und bieten daher eine deutlich gesteigerte Genauigkeit. Dies erlaubt einen weiteren Einsatzbereich. Da allerdings an der Selbstzündung hunderte chemische Spezies und tausende Elementarreaktionen beteiligt sind, ist dessen Berechnung relativ aufwendig. Im Rahmen einer CFD-Simulation müssten die Reaktionsgleichungen für jede Zelle gelöst werden und würde deshalb zu sehr langen Rechenzeiten führen. Deswegen werden reaktionskinetische Informationen in Abhängigkeit des thermodynamischen Zustandes, Reaktionsfortschritt und Zusammensetzung in Tabellen abgespeichert und während der CFD-Rechnung entsprechend ausgelesen [40]. Diese Ansätze wurden bereits erfolgreich in der Literatur angewendet. Im Rahmen einer LES kann dadurch ein extrem fundierter Einblick in die klopfende Verbrennung gewonnen werden. Robert [31] konnte auf diese Weise für eine Zündzeitpunktvariation das Klopfverhalten mit sehr guter Übereinstimmung zu experimentellen Daten abbilden und selbst die stochastische Natur des Klopfortes aufzeigen. Die tabulierten Reaktionsdaten können ebenfalls im Rahmen einer RANS-Simulation eingesetzt werden [41]. Da die CFD-Rechnungen allerdings keine Informationen über zyklische Schwankungen enthält, müssen zusätzliche Modelle eingeführt werden, um die Wahrscheinlichkeit einer klopfenden Verbrennung abzubilden. Zusammenfassend zeigt sich, dass die CFD-Simulation ein mächtiges Werkzeug ist, um die Brennverfahrensentwicklung zu unterstützen. Stellt sich allerdings die Fragestellung nach den optimalen Betriebsparametern für ein gegebenes Brennverfahren, stellt der hohe Rechenbedarf selbst von RANS-Simulationen eine extreme Herausforderung dar. Dafür sind 1D-Ladungswechselmodelle aufgrund ihrer kurzen Berechnungsdauer besser geeignet. Speziell für Großgasmotoren, bei denen ein optimaler Betriebspunkt für unterschiedliche Kraftstoffzusammensetzungen gesucht wird, ist dies von großer Bedeutung. In Kombination mit Optimierungsalgorithmen kann dadurch eine große Anzahl an Konfigurationen effizient durchsucht und eine zuverlässige Auswahl durchgeführt werden. Deswegen wird im nächsten Kapitel näher auf die Brennverfahrenmodellierung von Großgasmotoren im Rahmen der Ladungswechselrechnungen eingegangen.

2.3.3. 1D-Brennverfahrenmodellierungen von Großgasmotoren

Erste Aktivitäten für eine rechnergestützte Brennverfahrensauslegung mit 0/1D-Modellen wurde von Zitzler [13] auf Basis umfangreiche Untersuchungen am Motorenprüfstand durchgeführt. Dabei lag das Hauptaugenmerk vor allem auf dem Brennverhalten unterschiedlicher Gase. Diese Daten wurden durch ein Vibe-Verbrennungsmodell approximiert. Die Modellparameter wurden in Abhängigkeit der Betriebsparameter für

individuelle Gasmischungen gesetzt. Dadurch war eine erste, vereinfachte Vorausberechnung des Brennverlaufes möglich. Da die Effekte, die der Verbrennung zugrunde liegen nicht fundiert modelliert wurden, ist eine Extrapolation kaum möglich. Speziell unbekannte Gaszusammensetzung und Betriebsparametervariationen stellen eine Unsicherheit dar. Weiters ist die Anwendung auf unterschiedliche Motoren nicht gegeben und deshalb ist der breite Einsatz dieser Methodik während des Entwicklungsprozesses eines neuen Brennverfahrens nicht zielführend.

In letzter Zeit wurden prädiktive OD-Verbrennungsmodelle für stationäre Großgasmotoren entwickelt. Dabei wird üblicherweise zwischen offenen Brennräumen und Zündkonzepten mit gespülter Vorkammer unterschieden [42-44]. Teilweise wird bei diesen Verbrennungsmodellen versucht, die Brenncharakteristik unterschiedlicher Brenngase über die laminare Flammgeschwindigkeit abzubilden. Für Brennverfahren mit Vorkammerzündkerze existiert zurzeit kein dezidiertes Verbrennungsmodell. Deshalb wurde in [45] versucht, das fraktale Verbrennungsmodell [46] für Brennverfahren mit passiver Vorkammerzündkerze anzuwenden. Da dieses Verbrennungsmodell für den PKW-Ottomotor entwickelt wurde, ergaben sich Schwierigkeiten bei der ersten Verbrennungsphase und bei der wandnahen Verbrennung. Es besteht nach wie vor Forschungsbedarf bei prädiktiven Verbrennungsmodellen für stationäre Großgasmotoren mit Vorkammerzündkerze.

Neben der Flammenausbreitung besitzen die kinetisch kontrollierten Prozesse ebenfalls eine große Bedeutung für den Betriebsbereich. Für die Klopfmodellierung im Bereich der Ladungswechselrechnung werden heutzutage ebenfalls phänomenologische Modelle wie das von Douaud [38] eingesetzt. Beispiele können in [47-49] gefunden werden. Dabei wird auf Basis des mittleren Zyklus das Klopfverhalten über eine mittlere Reaktionsgeschwindigkeit beschrieben. Zu Grunde liegt eine vereinfachte Arrhenius-Beziehung für die Bruttoreaktion. Die Parameter der Arrhenius-Beziehung leiten sich aus empirischen Kraftstoffkenngrößen wie der Oktan- bzw. Methanzahl ab. Besagte empirischen Kraftstoffkenngrößen werden allerdings am CFR-Motor bei stöchiometrischen Bedingungen bestimmt und verlieren ihre Gültigkeit bei stark abgemagerter Verbrennung [50]. Weiters zeigte sich, dass hohe Inert-Beimischungen hierbei kritisch sind. Da bei der detaillierten Reaktionskinetik alle Elementarreaktionen der Selbstzündung berücksichtigt werden, ergibt sich eine deutlich höhere Modellierungstiefe. Dadurch ergibt sich eine hohe Genauigkeit sogar bei unterschiedlichen Betriebsbedingungen und Gemisch-Zusammensetzungen [51]. Da bei der klassischen Ladungswechselrechnung der Brennraum durch lediglich 2 Zonen diskretisiert wird, ist der Berechnungsaufwand gering und der Einsatz der Reaktionskinetik während der Simulation möglich. Für PKW-Anwendungen konnte in speziellen Reaktormodellen bereits die klopfende Verbrennung

mit Hilfe detaillierter Reaktionskinetik zyklus aufgelöst modelliert werden [52, 53]. Die Reaktionskinetik besitzt daher ein großes Potential für die zukünftige Klopfmodellierung. Speziell bei Großgasmotoren, die mit unterschiedlichen Kraftstoffen betrieben werden, ist dies eine entscheidende Genauigkeitsverbesserung. Allerdings ist für die Anwendung der Reaktionskinetik bei Großgasmotoren derzeit noch Forschungsbedarf vorhanden. Ein offener Punkt ist beispielsweise, dass schnell brennende Zyklen besonders anfällig für eine klopfende Verbrennung sind und deshalb diese Zyklen das Klopfverhalten bestimmen. Die Reaktionskinetik kann diese Unterschiede erfassen. Deshalb ist die Berechnung der klopfenden Verbrennung mittels Reaktionskinetik auf Basis des mittleren Zyklus, wie es beispielsweise in der klassischen Ladungswechselrechnung üblich ist, nicht zielführend. Folglich besteht die Notwendigkeit, die zyklischen Schwankungen durch zusätzliche Modelle und Ansätze in der Ladungswechselrechnung abzubilden.

2.3.4. Modellansätze für zyklische Schwankungen

Um zyklische Schwankungen zu modellieren, ist ein tiefgreifendes Verständnis über die Entstehungsmechanismen und deren Zusammenhänge notwendig. Zahlreiche Untersuchungen thematisierten in der Vergangenheit die zyklischen Schwankungen. Die Ursache der zyklischen Schwankungen der ottomotorischen Verbrennung können auf folgende Punkte zurückgeführt werden [54, 55]:

1. Variationen des Strömungsfeldes (speziell in der Nähe der Zündkerze)
2. Variationen der Turbulenzwirbel und deren Längenskalen
3. Variationen der Zylindermasse und der mittleren Zusammensetzung
4. Variationen der Gemischbildung und in der lokalen Kraftstoffverteilung
5. Variationen in der Zündung

Dabei sind die Auswirkungen dieser Effekte je nach Motortyp und Brennverfahren unterschiedlich. Wie bereits zuvor erwähnt, hat die Entwicklung des initialen Flammenkerns einen großen Einfluss auf die zyklischen Schwankungen. Speziell die Zusammensetzung, die Geschwindigkeitskomponenten und die Längenskalen der Turbulenzwirbel im Bereich der Zündkerze beeinflussen die Zündung und in weiterer Folge den gesamten Verbrennungsprozess [53]. 3D-CFD Untersuchungen mit LES-Turbulenzansatz helfen die Zusammenhänge zu verstehen und die einzelnen Effekte zu

bewerten. Wie bereits erwähnt sind diese Simulationen aufgrund des hohen Berechnungsaufwandes allerdings auf wenige Betriebspunkte limitiert.

Um zyklische Schwankungen im Rahmen eines 1D-Ladungswechselmodells zu modellieren, wurden einfachere Ansätze in der Vergangenheit entwickelt und eingesetzt [56-58]. Dabei werden charakteristische Modellkonstanten, beispielsweise jene für die Brenngeschwindigkeit und die Brennverzugszeit eines prädiktiven Verbrennungsmodell, in einem vom Anwender vorgegebenen Bereich stochastisch variiert oder zyklus aufgelöst die Wiebe-Parameter von einer multi-Zyklus TPA gewonnen. Da meistens mehrere Verbrennungsparameter als variable betrachtet wurden, ergibt sich ein mehrdimensionaler Raum von möglichen Parametervariationen. Folglich musste eine Vielzahl an Zyklen mit dem Ladungswechselmodell berechnet werden. Als Ergebnis konnte die Auswirkungen der zyklischen Schwankungen auf den Motorbetrieb und der Zusammenhang zwischen den Schwankungen unterschiedlicher Parameter ermittelt werden. Da der Variationsbereich der einzelnen Parameter vom Anwender passend gewählt werden muss, können diese Ansätze nicht für eine Vorausberechnung angewendet werden. Wenig [59] leitete einen empirisch Ansatz aus einer großen Anzahl von Messdaten von unterschiedlichen Motortypen ab. Dadurch ist dieses Zyklusschwankungsmodell prinzipiell in der Lage, die Variation der Brenndauer prädiktiv zu beschreiben. Die Schwankungen der ersten Verbrennungsphase sind bei diesem Zyklusschwankungsmodell nach wie vor ein Eingabe- bzw. Abstimmungsparameter.

Einen universelleren Ansatz verfolgte Lauer [60] auf Basis der 3D-CFD Simulation mit RANS-Ansatz. Durch Analyse des Strömungsfeldes wurde ein Ansatz entwickelt, der die Restgasverträglichkeit auf Basis dimensionsloser Kennzahlen der Flammentheorie beschreiben. Typische Kennzahlen der Flammentheorie sind die Karlovitz-Zahl (Ka) und die Damköhler-Zahl (Da) [22, 61, 62]. Diese Kennzahlen vergleichen die Längen- und Zeitskalen der laminaren Flamme mit denen der turbulenten Strömung, siehe Gl. (1) und Gl. (2).

$$Ka = \left(u'/S_L\right)^{3/2} \cdot \left(l_t/L_F\right)^{-1/2} \quad (1)$$

$$Da = \left(u'/S_L\right)^{-1} \cdot \left(l_t/L_F\right)^1 \quad (2)$$

Die Ergebnisse damit waren vielversprechend. Allerdings wurde dieser Ansatz noch nicht für Großgasmotore erweitert und die Implementierung in ein Ladungswechselmodell ist ebenfalls ausständig.

3. Ziel der Forschungsaktivität

Ziel der Forschungsaktivität ist die Entwicklung einer numerischen Methode, die eine Prozessoptimierung für Großgasmotoren in Abhängigkeit der Kraftstoffqualität zulässt. Anhand der umfangreichen Literaturrecherche zeigte sich, dass dieses Modell auf drei Bausteine aufbauen muss, die in Abbildung 8 zusammengefasst sind:

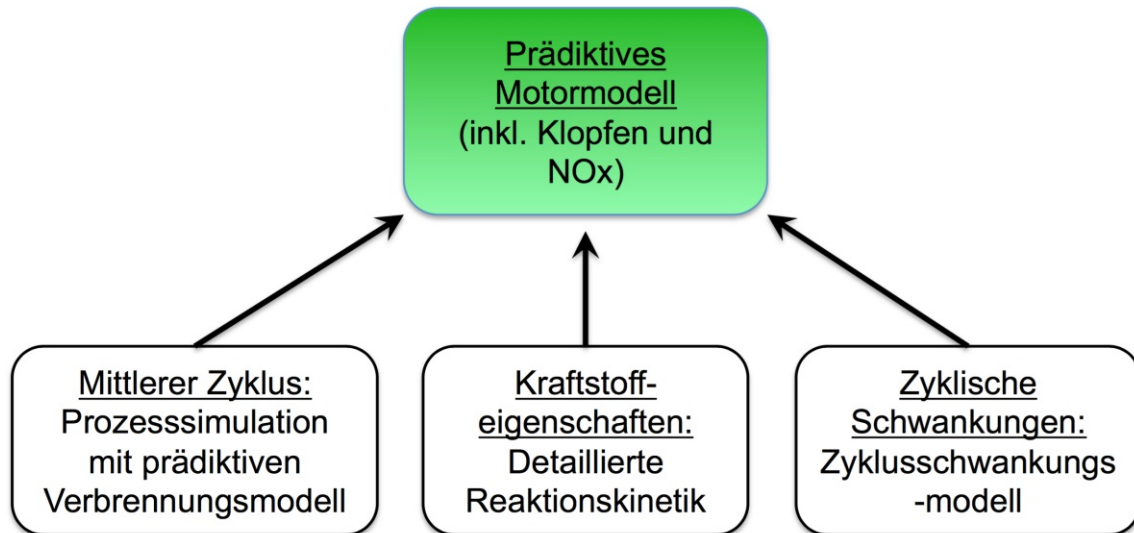


Abbildung 8: Bausteine eines prädiktiven Motormodells

Basis dieses Motormodells soll aufgrund der Rechenzeitanforderungen die Motorprozessrechnung sein. Dafür sind allerdings Adaptionen an bestehenden Verbrennungsmodellen notwendig, um eine hohe Abbildungsgenauigkeit für die komplexen Vorgänge in der Vorkammer und die Wechselwirkung mit dem Zylinder erreichen zu können. Speziell die Sensitivität auf unterschiedliche Kraftstoffeigenschaften stellt heutzutage eine Limitierung dar. Als Basis der Modellentwicklung soll das Brennverfahren eines Einzylinder-Versuchsmotors untersucht werden. Um die Flammenausbreitung im Brennraum auszuwerten, wird die CFD-Rechnung eingesetzt. Die Sensitivität des Brennverfahrens auf unterschiedliche Betriebsparameter wird danach durch die Auswertung von Indizierdaten untersucht. Basierend auf diesen Daten soll ein bestehendes 1D-Verbrennungsmodell modifiziert und an den Versuchsmotor adaptiert werden.

Weiters soll die Reaktionskinetik aufgrund ihrer detaillierten Abbildung der kinetisch kontrollierten Prozesse ein weiterer Bestandteil des prädiktiven Motormodells sein. Dafür werden auf Basis der zyklusaufgelösten Prüfstanddaten Reaktionsmechanismen für die klopfende Verbrennung und die Stickoxidbildung mit einem stochastischen Reaktormodell validiert.

Um die klopfende Verbrennung mit der Reaktionskinetik im Rahmen der Prozessrechnung zu modellieren, müssen schnell brennende Zyklen durch ein Zyklusschwankungsmodell

abgebildet werden. Die Entwicklung und Validierung dieses Zyklusschwankungsmodells und Implementierung in das prädiktive Motormodell stellt daher ein weiteres Ziel dar.

Mit Hilfe dieses prädiktiven Motormodells soll das Betriebsverhalten des Großgasmotors im Anschluss untersucht werden und erste Kenntnisse für eine mögliche Wirkungsgradsteigerung gewonnen werden. Um die numerische Auslegung zielgerichtet durchzuführen, soll im letzten Schritt die Ladungswechselsoftware mit einem Optimierungsalgorithmus gekoppelt werden. Ziel ist es, mit diesem numerischen Ansatz das Betriebsverhalten für unterschiedliche Kraftstoffmischungen zu optimieren. Dabei sollen die wichtigsten Betriebsparameter betrachtet und jene Betriebspunkte identifiziert werden, die höchste Wirkungsgrade bei Einhaltung internationaler Emissionsgrenzwerte ermöglichen.

4. Untersuchung des Brennverfahrens

Ziel dieser Arbeit ist die Entwicklung eines prädiktiven Motormodells auf Basis der Ladungswechselrechnung. Um die numerischen Modelle dahingehend weiter zu entwickeln, sind umfangreiche Beobachtungen am Motorprüfstand durchgeführt worden. Diese experimentellen Untersuchungen wurden im Rahmen des FFG-Projektes 815556 (Gasmotor der Zukunft) an einem Einzylinder-Versuchsmotor durchgeführt. Dieser Motor wurde bei der AVL List GmbH in Graz betrieben und weist die in Tabelle 3 angegebenen Spezifikationen auf. Er verfügt über einen Muldenkolben und die Variation des Verdichtungsverhältnisses wird durch unterschiedliche Muldentiefen realisiert.

| | |
|-------------------------|---------------|
| Bohrung | 170 mm |
| Hub | 210 mm |
| Verdichtungsverhältnis | 12.4 und 13.4 |
| Einlass Ventil Schließt | 520 KWnZOT |
| Drehzahl | 1500 1/min |
| Ventile pro Zylinder | 4 |

Tabelle 3: Spezifikationen des Versuchsmotors

Um ein homogenes Luft-Kraftstoffgemisch im Zylinder sicherzustellen, wurde der Kraftstoff mehrere Meter vor dem Einlasskanal eingedüst. Während der Versuche wurden zwei Kraftstoffmischungen untersucht. Diese bestehen grundsätzlich aus Grazer Erdgas mit unterschiedlichen Propan-Beimischungen. Die Zusammensetzung und die resultierende Methanzahl nach [15] ist in Tabelle 4 gegeben:

| MZ [-] | Methan [Vol-%] | Ethan [Vol-%] | Propan [Vol-%] |
|--------|----------------|---------------|----------------|
| 65 | 87.94 | 1.94 | 10.12 |
| 80 | 94.99 | 2.11 | 2.91 |

Tabelle 4: Zusammensetzung der untersuchten Kraftstoffmischungen

4.1. Vergleich unterschiedlicher Zündkonzepte

Bei dem verwendeten Versuchsmotor besteht die Möglichkeit, unterschiedliche Zündkonzepte zu verwenden. Dadurch konnten die Unterschiede im Brennverhalten der in [Abbildung 6](#) erwähnten Brennverfahren aufgezeigt werden. Bei diesen Untersuchungen wurde eine Kraftstoffmischung mit MZ 80 verwendet. Das Kraftstoff-Luftverhältnis wurde

entsprechend der NO_x -Emissionen nach *TA-Luft* gewählt. Die weiteren Eckdaten sind in Tabelle 5 ersichtlich.

| | ZZP [KW _n ZOT] | P _{mi} [bar] | Mahle- Index [-] | BSFC [g/(kW*h)] | ϕ [-] | COV P _{mi} [%] |
|---------------------------------|------------------------------|--------------------------|------------------------|--------------------|------------|----------------------------|
| Gespülte Vorkammer | -20 | 25.6 | 0.39 | 172 | 0.505 | 0.9 |
| Direkte Zündung ² | -28 | 23.6 | 0 | 182 | 0.578 | 3.2 |
| Vorkammer- zündkerze | -28 | 29.9 | 0 | 173 | 0.562 | 1.8 |

Tabelle 5: Betriebsparameter der untersuchten Brennverfahren

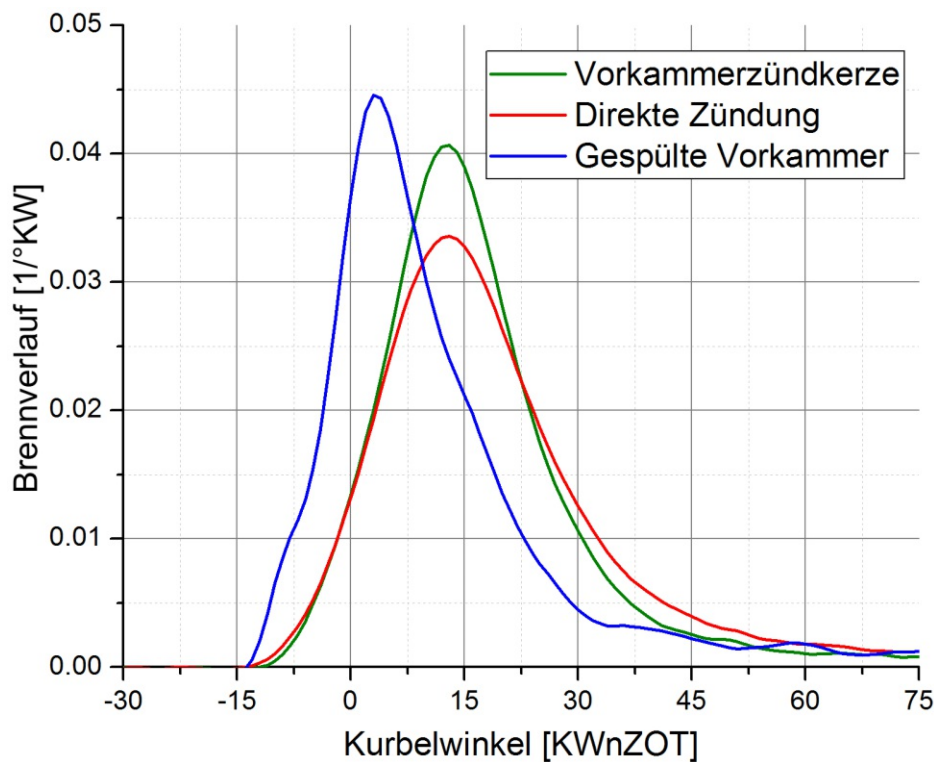
Der Brennverlauf sowie die zyklischen Schwankungen sind in [Abbildung 9](#) und [Abbildung 10](#) dargestellt. Die Erkenntnisse können wie folgt zusammengefasst werden:

- **Gespülte Vorkammer:** Durch das kraftstoffreiche Gemisch an der Zündquelle ergibt sich trotz des niedrigen globalen Äquivalenzverhältnis eine sichere Entzündung der Zylinderladung. Die vorteilhafte Turbulenzstruktur und die erhöhte Temperatur in der Vorkammer tragen weiter zu einer sehr schnellen ersten Verbrennungsphase bei. Um die Verbrennungsschwerpunktlage auf optimaler Stellung zu behalten, ist sogar eine deutliche Spätverstellung des Zündzeitpunktes (ZZP) im Vergleich zu den zwei anderen Zündkonzepten notwendig (siehe Tabelle 5). Weiters ergibt sich ein hohes Abmagerungspotenzial (siehe geringe zyklische Schwankungen des induzierten Mitteldruckes COV_{Pmi}). In [Abbildung 10](#) repräsentiert ein individueller Punkt den 10 % und 50 % Umsatzpunkt (MFB) eines individuellen Zyklus. Weiters ist die Normalverteilung beider Umsatzpunkte auf der Abszissen- bzw. Ordinatenachse dargestellt. Dabei bestätigt sich anhand des kleinen Streubereiches der blauen Punkte in [Abbildung 10](#), dass die gespülte Vorkammer zu geringen zyklischen Schwankungen führt.
- **Direkte Zündung:** Durch die direkte Zündung im Zylinder ist der Flammenkern während der ersten Verbrennungsphase den großen Strömungsstrukturen im Zylinder ausgesetzt [19, 21]. Dies führt zu einem langsamen Übergang von der quasi-laminaren zu einer voll turbulenten Flammenausbreitung und zu einer unerwünschten stochastischen Konvektion des Flammenkerns im Zylinder. Dadurch ergeben sich einerseits eine lange Brennverzugszeit und andererseits große zyklische

² Die direkte Zündung im Zylinder wurde durch eine Laserzündung realisiert.

Schwankungen. Bereits bei der untersuchten moderaten Abmagerung sind erste Anzeichen von Verbrennungsaussetzern erkennbar (rote Punkte in [Abbildung 10](#)).

- **Vorkammerzündkerze:** Diese ungespülte Vorkammer besitzt trotz einfacher und kostengünstiger Bauart die Vorteile einer gespülten Vorkammer. Durch die wirkungsvolle Abschirmung des Zündortes von der grobskaligen Zylinderinnenströmung und der erhöhten Temperatur weist es, im Vergleich zur direkten Zündung, eine stabile Entzündung auf. Dies ist unter anderem an der schmälern WDF des 10 % MFB-Punktes erkennbar. Deshalb besitzt dieses Brennverfahren eine höhere Abmagerungsfähigkeit. Die Ausbildung von Verbrennungsfackeln führt zu höheren Brennraten im Zylinder (vergleiche [Abbildung 9](#)), die wiederum die Stabilität der Verbrennung weiter steigern (siehe WDF der 50 % MFB in [Abbildung 10](#)).



[Abbildung 9:](#) *Brennverlauf für unterschiedliche Zündkonzepte*

Aufgrund des guten Kompromisses zwischen Systemkosten und Verbrennungsstabilität besitzt das Vorkammerzündkerzen-Konzept eine weite Verbreitung bei großen Schnellläufern [19]. Wegen der positiven Eigenschaften stellte dieses Zündkonzept die Basis für die weiteren Forschungsaktivitäten in dieser Arbeit dar.

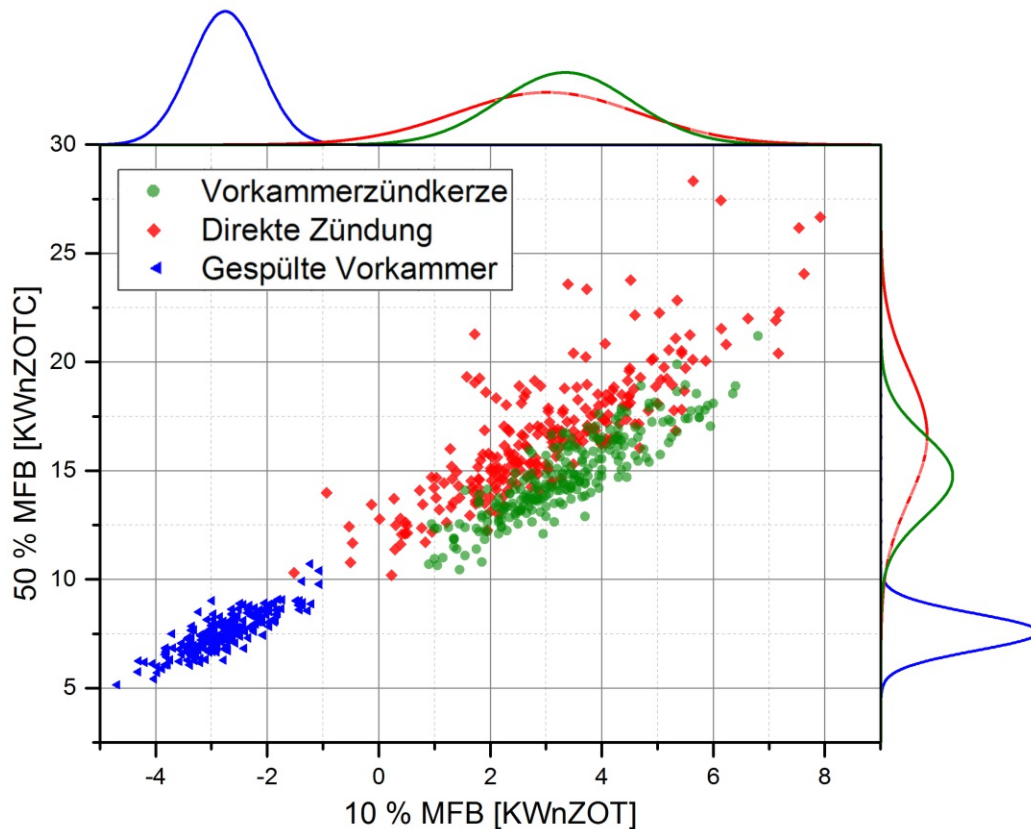


Abbildung 10: *Zyklische Schwankungen für unterschiedliche Brennverfahren anhand des 10 % und 50 % Umsatzpunktes (MFB); die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen an den Diagrammrändern geben die approximierten Gauß-Verteilungen der jeweiligen Datenpunkte wieder*

4.2. Analyse der Flammenausbreitung mittels CFD

Um einen detaillierten Einblick in den Verbrennungsablauf eines Gasmotors mit Vorkammerzündkerze zu bekommen, wurden 3D-CFD Simulationen eines typischen Betriebspunktes durchgeführt. Dieser weist einen absoluten Saugrohrdruck von 4 bar, einen Zündzeitpunkt von -28 °KWnZOT und ein Äquivalenzverhältnis von 0.55 auf. Die CFD-Untersuchungen ermöglichen weiters wichtige Rückschlüsse auf die Strömungsstruktur.

Um eine hohe Genauigkeit bei der Abbildung des komplexen Verbrennungsprozesses zu erreichen, wurde neben dem üblichen RANS-Turbulenzansatz auch eine *Large Eddy Simulation* (LES) durchgeführt, siehe Kapitel 2.3.2. Für PKW-Anwendungen gab es schon eine Reihe von LES-Untersuchungen, siehe Kapitel 2.3.4. Im Bereich des Großgasmotors gibt es dagegen keine LES-Untersuchungen. Speziell der Einsatz einer Vorkammerzündkerze erhöht die Komplexität und ein fundiertes Wissen über die Wechselwirkungen während der Verbrennung und deren zyklischen Schwankungen ist wünschenswert.

4.2.1. Modellbeschreibung

Die CFD-Untersuchungen wurden mit der kommerziellen Software *AVL FIRE v2013.2* durchgeführt [63]. Das Berechnungsnetz wurde mit dem *FAME Engine+* Vernetzer erstellt und ist für unterschiedliche Kurbelwinkelstellungen in Abbildung 11 ersichtlich. Um eine ausreichend feine räumliche Diskretisierung zu erreichen, wurde die Zellgröße mit 1.25 mm im Hauptbrennraum und mit 0.15 mm in der Vorkammerzündkerze gewählt. Die Grenzschicht wird durch drei Boundary-Layer diskretisiert, wobei die erste eine Dicke von 0.075 mm aufweist.

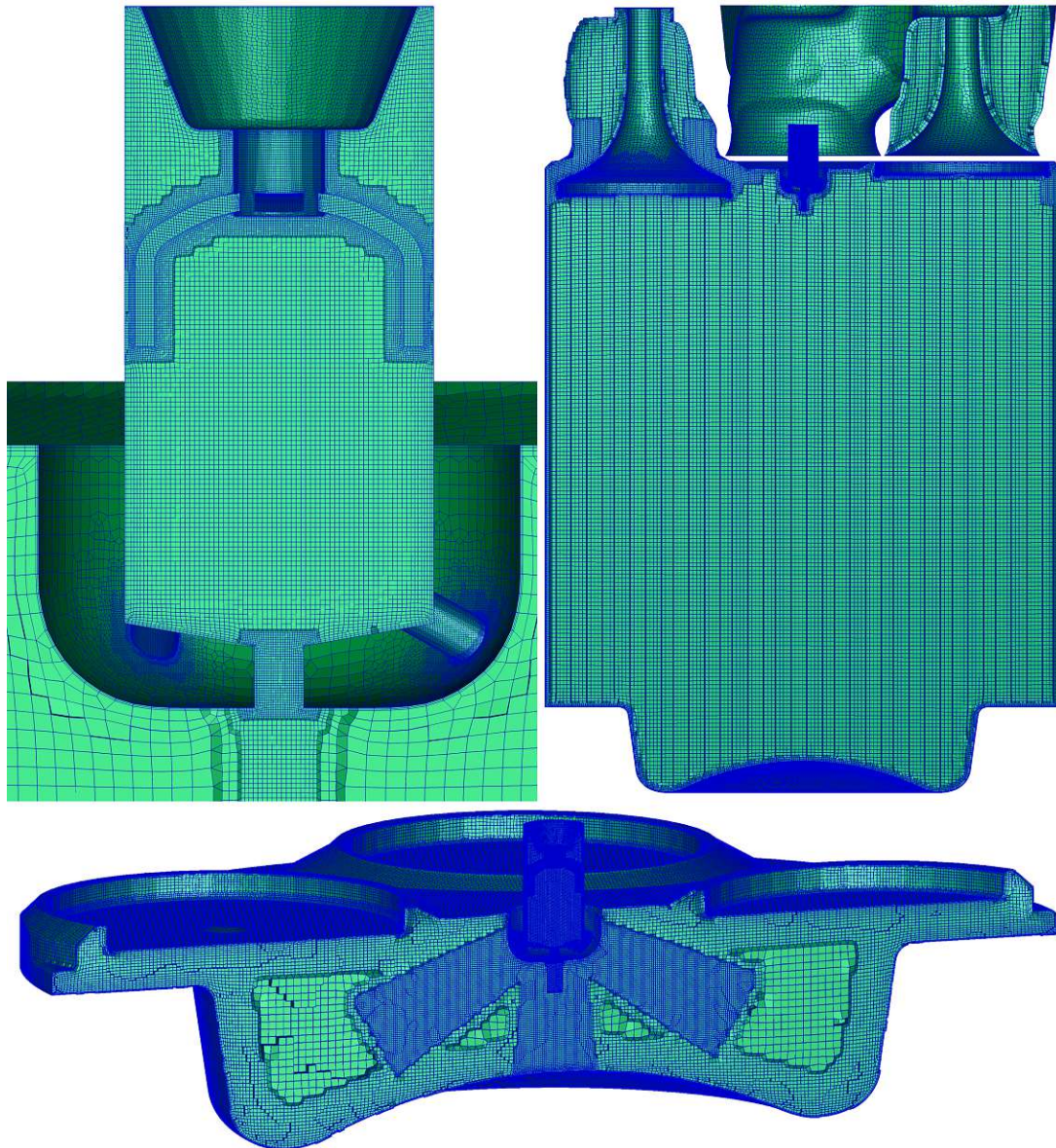


Abbildung 11: *Visualisierung des Berechnungsnetzes*

Um eine gute Berechnungsstabilität zu gewährleisten, wurden räumliche Netzverfeinerungen im Bereich der Ventilspalte (besonders während des Öffnens der

Auslassventile), der Zündelektroden und der fünf Übergangsbohrungen eingeführt. Während der Verbrennung sorgten die Verfeinerungen in Wandnähe und im Bereich des Fackelaustritts für eine genaue Diskretisierung der Strömung und Verbrennung. Die resultierende Zellenanzahl in Abhängigkeit der Kurbelwinkelstellung ist in [Abbildung 12](#) zu erkennen. Die Vorkammer weist eine Zellenanzahl von 1.2 Millionen auf.

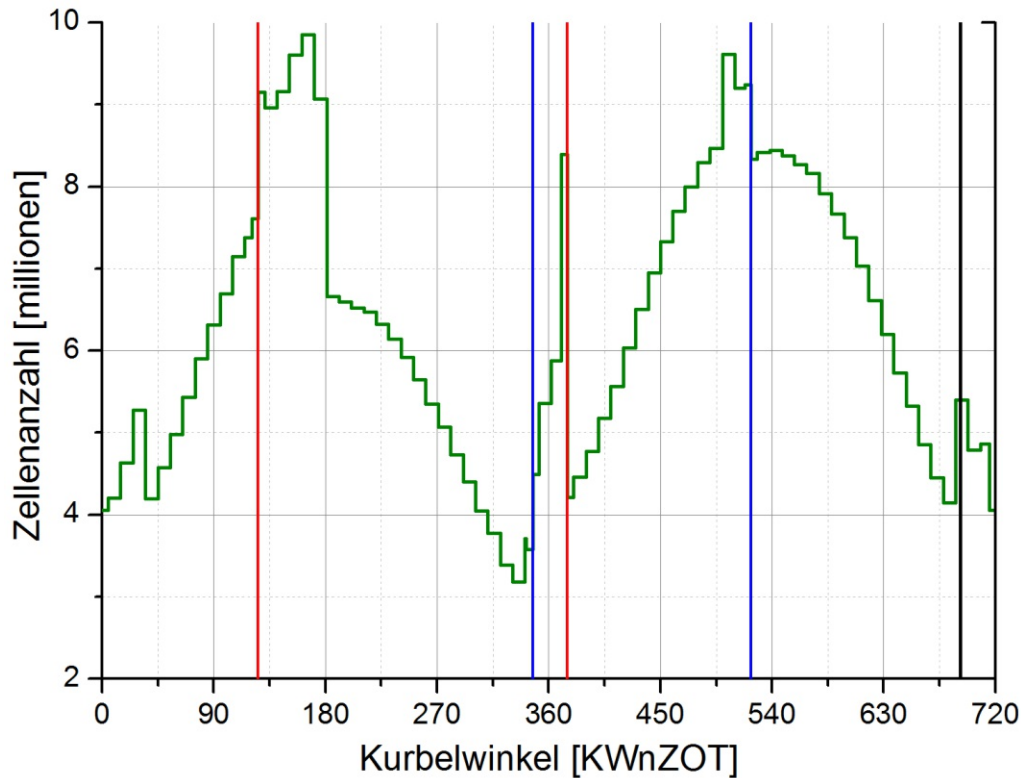


Abbildung 12: Verlauf der Zellenanzahl während eines Zyklus

Zwei unterschiedliche Turbulenzmodelle wurden für die Untersuchungen angewendet. Dabei löst das *LES-CSM*-Modell die großen Turbulenzwirbel durch die Navier-Stokes Gleichungen direkt auf [64, 65] und stellt einen detaillierteren und numerisch aufwändigeren Ansatz dar [23]. Das *k- ζ -f*-Modell basiert dagegen auf den weit verbreiteten RANS-Gleichungen und benötigt zusätzliche Differenzialgleichungen, um die turbulenten Schwankungsgrößen zu modellieren [24, 66].

Die Zeitschrittweite wurde für beide Ansätze über den gesamten Kurbelwinkelbereich konstant mit 0.1 KW° gewählt. Für die Impulsgleichungen wurde das „*Central Differencing*“-Schema verwendet, wohingegen für die restlichen Bilanzgleichungen das „*MINMOD Relaxed*“-Differenzenschema angewendet wurde. Beide Differenzenschemen gewährleisteten eine 2. Ordnung Genauigkeit. Um eine schnelle Konvergenz der Druckgleichung zu gewährleisten, wurde das sogenannte *SIMPLE/PISO*-Verfahren genutzt, das im Vergleich zum normalen *SIMPLE*-Verfahren eine modifizierte zweite

Druckkorrektur aufweist [63]. Der Kraftstoff wurde mit reinem Methan approximiert und die laminare Flammgeschwindigkeit über die integrierte *Database* ermittelt. Detaillierte Informationen zu den Modellen können in der *AVL FIRE*-Dokumentation gefunden werden [63].

Aufgrund von möglichen Initialisierungsfehlern wird bei der LES-Rechnung der erste Zyklus für die Auswertungen nicht herangezogen. In der folgenden Notation wird der darauffolgende Zyklus als Erster bezeichnet. Dadurch standen insgesamt 29 aufeinanderfolgende Zyklen für die Untersuchungen zur Verfügung. Da der Brennverlauf dieses ersten Zyklus bereits eine gute Mittelung aller berechneten LES Zyklen darstellt, wird er zum Vergleich zu den RANS-Ergebnissen herangezogen. Da die Berechnung eines ensemble-gemittelten Zyklus für die RANS-Methode ausreichend ist, wurde für diesen Turbulenzansatz nur ein Zyklus berechnet. Die Simulationen wurden am *Vienna Scientific Cluster 3* (VSC3) auf 256 CPUs durchgeführt. Dabei ergab sich eine Rechenzeit von 2 Tagen und 17 Stunden pro Zyklus.

4.2.2. Vergleich zwischen LES- und RANS-Berechnung

4.2.2.1. Strömungsfeld und Turbulenz

Da in diesem Kapitel das Augenmerk auf der Strömung liegt, wurde für beide Turbulenzansätze ein geschleppter Zyklus betrachtet. Dadurch werden Einflüsse infolge einer unterschiedlichen Verbrennung auf das Strömungsfeld vermieden. Es wird im Fall der LES-Rechnung wieder auf den ersten Zyklus zurückgegriffen, allerdings wurde dieser kurz vor ZZP ohne Verbrennung neu gestartet. In den folgenden Kapiteln wird gezeigt, dass dieser erste Zyklus ebenfalls eine gute Mittelung der charakteristischen Strömungsgrößen ist.

Die [Abbildung 13](#) und [Abbildung 14](#) zeigen das berechnete Geschwindigkeitsfeld für beide Turbulenzansätze. Die aufgelösten Turbulenzwirbel sind bei den LES-Ergebnissen deutlich erkennbar. Dadurch ist ein Einblick in die stochastische Natur der turbulenten Strömung möglich. Speziell die Strömungsablösung an den Einlasskanälen ist eine Quelle für die Wirbelbildung. Entsprechend der Reynolds-Mittelung ist das Fehlen der turbulenten Wirbel der offensichtlichste Unterschied zwischen beiden Ansätzen. Allerdings werden die globalen Strömungsstrukturen wie die ausgeprägte Drallströmung im Zylinder und der Vorkammer beziehungsweise die Einlassjets bei 450 KW° durch den RANS-Ansatz ähnlich wiedergegeben.

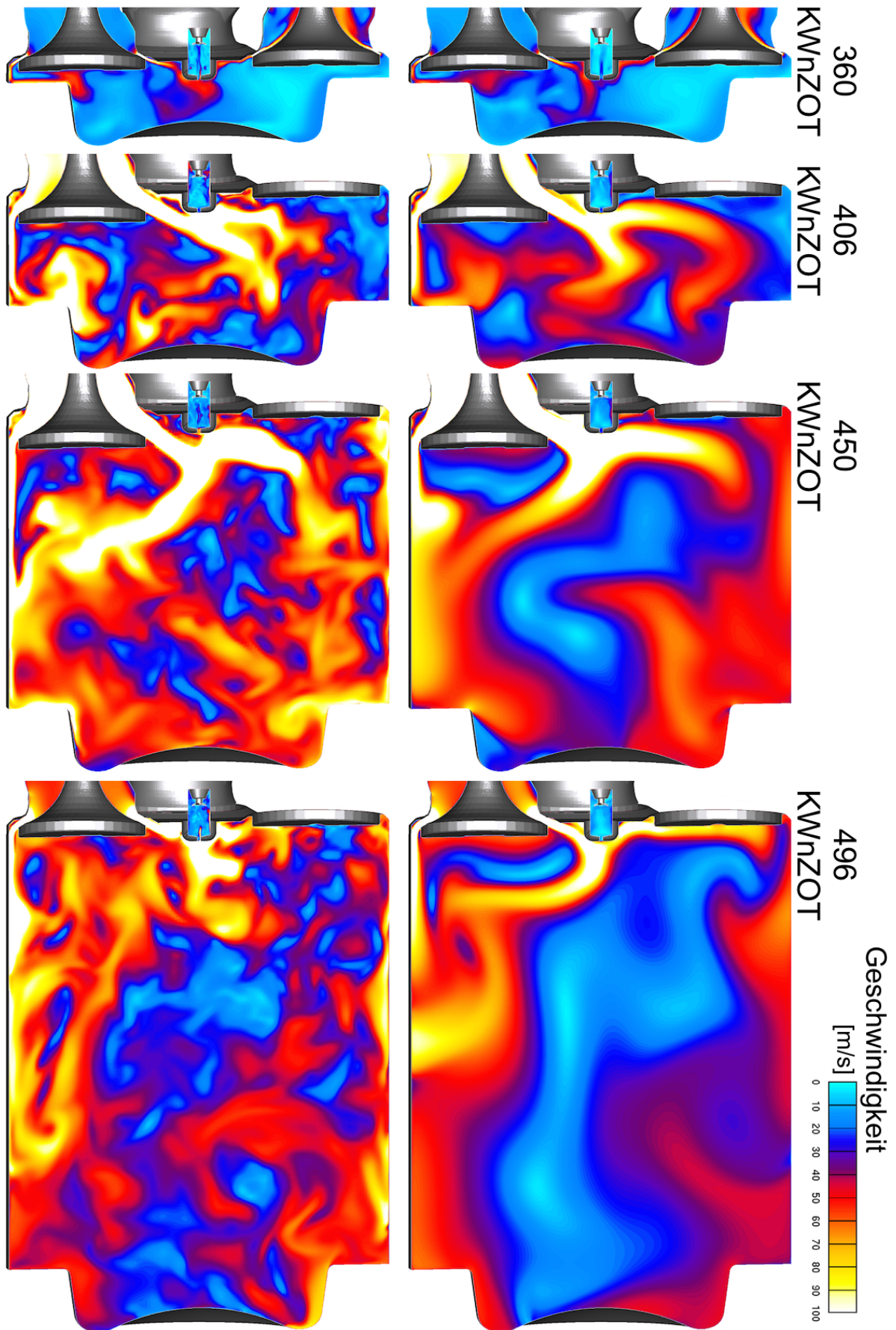


Abbildung 13: Geschwindigkeitsfeld im Zylinder während des Ansaugtaktes; ermittelt mit LES (links) und RANS (rechts)

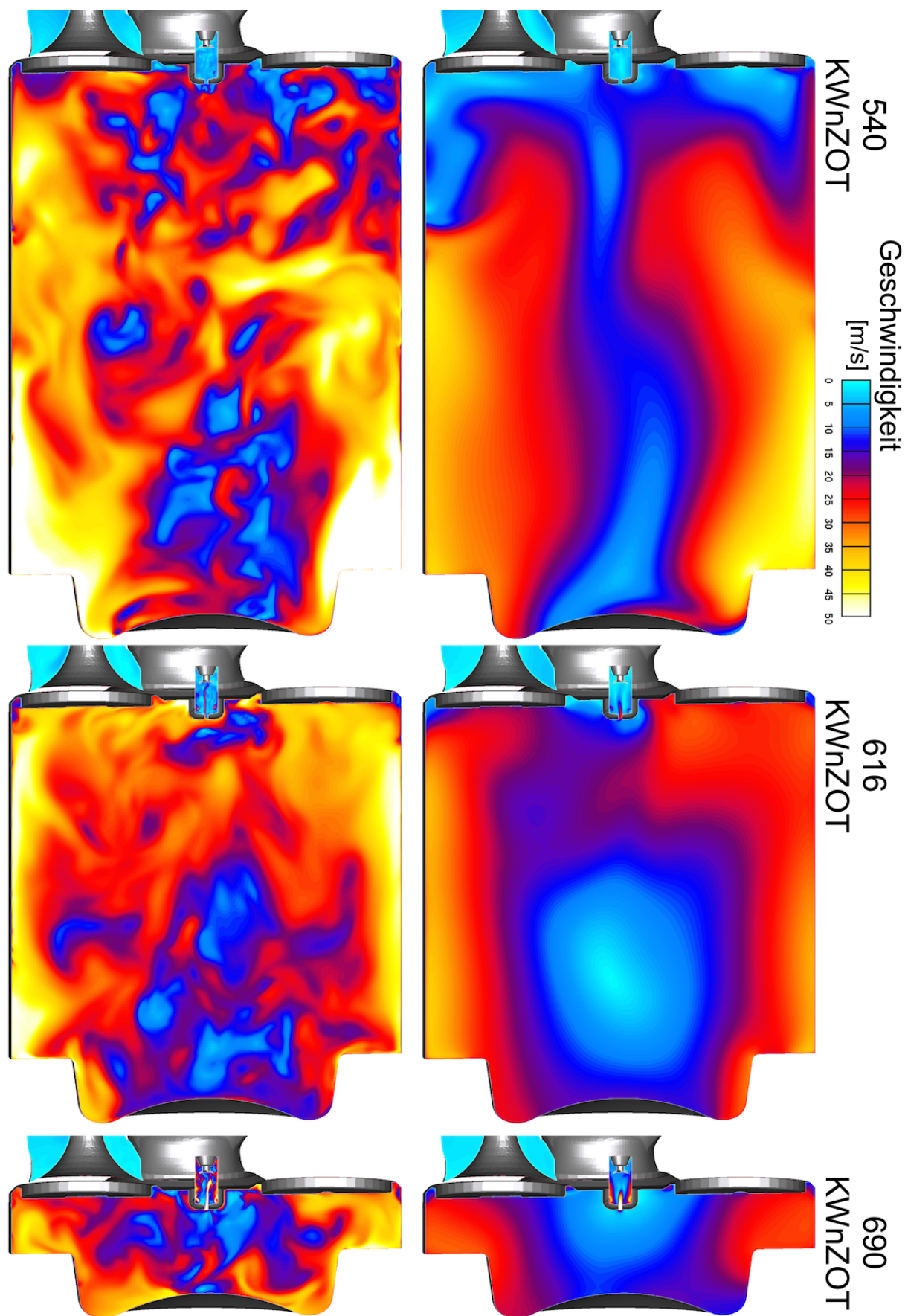


Abbildung 14: *Geschwindigkeitsfeld im Zylinder während des Verdichtungstaktes; ermittelt mit LES (links) und RANS (rechts)*

Im Laufe der Verdichtung wird Frischladung über die fünf Verbindungslöcher in die Vorkammer gedrückt, und kurz vor ZOT ergibt sich daher eine hochturbulente Strömung darin. Anhand der LES-Ergebnisse in der letzten Reihe von [Abbildung 14](#) ist ersichtlich, dass die charakteristischen Längenskalen der Turbulenz in der Vorkammer wesentlich feiner sind als im Zylinder. Ein detaillierter Einblick in die Vorkammer ist deshalb in [Abbildung 15](#) gegeben. Diese feinskaligen Turbulenzwirbel in der Vorkammer bewirken eine schnelle Faltung der anfänglich quasi-laminaren Flammenfront. Daraus ergibt sich einer der Vorteile der Vorkammerzündkerze gegenüber einer direkten Zündung.

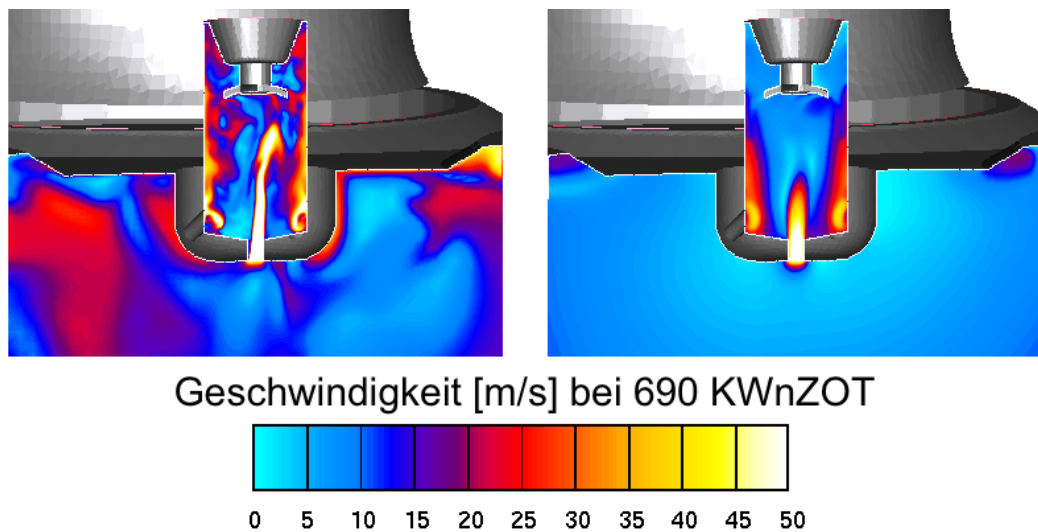


Abbildung 15: Vergleich der Strömung in der Vorkammer für LES (links) und RANS (rechts)

[Abbildung 16](#) zeigt einen quantitativen Vergleich der Drallströmung in der Vorkammer (links) und im Zylinder (rechts) zwischen beiden Turbulenzansätze. Die Drallströmung in der Vorkammer wird durch die absolute Rotationsgeschwindigkeit (wiedergegeben als Drehzahl) des Fluides charakterisiert. Im Zylinder wird diese absolute Rotationsgeschwindigkeit mit der Rotationsgeschwindigkeit der Kurbelwelle normiert (und im Folgenden als Drallzahl definiert).

Es ist ersichtlich, dass sich während des Einlasstaktes eine starke Drallströmung im Zylinder ausbildet, die bis zum Öffnen des Auslassventils erhalten bleibt. Da die Zylinderladung während ZOT vom Squish-Bereich in die Kolbenmulde strömt, ergibt sich entsprechend der Drehimpulserhaltung ein Drallzahl-Peak zu ZOT.

Durch die tangentielle Ausrichtung der Überströmbohrungen ergibt sich im Kurbelwinkelbereich um Zündung ebenfalls eine starke Drallströmung in der Vorkammer (entgegengesetzt der Drallströmung des Zylinders).

Beide Turbulenzansätze berechnen einen ähnlichen qualitativen Verlauf der Drallströmung, wobei sich im Fall der LES höhere Werte ergeben. Das Verhältnis zwischen

Vorkammer und Zylinder ist für beide Turbulenzmodelle allerdings ähnlich. Dadurch zeigt sich, dass bereits der RANS-Ansatz das mittlere Strömungsfeld mit guter Genauigkeit beschreibt.

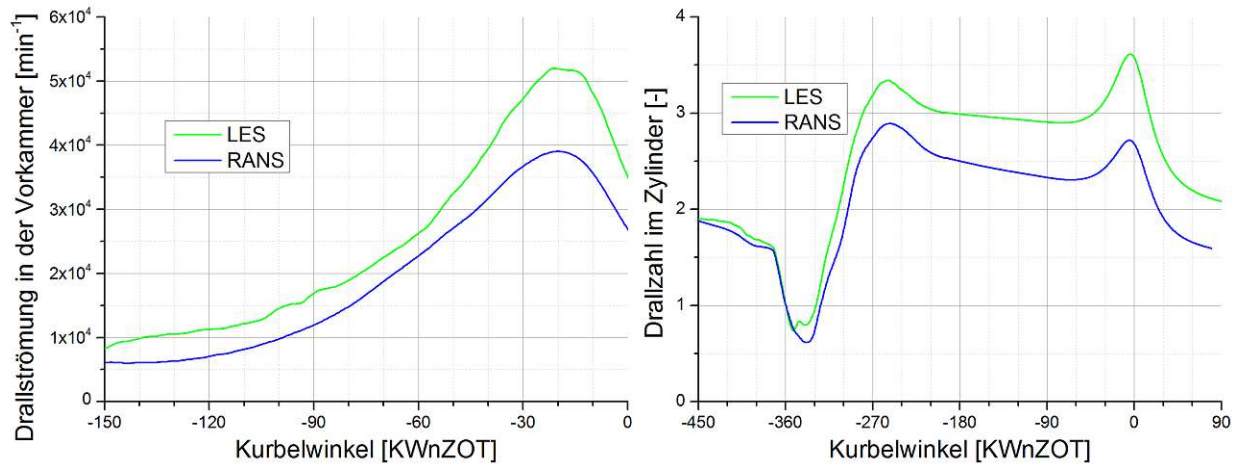


Abbildung 16: *Drallströmung in der Vorkammer (links) und im Zylinder (rechts) berechnet mit LES und RANS für einen geschleppten Zyklus*

Eine weitere wichtige Größe für Verbrennungsprozesse ist nach Damköhler [67] die Turbulenz. Da die Quantifizierung der Turbulenz bei transienten LES-Simulationen nicht trivial ist, wurde ein vereinfachter Ansatz gemäß [Abbildung 17](#) entwickelt. Allgemein sind die turbulenten Geschwindigkeitskomponenten der Strömung als Abweichung von der mittleren Strömungsstruktur definiert [68]. Die Schwierigkeit beim Hubkolbenmotor besteht darin, diese mittlere Lösung zu bestimmen [54].

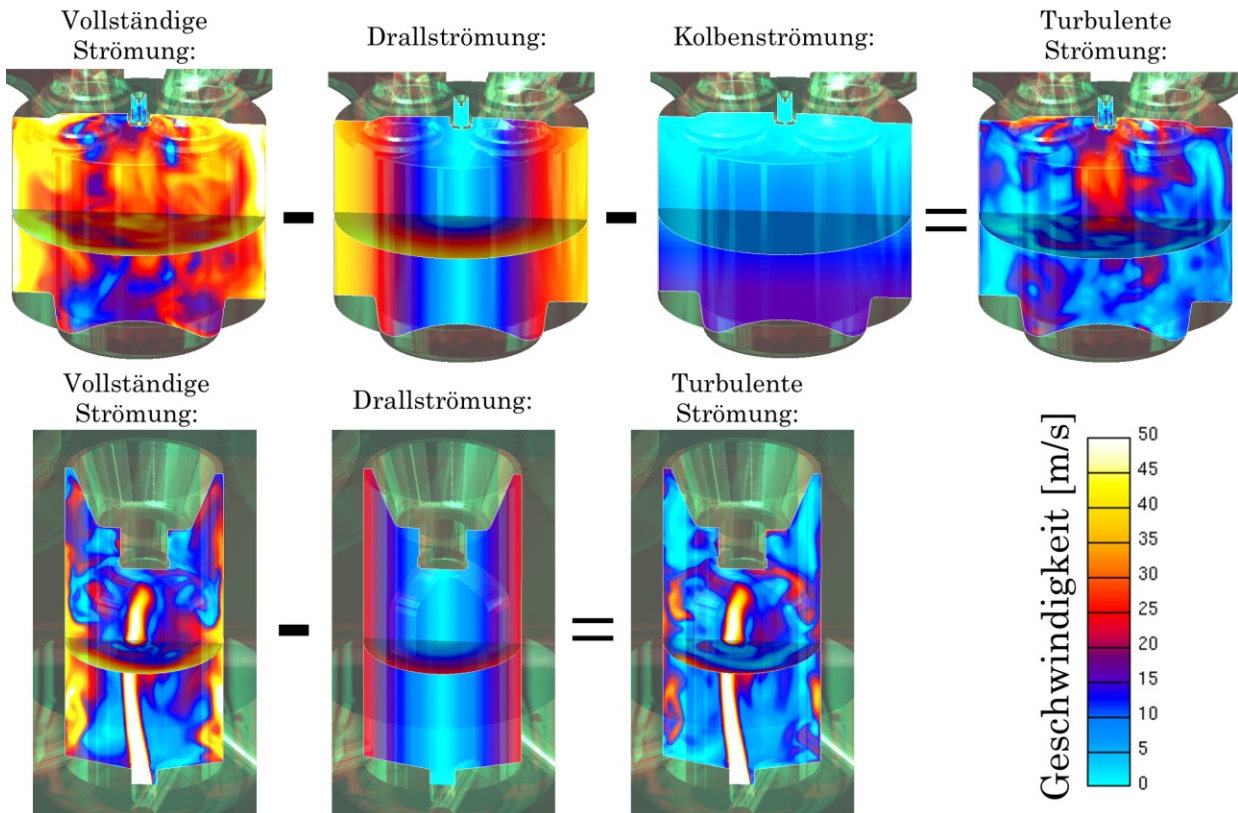


Abbildung 17: Ansatz zur Ermittlung der turbulenten Strömungskomponenten

Es wird daher angenommen, dass sich die mittlere Strömungsstruktur einerseits aus der Drallströmung zusammensetzt. Andererseits induziert die Kolbenbewegung einen linearen Strömungsverlauf zwischen Kolben (Strömungskomponente entsprechend Kolbenbewegung) und Zylinderkopf (ruhende Strömung). Beide mittlere Strömungsstrukturen werden zu jedem Zeitschritt ermittelt und vom vollständigen Strömungsfeld abgezogen. Dadurch lässt sich die turbulente Strömung im Zylinder extrahieren, siehe letzte Spalte in [Abbildung 17](#). Anschließend wird auf Zellebene die kinetische Energie dieser turbulenten Geschwindigkeitsanteile gebildet und über das Strömungsvolumen gemittelt. Die resultierende Größe ist ein Indikator für die Turbulenzintensität bei geschlossenen Ventilen. Da die Subgrid-Turbulenz um mehrere Größenordnungen geringer ist, wurde auf ihre Auswertung verzichtet. Bis auf die Kolbenbewegung wird für die Vorkammer der gleiche Ansatz herangezogen, siehe untere Reihe von [Abbildung 17](#).

Die resultierenden kinetischen Energien der turbulenten Geschwindigkeitsanteile sind in [Abbildung 18](#) dargestellt. Der Großteil der Turbulenz im Zylinder wird während des Einlasstaktes gebildet und dissipiert während des Verdichtungstaktes teilweise. Kurz vor ZOT kommt es aufgrund der Drallzunahme und der Squish-Strömung wieder zu einem

Anstieg der Turbulenz. Die turbulenten Geschwindigkeitsanteile in der Vorkammer verhalten sich entsprechend der Drallströmung und erreichen kurz von ZOT ihr Maximum.

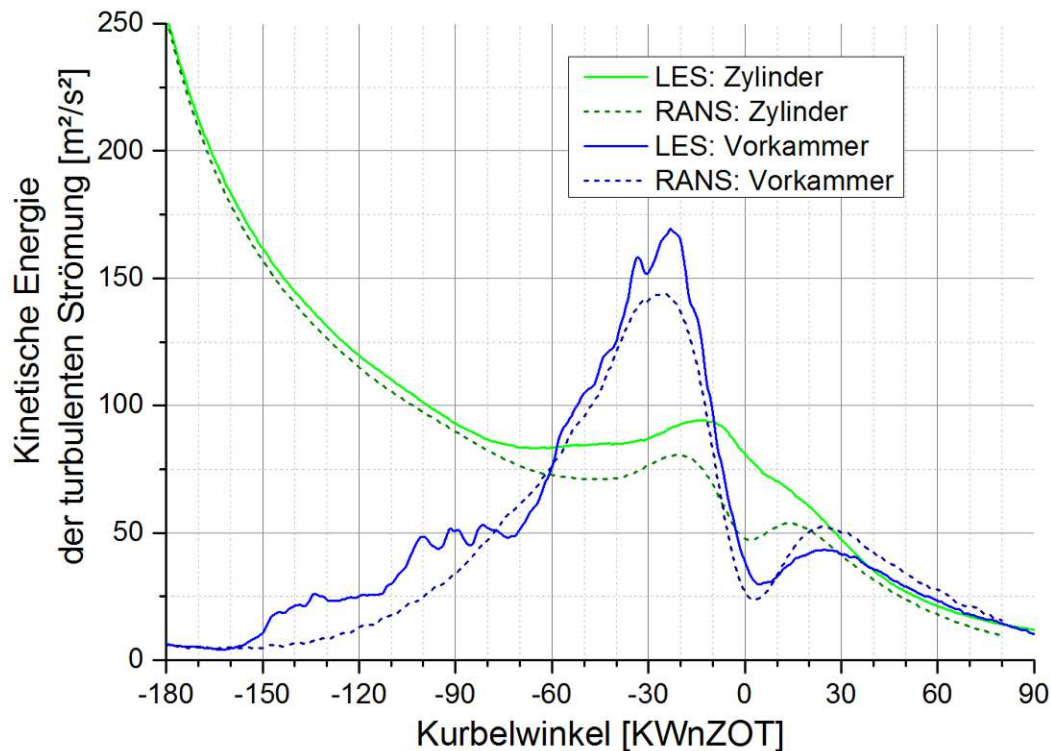


Abbildung 18: Kinetische Energie der turbulenten Strömungsanteile für einen geschleppten Zyklus mittels LES und RANS

Weiters geben die strichlierten Linien in Abbildung 18 die Ergebnisse des RANS-Ansatzes wieder. Da die turbulenten Wirbel aufgrund der Reynolds-Mittelung nicht aufgelöst werden, wurde auf Zellebene der Term $\sqrt{2/3 \cdot tkE}$ zu den turbulenten Geschwindigkeitskomponenten addiert. Dabei bezeichnet tkE die turbulente kinetische Energie, die durch das $k-\zeta-f$ Model berechnet wird. Im Anschluss wird erneut auf Zellebene die kinetische Energie gebildet und über das entsprechende Strömungsvolumen gemittelt. Durch den Vergleich der Ergebnisse in Abbildung 18 ist ersichtlich, dass beide Ansätze die Turbulenzintensität im Zylinder und der Vorkammerzündkerze ähnlich beschreiben. Dadurch zeigt sich, dass bereits der einfache RANS-Ansatz die Strömungsverhältnisse des Großgasmotors gut wiedergibt.

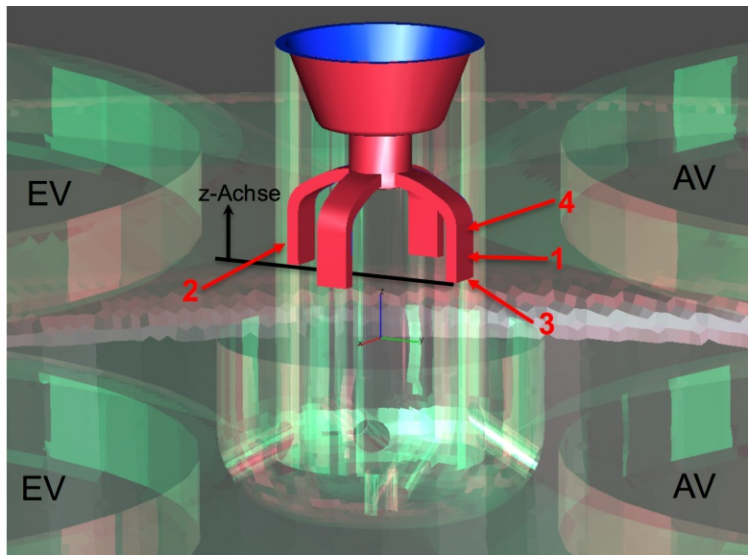
4.2.2.2. Flammenausbreitung

Die Verbrennung wurde bei beiden Turbulenzansätzen durch das *3-Zone Extended Coherent Flame Model (ECFM-3Z)* beschrieben [69, 70]. Dabei wurde die *AVL FIRE*-spezifische Erweiterung namens „*laminar terms extension*“ verwendet [71]. Im Falle der

LES-Rechnung wurden die zusätzlichen LES-Terme über einen Userparameter aktiviert [33]. Bei der Wahl der Modelkonstante „*Stretch factor*“³ wurde darauf geachtet, dass sich bei gegebenem Zündzeitpunkt ein ähnlicher Verbrennungsschwerpunkt wie am Prüfstand einstellt. Es ergab sich ein Wert von 1.2 für die LES- und 0.45 für die RANS-Rechnung. Der Standardwert liegt laut Dokumentation bei 1.6 [71], wodurch ersichtlich ist, dass der LES-Ansatz eine geringere Anpassung des Verbrennungsmodells benötigt.

Die erste Verbrennungsphase spielt eine entscheidende Rolle für den gesamten Verbrennungsprozess [54]. In [28] wurde gezeigt, dass ein sehr feines Netz im Bereich der Zündelektrode Vorteile bei der Beschreibung der anfänglichen Brennphase bringt. Dadurch sind die Differenzialgleichungen in der Lage, die Faltung und Konvektion des Flammenkerns unmittelbar nach der Zündung zu beschreiben. Folglich wurde zum Zündzeitpunkt ein sphärischer Zündkern mit einem Durchmesser von 0.5 mm im Zündkerzenspalt initialisiert. Die Flammenoberflächendichte (en.: flame surface density, *FSD*) wurde für eine Dauer von 1 °KW auf einen Wert von 5000 1/m gesetzt. In Verbindung mit der feinen Zellgröße von 0.075 mm im Elektrodenbereich (siehe [Abbildung 11](#)) ist eine ausreichende Diskretisierung sichergestellt.

Um den Einfluss der Zündposition auf die zyklischen Schwankungen zu bewerten, wurde dieser im Laufe der LES-Simulation variiert. Die Lage der Zündposition inklusive Detailansicht der Vorkammerzündkerze ist in [Abbildung 19](#) wiedergegeben (rote Flächen deuten die vier Elektroden an).



| Zündposition | Zyklus | x - y - z [mm] | | |
|--------------|---------------|----------------|------|-----|
| 1 | 1-6 | 0 | 4.8 | 3.9 |
| 2 | 7-12 | 0 | -4.8 | 3.9 |
| 3 | 13-18 & 25-29 | 0 | 4.8 | 3.3 |
| 4 | 19-24 | 0 | 4.8 | 5 |

Abbildung 19: Zündposition für unterschiedliche Zyklen

³ Der „*Stretch factor*“ ist ein Multiplikator für die Flammenoberflächen-Produktion. Größere Werte ergeben eine schnellere Verbrennung.

Abbildung 20 zeigt einen Vergleich der berechneten Druckverläufe mit den Messdaten für den schnellsten, langsamsten und mittleren Zyklus. Dabei zeigt sich, dass der RANS-Ansatz die Messdaten unzureichend wiedergibt. Während ZOT wird einerseits ein zu geringer Druck berechnet, andererseits ergibt sich danach ein steiler Druckanstieg mit einem Spitzendruck von über 160 bar bei etwa 15°KWnZOT .

Die LES-Rechnung gibt den Druckverlauf des mittleren gemessenen Zyklus genauer wieder. Die generelle Verbrennungslage ist nach wie vor etwas zu spät, aufgrund der mittigen Lage der roten Linie im gemessenen Streubereich kann allerdings geschlossen werden, dass die LES-Rechnung den Verbrennungsablauf gut wiedergibt.

Auffallend ist allerdings, dass die Simulationsergebnisse im abfallenden Bereich des Druckverlaufs zu hohe Werte wiedergeben. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Wandwärmeverluste in der Bilanzgleichung für die unverbrannte Enthalpie nicht berücksichtigt werden. Abschätzungen zeigten, dass dies zu einem Fehler von bis zu 50 K im Squish-Bereich führt und folglich die laminare Flammengeschwindigkeit gegen Ende der Verbrennung überschätzt wird. Folglich ergibt sich eine zu schnelle Verbrennung im Squish-Bereich. Da der Fokus der Untersuchungen allerdings auf der Vorkammervverbrennung, dem Übergang der Verbrennung in den Zylinder und die freie Propagation der Flamme im Zylinder lag, ist diese Einschränkung hinnehmbar. Um eine korrekte unverbrannte Temperatur in der Vorkammer zu gewährleisten, war allerdings eine Reinitialisierung des Verbrennungsmodells für jeden Zyklus unmittelbar vor Zündzeitpunkt notwendig. Zukünftige Forschungsaktivitäten sollten sich auf diese Limitierung konzentrieren.

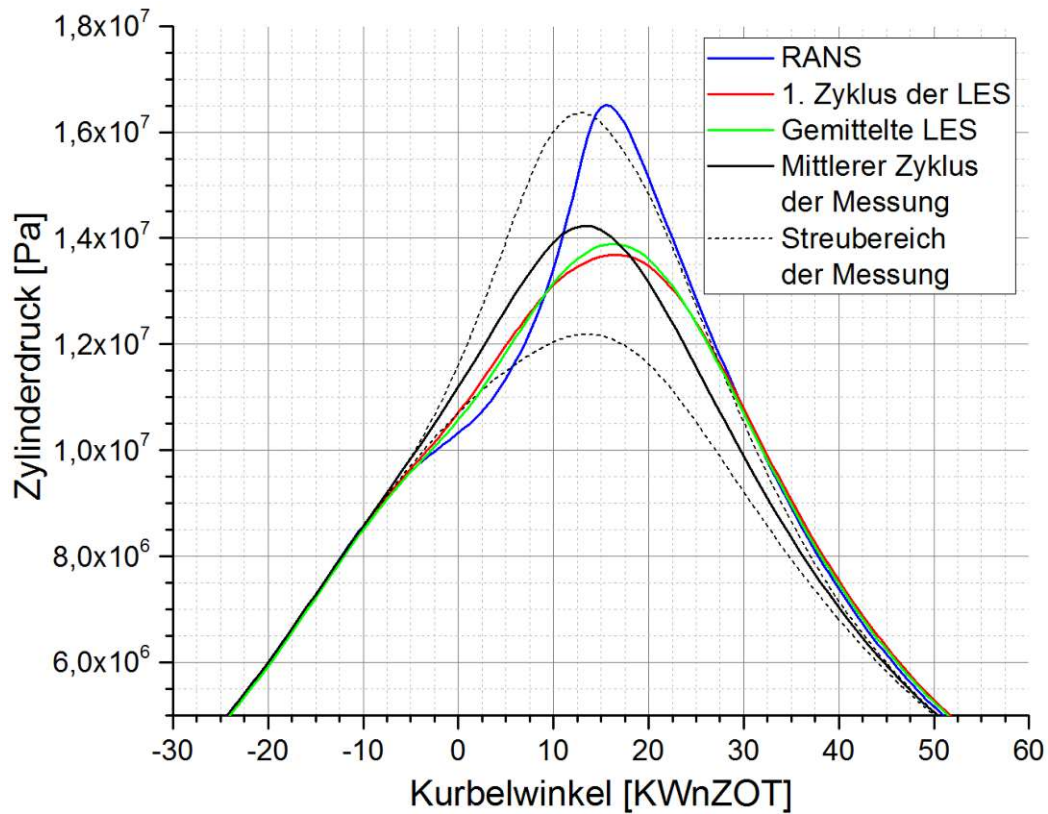


Abbildung 20: Vergleich der berechneten Druckverläufe mit den Messdaten

Um die Flammenausbreitung und die Unterschiede zwischen beiden Ansätzen zu untersuchen, zeigt [Abbildung 21](#) anhand eines Schnittes durch den Zylinder den Reaktionsfortschritt (Reaction Progress, RP). Werte von 1 deuten dabei verbrannte Bereiche an. Zusätzlich verdeutlicht eine Iso-Oberfläche bei einem RP von 0.25 die räumliche Flammenausbreitung.

Aufgrund der zufriedenstellenden Übereinstimmung der LES mit den Messergebnissen, gibt die linke Spalte von [Abbildung 21](#) einen visuellen Einblick in die Flammenausbreitung. Die Zündung findet bei 28°KWvZOT statt und ungefähr 10°KW danach hat sich die Flamme in der gesamten Vorkammer ausgebreitet (erste Spalte). Dadurch ergibt sich eine starke Wärmefreisetzung und folglich ein Überdruck von bis zu 4 bar in der Vorkammer. Bei 14°KWvZOT sind bereits deutliche Flammenfackeln im Zylinder erkennbar. Diese Fackeln entzünden die Zylinderladung an mehreren Stellen, siehe dritte Spalte von [Abbildung 21](#), und sorgen deshalb für eine schnelle Verbrennung mit hoher Stabilität.

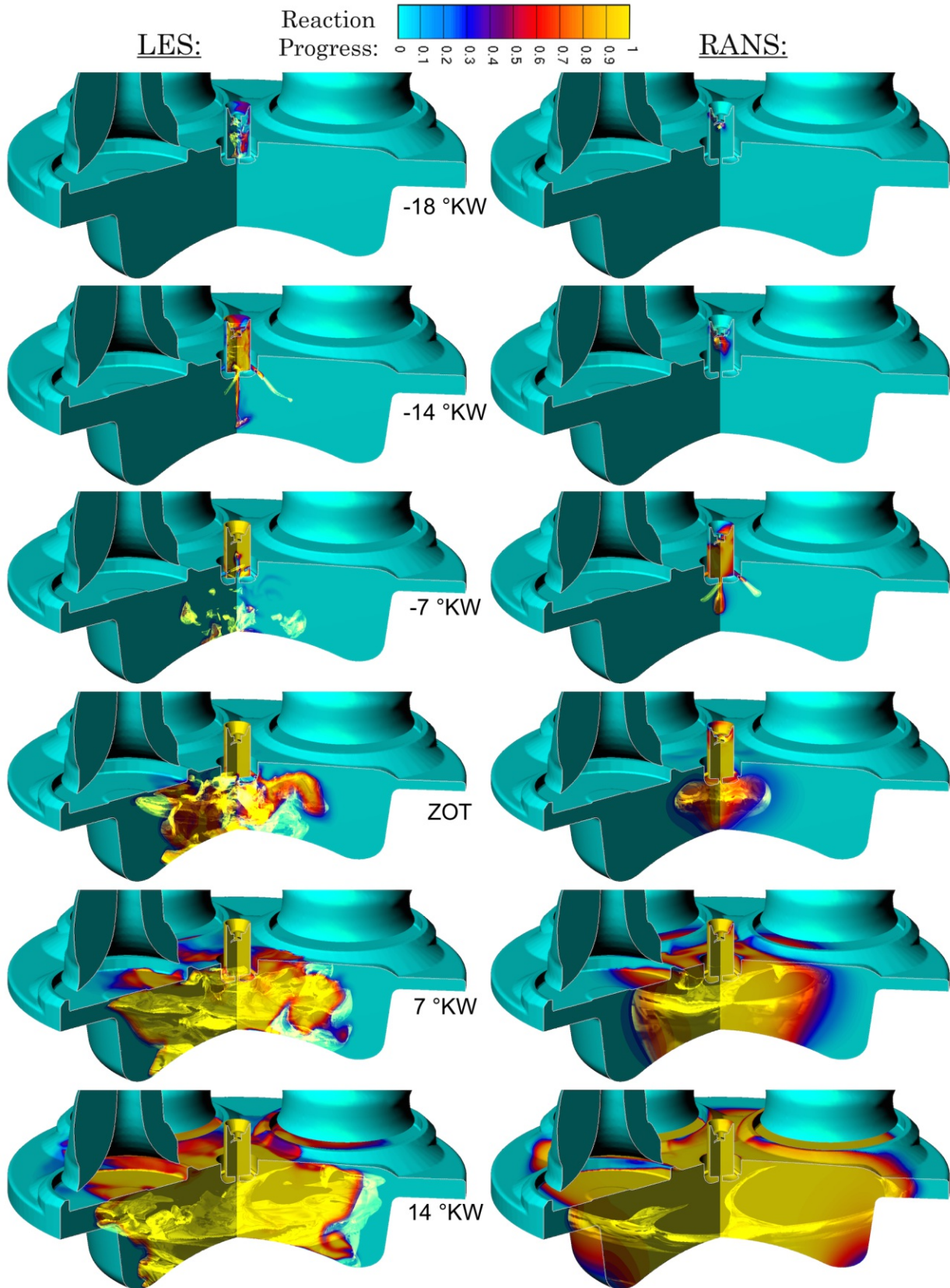


Abbildung 21: Berechnete Flammenausbreitung mit LES und RANS

Weiters führen die Fackeln zu einer stark gefalteten Flammenfront im Zylinder, die der Grund für die höheren Reaktionsraten im Vergleich zur direkten Zündung sind (siehe Abbildung 9). Im weiteren Verlauf breitet sich die Flamme im restlichen Brennraum aus.

In der rechten Spalte von Abbildung 21 sind die Ergebnisse der RANS-Rechnung dargestellt. Die Brenngeschwindigkeit in der Vorkammer ist dabei deutlich geringer als bei der LES. Der Fackelaustritt findet mit einer Verspätung von ungefähr 7 °KW statt und die Eindringtiefe in den Zylinder ist infolge der langsamen Wärmefreisetzung geringer. Aufgrund der geringen Fackeleindringtiefe ergibt sich zu einem sehr frühen Verbrennungsfortschritt bereits eine sphärische Flammenoberfläche. Im Zylinder ergibt sich trotzdem eine unphysikalisch hohe Brenngeschwindigkeit und bei ungefähr 14 °KWnZOT ist bereits annähernd die gesamte Zylinderladung verbrannt.

Obwohl die Strömungsverhältnisse durch den RANS-Ansatz mit guter Genauigkeit wiedergegeben werden, offenbart Abbildung 21 große Schwierigkeiten bei der Modellierung des komplexen Verbrennungsprozesses. Dies ist mit großer Wahrscheinlichkeit darauf zurückzuführen, dass das Verbrennungsmodell auf dem sogenannten „*Flamelet*“-Ansatz basiert und daher der Anwendungsbereich bei moderaten Turbulenzgraden liegt. Spätere Untersuchungen werden zeigen, dass die Verbrennung von Großgasmotoren sogar in den sogenannten Bereich der gelöschten Reaktionszone fallen kann und daher als hochturbulent bezeichnet werden kann. Die großen Unterschiede im integralen Längenmaß zwischen Vorkammer und Zylinder erschweren eine Anpassung des Verbrennungsmodells durch die Modellkonstanten weiter. Daher ist dieses Brennverfahren durch den RANS-Ansatz schwer abzubilden.

Der LES-Ansatz zeigt hier einen größeren Einsatzbereich und kann das hoch turbulente Brennverfahren genauer wiedergegeben. Da die groben Turbulenzstrukturen aufgelöst werden, ist es zudem möglich, die transienten und zyklischen Effekte zu analysieren.

4.2.3. Untersuchung der zyklischen Schwankungen

Deswegen wurden 29 aufeinanderfolgende Zyklen mit dem LES-Ansatz am *Vienna Scientific Cluster (VSC)* berechnet.

Abbildung 22 und Abbildung 23 geben die Drallströmung in der Vorkammer und im Zylinder für 29 Zyklen wieder und vergleicht diese mit dem zuvor betrachteten geschleppten Zyklus. Dadurch zeigt sich, dass dieser geschleppte Zyklus den mittleren Verlauf gut repräsentiert und damit der entsprechende Vergleich mit den RANS-

Ergebnissen zulässig war. Aufgrund der Verbrennung nimmt die Drallströmung kurz nach 30 °KWvZOT rapide ab. Die zyklischen Schwankungen der Drallströmung in der Vorkammer sind relativ gering.

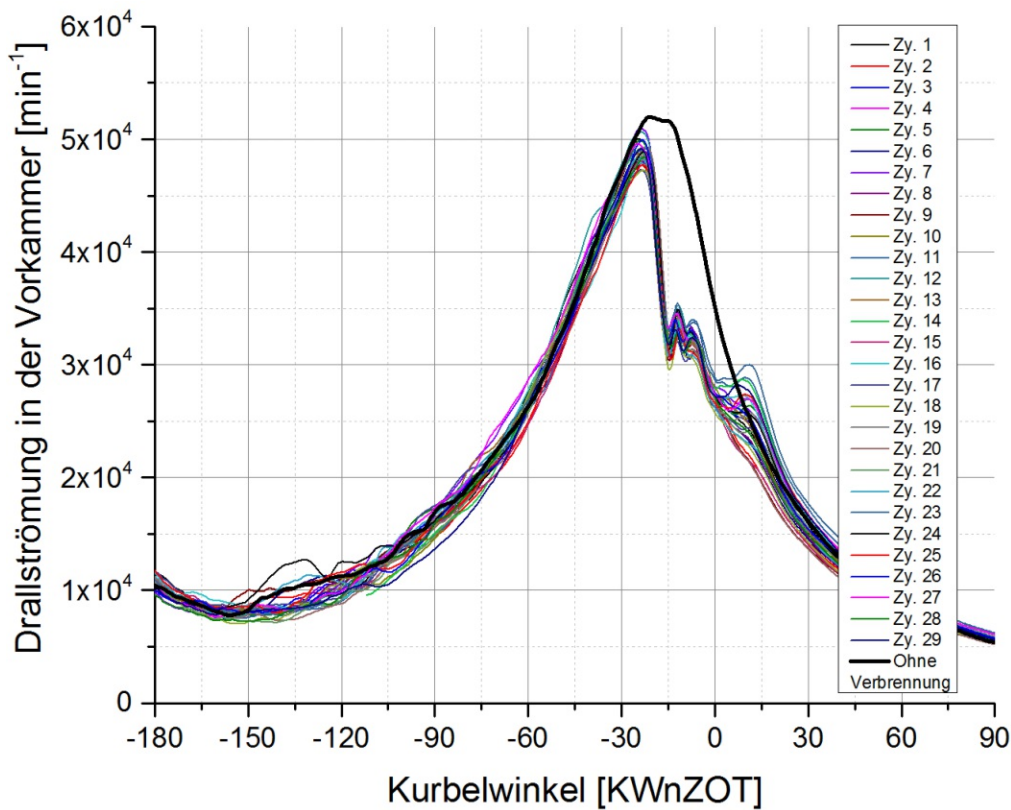


Abbildung 22: *Drallströmung in der Vorkammer für 29 gefeuerte Zyklen und einem geschleppten Zyklus*

Auch für die Drallzahl im Zylinder gibt der geschleppte Zyklus die mittlere Lösung sehr zufriedenstellend wieder. Die zyklischen Schwankungen fallen etwas größer aus als in der Vorkammer.

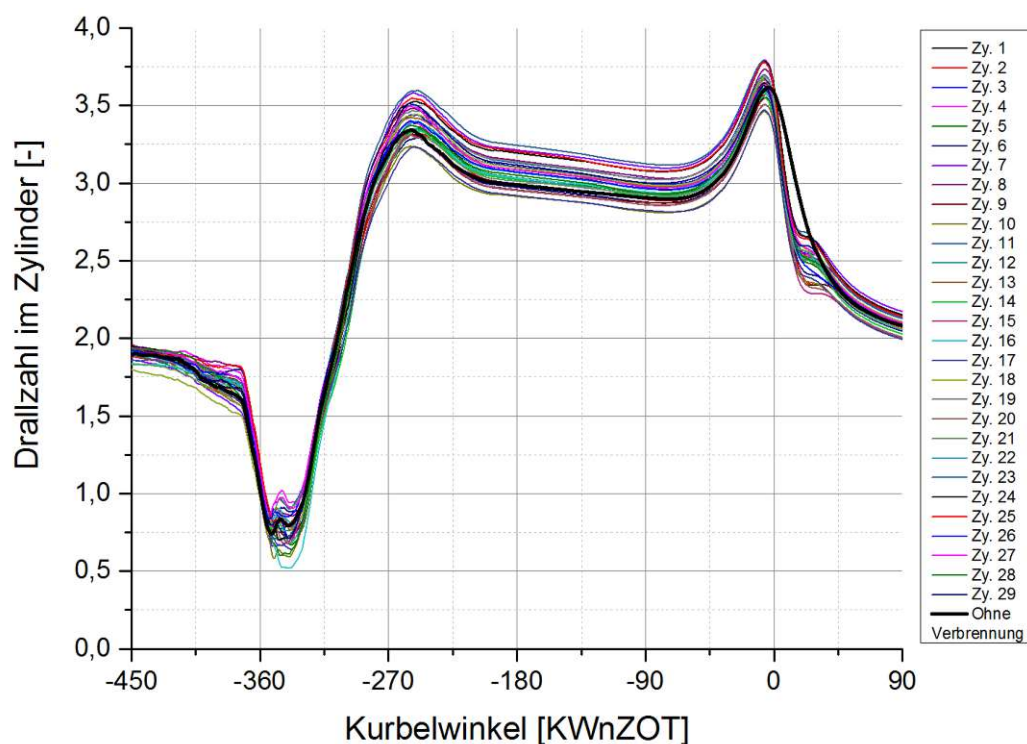


Abbildung 23: Drallzahl im Zylinder für 29 gefeuerte Zyklen und einem geschleppten Zyklus

Ein ähnliches Bild ergibt sich für die Turbulenz, die in [Abbildung 24](#) für die Vorkammer und in [Abbildung 25](#) für den Zylinder dargestellt ist.

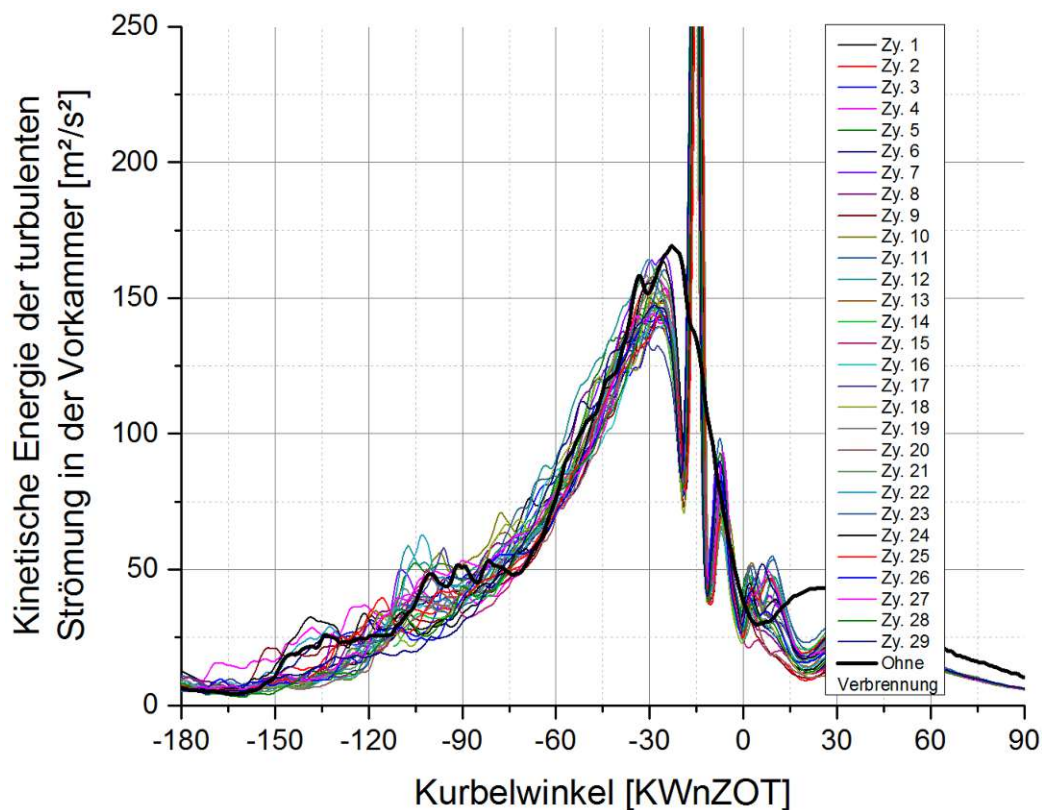


Abbildung 24: Kinetische Energie der turbulenten Strömungsanteile in der Vorkammer für 29 gefeuerte Zyklen und einem geschleppten Zyklus

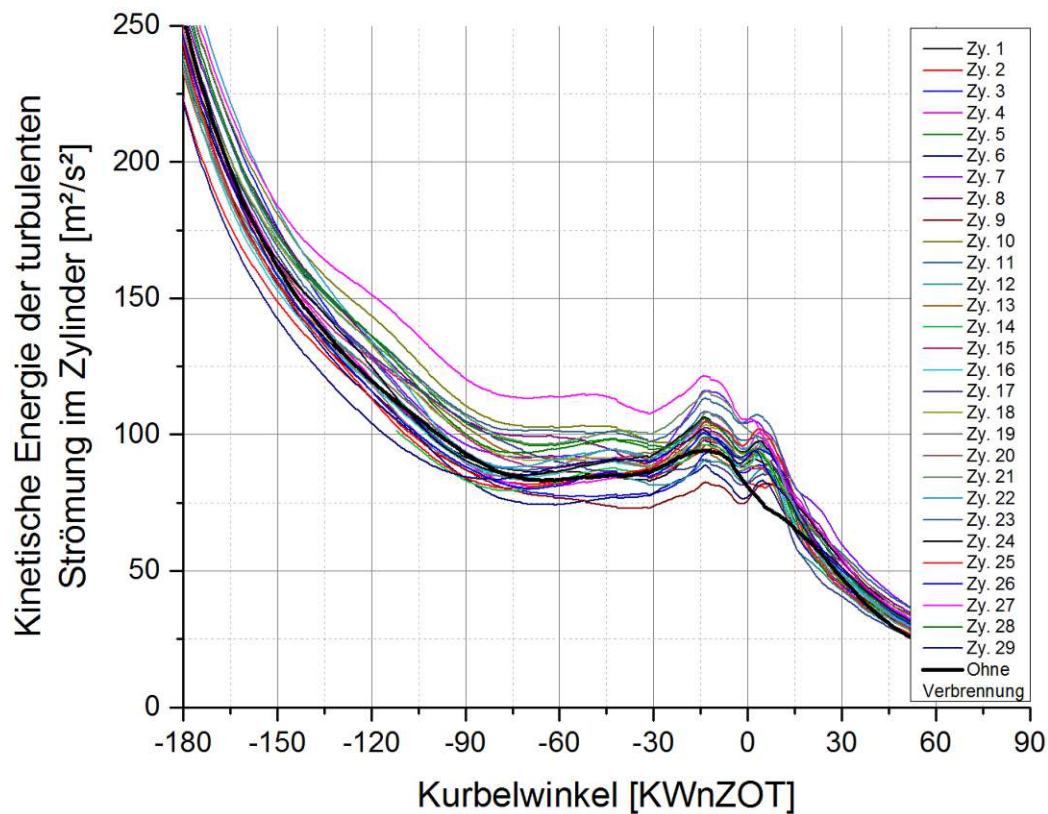


Abbildung 25: *Kinetische Energie der turbulenten Strömungsanteile im Zylinder für 29 gefeuerte Zyklen und einem geschleppten Zyklus*

Die Druckverläufe der individuellen Zyklen sind in [Abbildung 26](#) ersichtlich. Die zyklischen Schwankungen sind anhand der unterschiedlichen Spitzendrücke deutlich erkennbar. Ebenfalls ist die mittige Lage des ersten Zyklus ersichtlich.

[Abbildung 27](#) zeigt weiters die kumulierten Brennverläufe und vergleicht sie mit den gemessenen Schwankungsbreiten der 5, 10, 50, 80 und 90 % Umsatzpunkte (waagrechte Linien). Die berechneten Schwankungen der ersten Verbrennungsphase (0-5 % MFB) sind hauptsächlich auf Schwankungen des Strömungsfeldes zurückzuführen und nehmen einen Wert von 2.7 °KW an. Die entspricht ungefähr 44 % der gemessenen Schwankungen des 5 % Umsatzpunktes (6.2 °KW). Es kann geschlossen werden, dass die restlichen 56% auf Effekte zurückzuführen sind, die durch die LES-Rechnung nicht berücksichtigt werden. Dazu können beispielsweise die Ausbildung und Deformation des Zündfunkens, die chemischen Vorgänge im Zündplasma während der Entzündung der Ladung oder eine mögliche Flammenlöschung infolge von Wandwärmeverluste oder „subgrid-scale“-Turbulenz zählen. Detaillierte experimentelle Untersuchungen des Zündprozesses bei hohen Turbulenzgraden [72] und weiterentwickelte Zündmodelle auf Basis einer Lagrangian-Phase [73] könnten dafür eine Genauigkeitssteigerung bringen.

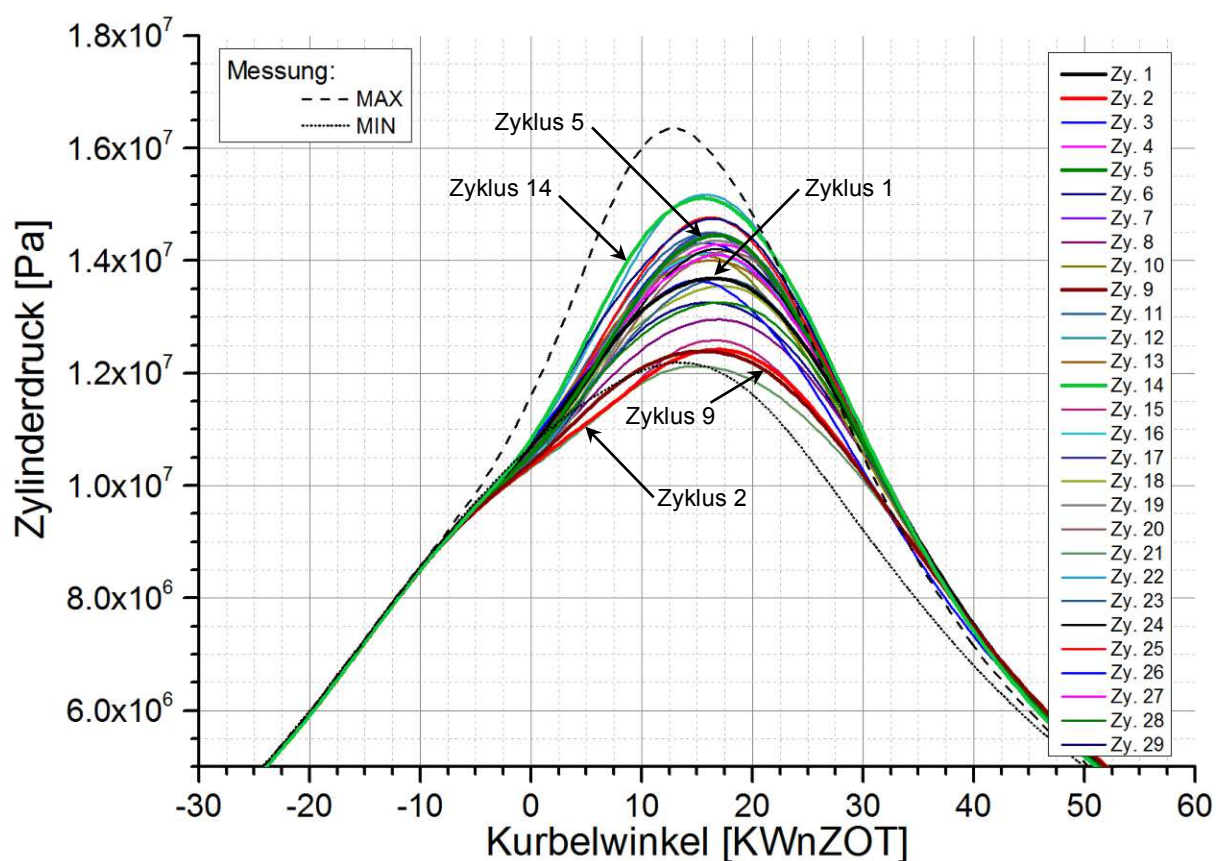


Abbildung 26: Berechnete Druckverläufe und Vergleich mit der Messung

Im weiteren Brennverlauf ist in [Abbildung 27](#) ersichtlich, dass die gemessenen zyklischen Schwankungen bis zum 50 % Umsatzpunkt auf einen Wert von $11.9 \text{ }^\circ\text{KW}$ zunehmen. Die Simulation berechnet eine ähnliche prozentuelle Zunahme auf $6.2 \text{ }^\circ\text{KW}$, wodurch die LES 53 % der Verbrennungsschwerpunktschwankungen abbildet. Die Zunahme der Schwankungen ist einerseits auf die stochastische Natur der Strömung im Brennraum zurückzuführen. Folglich werden die zyklischen Schwankungen während der Verbrennung aufakkumuliert. Andererseits führt eine schnelle Vorkammerverbrennung zu höheren Brennraten im Zylinder, da sich eine tiefere Eindringtiefe der Fackeln in den Brennraum ergibt. Dadurch tritt eine stärkere Faltung der Flamme ein. Die Zunahme des Zylinderdrucks und -temperatur bewirkt eine weitere Steigerung der turbulenten Flammengeschwindigkeit.

Beide Effekte werden durch die LES-Rechnung berücksichtigt und führen zu einer Divergenz zwischen den kumulierten Brennverläufen im Fortlauf der Verbrennung. Der individuelle Einfluss dieser Effekte wird bei der Herleitung des Zyklusschwankungsmodells noch eine wichtige Rolle einnehmen.

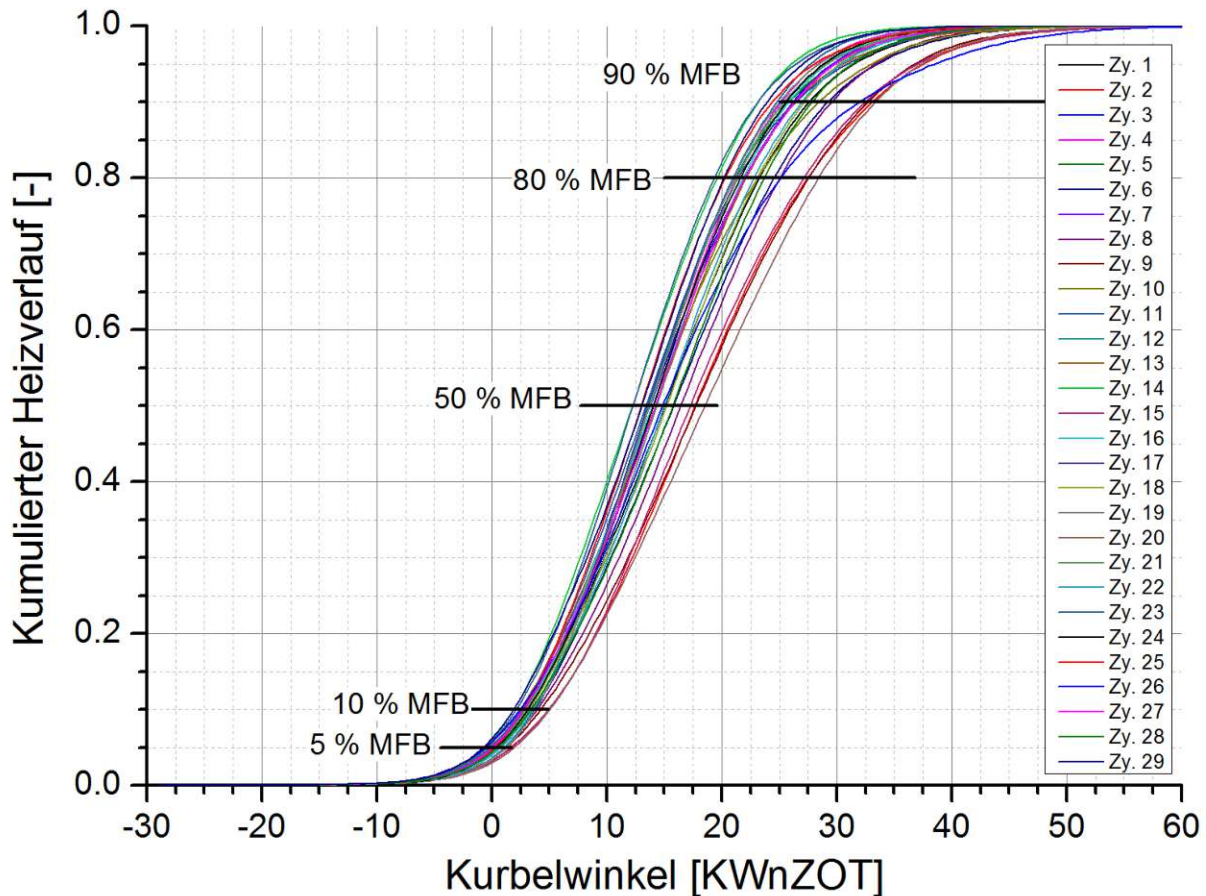


Abbildung 27: Berechnete kumulative Heizverläufe und Vergleich mit der Messung

Obwohl die Schwankungen der ersten Phase tendenziell zu gering berechnet werden, ist es wichtig deren Ursache genauer zu untersuchen. [Abbildung 28](#) zeigt die Ausbreitung der Flamme in der Vorkammer für fünf Zyklen. Dabei handelt es sich um zwei schnelle, einen mittleren und zwei langsame Zyklen (siehe Markierungen in [Abbildung 26](#)). Unmittelbar nach der Zündung dominiert die Konvektion des Flammenkerns aufgrund der hohen Strömungsgeschwindigkeiten. Die roten Pfeile in den zwei ersten Bildern von Zyklus 9 verdeutlichen den Konvektionspfad. Dabei entscheiden lokale Strömungskomponenten über den genauen Konvektionspfad des Flammenkerns. Im Vergleich zur Konvektionsgeschwindigkeit ist in dieser Phase die Flammengeschwindigkeit deutlich geringer. 8 °KW nach der Zündung ist die Ausbildung einer voll turbulenten Flamme weit vorangeschritten, siehe dritte Spalte, und die Brenngeschwindigkeit nimmt deutlich zu. Die räumliche Verteilung der Flamme in der Vorkammer zu diesem Zeitpunkt beeinflusst den gesamten Verbrennungsprozess. Die deutlich größere Erstreckung der Flamme in den unteren Teil der Vorkammer für Zyklus 1, 5 und 14, siehe rote Ellipsen, ist der Hauptgrund für die schnellere Verbrennung im Vergleich zu Zyklus 2 und 9. Ab zirka 18 °KWvZOT beginnt die Flamme für die drei schnellen Zyklen in den Zylinder überzutreten.

Ungefähr ab 15 °KWvZOT sind die Fackeln für die schnellen Zyklen im Zylinder ersichtlich. Ab diesem Zeitpunkt bildet sich die Flamme im Zylinder aus und die starke Faltung ist beispielsweise während ZOT deutlich für Zyklus 14 ersichtlich.

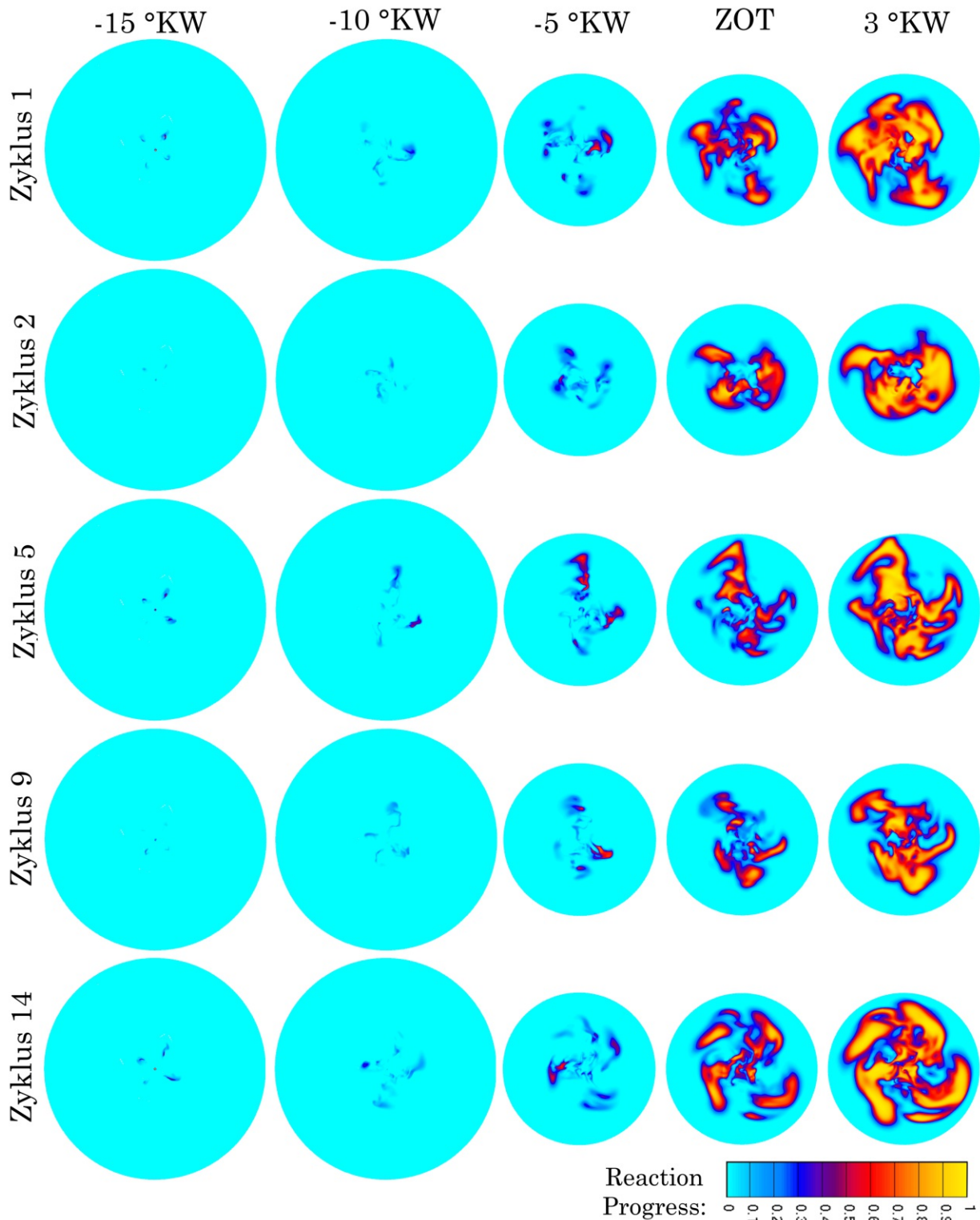


Abbildung 29: *Flammenausbreitung im Zylinder für unterschiedliche Zyklen*

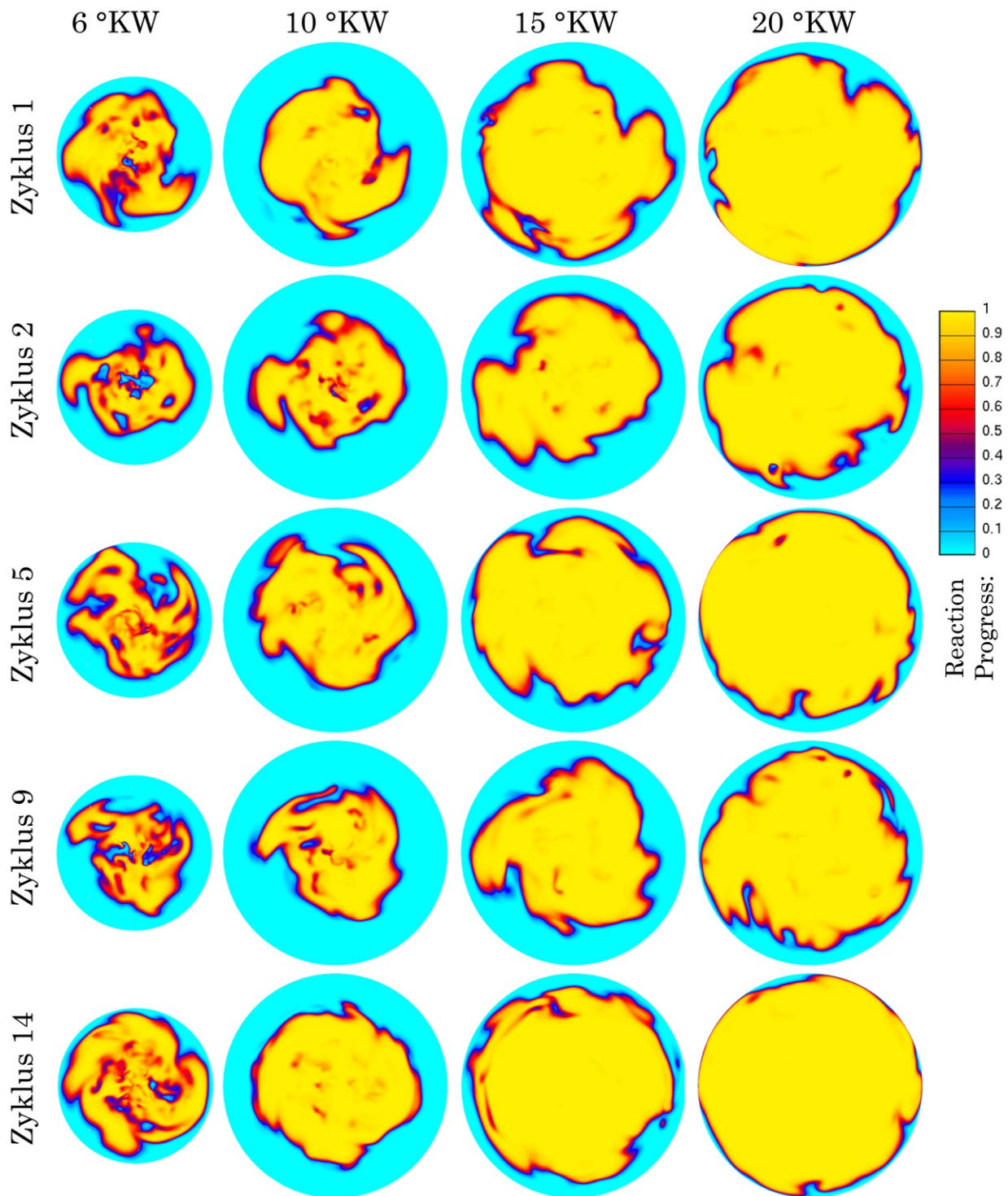


Abbildung 30: *Flammenausbreitung im Zylinder für unterschiedliche Zyklen*

Im Vergleich dazu bewirken die kompakten Flammenfronten von Zyklus 2 und 5 eine geringere reaktive Oberfläche und daher ergeben sich geringere Reaktionsraten und moderatere Spitzendrücke. Ab ungefähr 6 °KWnZOT brennen die großskaligen Laschen in der Kolbenmulde aus und ab 10 °KWnZOT nimmt die Flammenoberfläche zunehmend eine sphärischere Form im Squish-Bereich mit moderater Faltung an. Unterschiede in der

Flammenoberfläche zwischen den einzelnen Zyklen sind bis zum Ende der Verbrennung ersichtlich.

Da die Zündposition während der Simulation variiert wurde, ist in [Abbildung 31](#) deren Auswirkung auf die Verbrennung dargestellt. Grundsätzlich ergibt sich ein relativ geringer Einfluss, der mit Fortdauer der Verbrennung weiter abnimmt. Die Auswirkungen von Zündposition 3 sind dabei am stärksten ausgeprägt, da die tiefe Zündung in der Vorkammer zu einem geringeren Flammenweg zu den Überströmbohrungen führt. Die stochastischen Schwankungen bei konstanter Zündposition sind allerdings deutlich stärker ausgebildet.

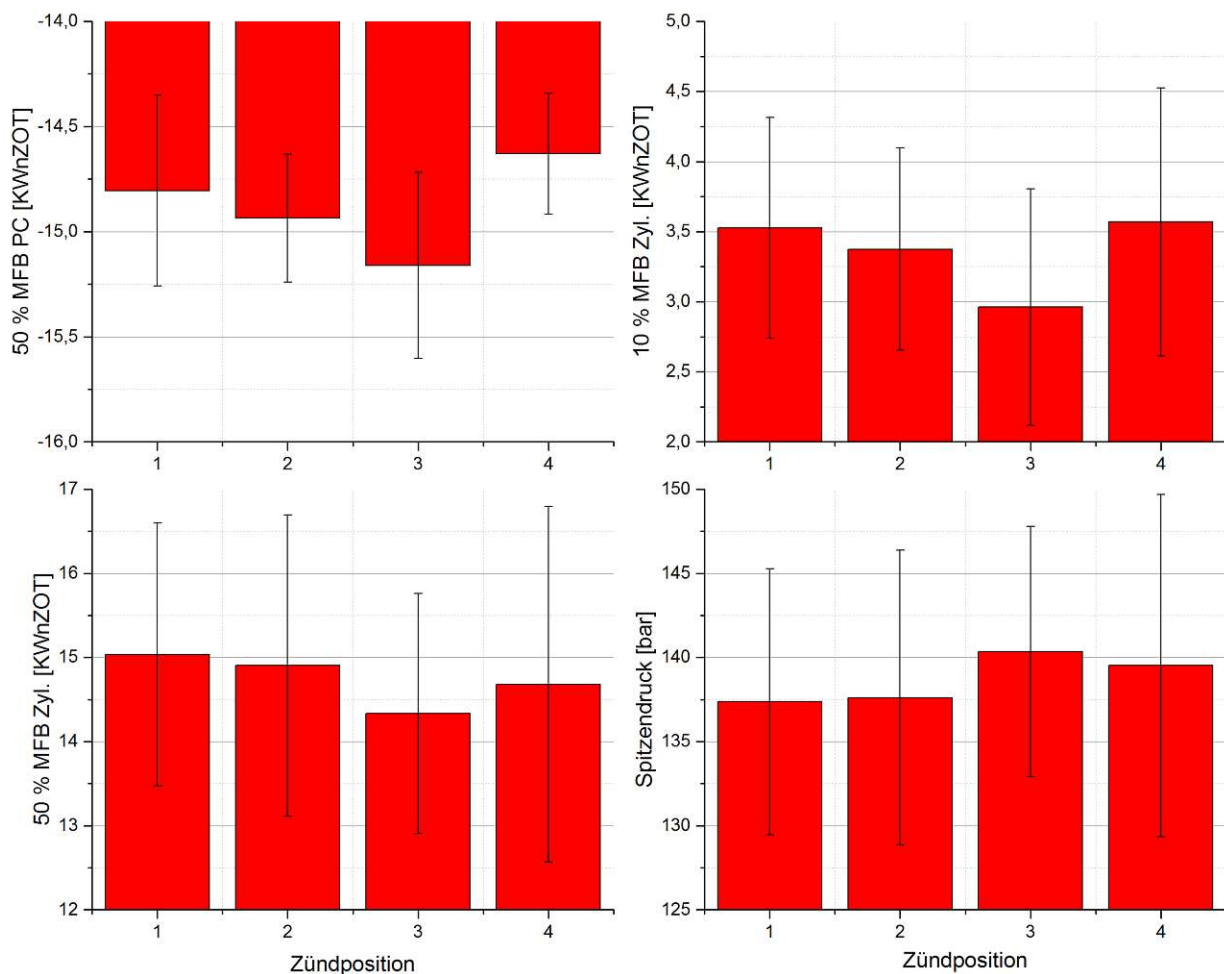


Abbildung 31: Einfluss der Zündposition auf die Verbrennung

4.3. Experimentelle Untersuchungen zum Brennverfahren

Um ein prädiktives Verbrennungsmodell für das 1D-Modell aufzubauen, ist ein fundiertes Wissen über das Brennverfahren und deren Sensitivität gegenüber Betriebsparametervariationen notwendig. Die LES-Ergebnisse brachten bereits einen detaillierten Einblick in die Flammenausbreitung. Aufgrund des hohen numerischen

Aufwandes eignet sich der LES-Ansatz allerdings nicht für Betriebsparametervariationen. Deshalb sind detaillierte experimentelle Untersuchungen am Einzylinder-Versuchsmotor durchgeführt worden, die im Folgenden diskutiert werden.

4.3.1. Einfluss der Betriebsparameter auf die Vorkammerverbrennung

Die Parameterbereiche der untersuchten Betriebspunkte sind in Tabelle 6 zusammengefasst. Sie setzten sich aus einer Variation des ZZZP und der Last für zwei unterschiedliche Kraftstoffmischungen zusammen. Das Verdichtungsverhältnis (ϵ) wurde konstant auf 12.4 gesetzt und das Äquivalenzverhältnisses (ϕ) wurde entsprechend *TA-Luft* angepasst (0.5 g/Nm³_{5%O₂} [74]). Dadurch weisen BP mit frühem ZZZP bzw. mit hoher Last eine stärkere Abmagerung auf.

| | ZZP [KWvZOT] | Saugrohrdruck [bar] | ϕ [-] | Pmi [bar] |
|---------------------|-----------------|------------------------|---------------|--------------|
| MZ80-ZZZP Variation | 22 - 28 | 4.05 | 0.579 - 0.568 | 23.6 |
| MZ65-ZZZP Variation | 22 - 25 | 3.95 | 0.581 - 0.567 | 23.6 |
| MZ80-Lastvariation | 28 | 3.8 - 5.0 | 0.570 - 0.561 | 22.5 - 29.9 |
| MZ65-Lastvariation | 28 | 3.5 - 3.8 | 0.563 - 0.559 | 20.9 - 22.5 |

Tabelle 6: Parameterbereich der untersuchten Betriebspunkte

In [Abbildung 32](#) und [Abbildung 33](#) ist die 0-10 % Brenndauer in Abhängigkeit des ZZZP bzw. Äquivalenzverhältnisses dargestellt. Aufgrund der erwähnten gleichzeitigen Variation mehrerer Betriebsparameter ist eine sorgfältige Interpretation der Ergebnisse notwendig.

Es zeigte sich, dass der ZZZP den größten Einfluss auf die 0-10 % Brenndauer hat. Durch den hellgrünen Pfeil in [Abbildung 32](#) wird dies verdeutlicht und kann hauptsächlich auf zwei Faktoren zurückgeführt werden: Mit spätem ZZZP nimmt die Temperatur und Masse in der Vorkammer zu, wodurch die laminare Flammengeschwindigkeit ansteigt und mehr Energie durch die Verbrennung frei gesetzt wird. Weiters nehmen die Strömungsgeschwindigkeiten und die Turbulenzintensität in der Vorkammer zu, siehe [Abbildung 16](#) und [Abbildung 18](#), und beschleunigen die Vorkammerverbrennung.

Neben der ZZZP-Variation zeigt auch die Lastpunktvariation eine Auswirkung auf die Brennverzugszeit. Dabei spielen sowohl die Druckzunahme, als auch die geringfügige Abmagerung eine Rolle. Beide Effekte führen zu einer Abnahme der laminaren Flammengeschwindigkeit [75] und bewirken daher eine Zunahme der 0-10 % BD.

Für die klopfresistentere Kraftstoffmischung MZ80 (grüne Punkte) sind tendenziell längere Brennverzugszeiten als für MZ65 (blaue Punkte) ersichtlich. Dies zeigt die Sensitivität der

ersten Verbrennungsphase gegenüber der laminaren Flammengeschwindigkeit, die mit steigendem Propananteil zunimmt und daher für die Kraftstoffmischung MZ80 geringer ist als für MZ65 [76].

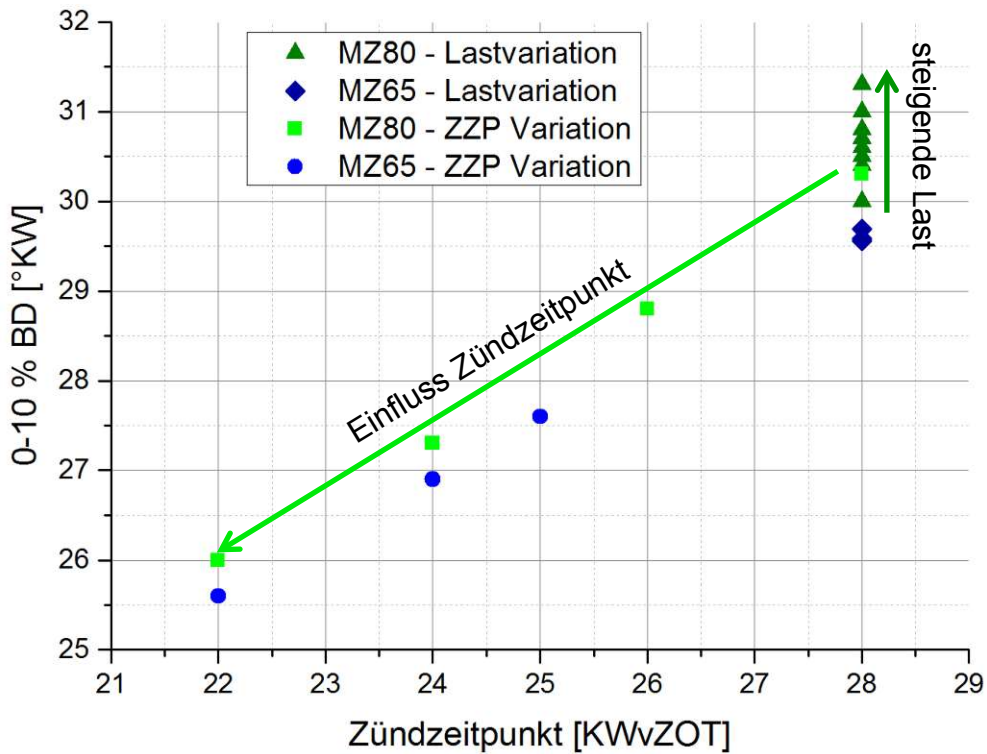


Abbildung 32: Brennverzugszeit in Abhängigkeit des Zündzeitpunktes und der Last

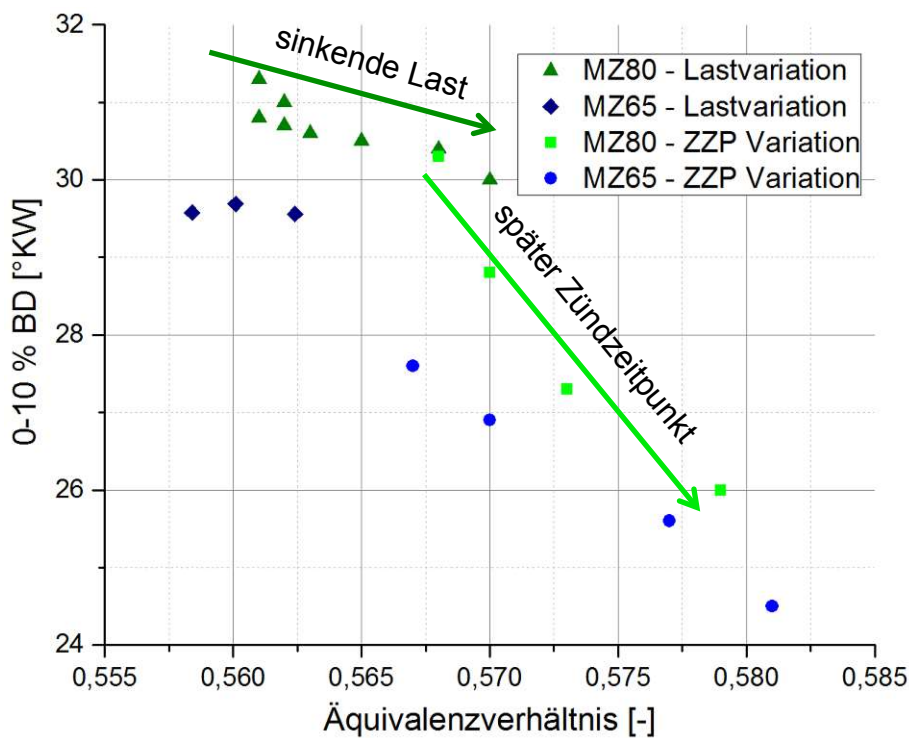


Abbildung 33: Brennverzugszeit in Abhängigkeit des Kraftstoffanteils für unterschiedliche Lasten und Zündzeitpunkte

4.3.2. Einfluss der Betriebsparameter auf die Flammenausbreitung im Zylinder

In [Abbildung 34](#) wird die Abhängigkeit der 10-50 % Brenndauer vom Spitzendruck dargestellt. Da die Flamme in dieser Verbrennungsphase eine freie Propagation aufweist, ist die 10-50% BD ein gutes Maß für die turbulente Flammengeschwindigkeit im Zylinder. Einflüsse durch eine Interaktion mit der Wand können dabei weitestgehend ausgeschlossen werden. Anhand der Skalierung der y-Achse ist ersichtlich, dass die Sensitivität der Brenngeschwindigkeit im Zylinder deutlich geringer ist als in der Vorkammer. Dadurch treten mögliche Reproduzierfehler zwischen unterschiedlichen Messreihen⁴ deutlicher in Erscheinung. Trotzdem zeigt sich, dass ein höherer Druck tendenziell zu einer schnelleren turbulenten Flammenausbreitung im Zylinder führt. Grundlagenuntersuchungen in diesem Bereich bestätigen dieses Verhalten [77]. Erstaunlich ist allerdings, dass die Auswirkung des mageren Gemisches dadurch überkompensiert wird. Signifikante Unterschiede zwischen den Kraftstoffmischungen sind nicht ersichtlich.

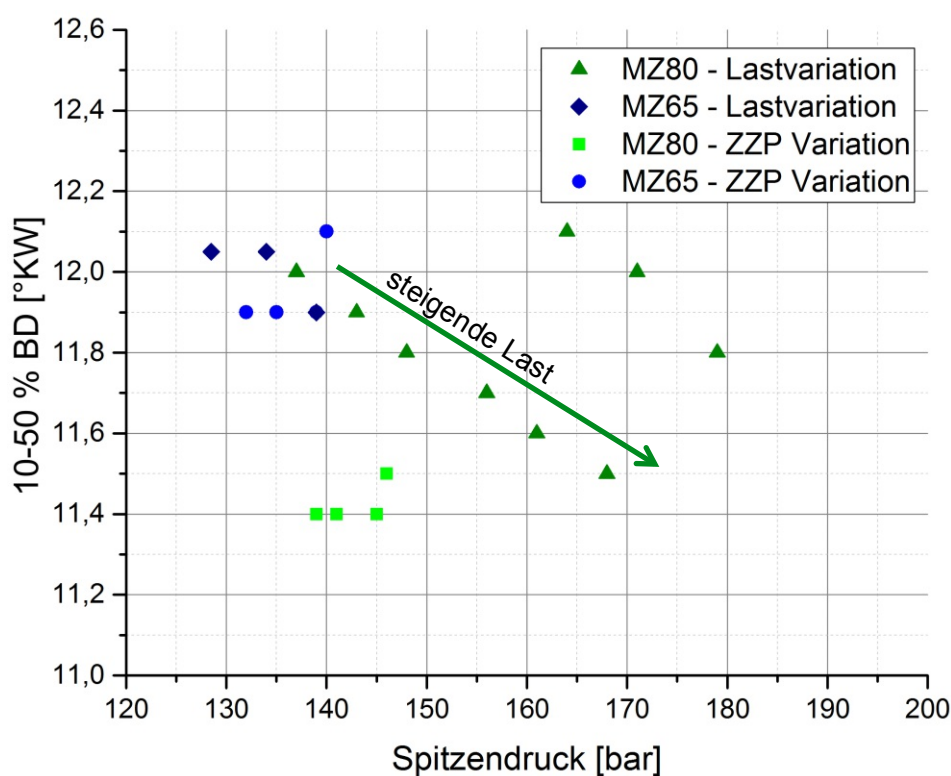


Abbildung 34: Brenngeschwindigkeit in Abhängigkeit des Spitzendrucks für unterschiedliche Lasten und Zündzeitpunkte

⁴ Diese können sich beispielsweise durch Umbauarbeiten am Versuchsmotor infolge unterschiedlicher Messreihen ergeben.

Als letzter Punkt der experimentellen Untersuchungen werden in [Abbildung 35](#) drei Betriebspunkte miteinander verglichen, um die Auswirkungen einer erhöhten Verdichtung (grüne Linie) und einer signifikanten Abmagerung (rote Linie) zu bewerten. Als Referenz dient ein Betriebspunkt aus der Messreihe „MZ65-Lastvariation“ mit vergleichbarer Last und ZZP (blaue Linie). Das erhöhte Verdichtungsverhältnis wurde durch eine flachere Kolbenmulde erreicht und die Abmagerung wurde entsprechend $TA\ Luft\ \frac{1}{2}$ (Halbierung der Emissionslimits von $TA\ Luft$; $0.25\ \text{g}/\text{Nm}^3_{5\%O_2}\ \text{NO}_x$ [74]) durchgeführt. Die Betriebsparameter sind in [Tabelle 7](#) zusammengefasst:

| | ϵ [-] | Saugrohrdruck [bar] | ϕ [-] | Kraftstoff | ZZP [°KWvZOT] | Pmi [bar] |
|--------------------------|-------------------|------------------------|---------------|------------|------------------|--------------|
| Flache Mulde | 13.4 | 3.9 | 0.553 | MZ65 | 28 | 23.0 |
| Tiefe Mulde | 12.4 | 3.8 | 0.558 | MZ65 | 28 | 22.5 |
| TA Luft 1/2 ⁵ | 13.4 | 4.25 | 0.547 | MZ65 | 28 | 23.6 |

[Tabelle 7](#): Betriebsparameter für Brennverfahrensuntersuchung

Die Verbrennungsphase, in der sich die Flamme frei ausbreitet, läuft bei beiden Verdichtungsverhältnissen ähnlich ab. Die Brenngeschwindigkeit in der Vorkammer und im Zylinder zeigt daher keine Sensitivität gegenüber dem Verdichtungsverhältnis. Ab $8\ \text{°KWnZOT}$ trifft die Flamme auf die Brennraumwände und der Brennverlauf nimmt dadurch ab. Für die flache Mulde tritt dieser Effekt früher und stärker in Erscheinung, wodurch eine langsamere Wandverbrennung in [Abbildung 35](#) ersichtlich ist.

Die Abmagerung infolge $TA\ Luft\ \frac{1}{2}$ führt vor allem zu einer verzögerten Verbrennung in der Vorkammer. Dadurch ergeben sich kleinere Fackeleindringtiefen in den Zylinder und die Flammenfaltung fällt geringer aus. Dies spiegelt sich in der flacheren Steigung der roten Linie im Bereich um ZOT wieder. Im weiteren Verlauf der Verbrennung werden die Unterschiede geringer und die Wandverbrennung läuft ähnlich ab wie bei der grünen Linie. Dieses Verhalten zeigt abermals die Sensitivität der Vorkammerverbrennung gegenüber einer Betriebsparametervariation und vervollständigt die vorangegangenen Untersuchungen.

⁵ Bei dieser Messung wurde entsprechend des Verdichtungsverhältnisses von 13.4 ebenfalls der Kolben mit der flachen Kolbenmulde verwendet.

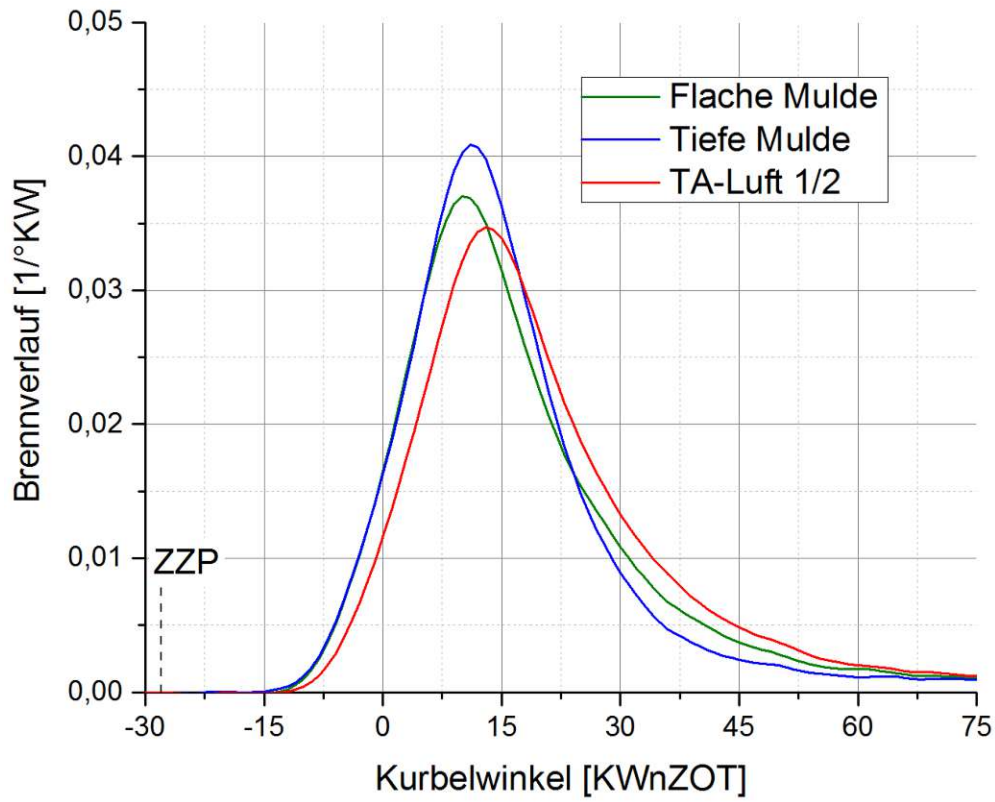


Abbildung 35: Heizverlauf für unterschiedliche Kolbenmulden und Emissionsgrenzwerte

5. Prädiktives Ladungswechselmodell

Entsprechend der vorangegangenen Überlegungen stellt ein klassisches Ladungswechselmodell die Basis für den gewünschten numerischen Entwicklungsansatz dar. Im Hinblick auf einen weiten Einsatzbereich muss das prädiktive Motormodell den mittleren Zyklus mit großer Genauigkeit wiedergeben. In diesem Kapitel werden daher das Ladungswechselmodell und die Modifikationen des eingesetzten prädiktiven Verbrennungsmodells beschrieben. Dafür werden einerseits die Erkenntnisse aus Kapitel 4 herangezogen, andererseits wird das Ladungswechselmodell anhand von 11 Betriebspunkten abgestimmt und validiert. Die Betriebsparameter sind in Tabelle 8 zusammengefasst und repräsentieren eine breite Variation des ZZP, der Last und der Kraftstoffmischung. Für die meisten Betriebspunkte wurde dabei das Äquivalenzverhältnis in Abhängigkeit der NO_x-Emissionen entsprechend *TA Luft* bzw. *TA Luft* ½ gesetzt. Die Kraftstoffmischung mit einer Methanzahl von 123 basiert auf der MZ65-Mischung, weist allerdings eine N₂-Beimischung von 78.5 Vol-% auf. Dadurch kann das Betriebsverhalten beim Einsatz von Schwachgasen bewertet werden.

| | ϕ [-] | Saugrohrdruck [bar] | ZZP [KW _n ZOT] | ε [-] | Methanzahl |
|------|---------------|------------------------|------------------------------|----------------------|------------|
| BP1 | 0.557 | 3.4 | -28 | 13.4 | 65 |
| BP2 | 0.554 | 3.9 | -28 | | |
| BP3 | 0.563 | 4.2 | -22 | | |
| BP4 | 0.566 | 4.0 | -22 | | |
| BP5 | 0.561 | 4.0 | -24 | | |
| BP6 | 0.690 | 4.0 | -30 | | 123 |
| BP7 | 0.547 | 4.2 | -28 | | 65 |
| BP8 | 0.543 | 4.2 | -30 | | |
| BP9 | 0.540 | 4.2 | -32 | | 12.4 |
| BP10 | 0.561 | 4.7 | -28 | | |
| BP11 | 0.561 | 5.0 | -28 | | |

Tabelle 8: Betriebspunkte für die Validierung des Motormodells

5.1. Beschreibung des 1D-Motormodells

In Abbildung 36 ist das 1D-Motormodell des Versuchsmotors wiedergegeben, welches größtenteils während des FFG-Projektes 815556 (Gasmotor der Zukunft) aufgebaut und anschließend modifiziert wurde. Dabei wurde die Software *AVL BOOST v2013.2* mit einigen Erweiterungen für den reibungslosen Einsatz der Reaktionskinetik verwendet. Ab

AVL BOOST v2014 sind diese zusätzlichen Pakete in der Standardinstallation enthalten. Das Ladungswechselmodell repräsentiert den gesamten Hochdruckbereich des Einzylinder-Versuchsmotors. Dazu zählen über 12 m Rohrlängen im Einlassbereich bis zum Kompressor und 10.5 m im Auslassbereich bis zur Drossel. Zur Vereinfachung wurde der Zylinderkopf als 2 Ventil-Variante abgebildet und entsprechend die Durchflussbeiwerte der Kanäle angepasst.

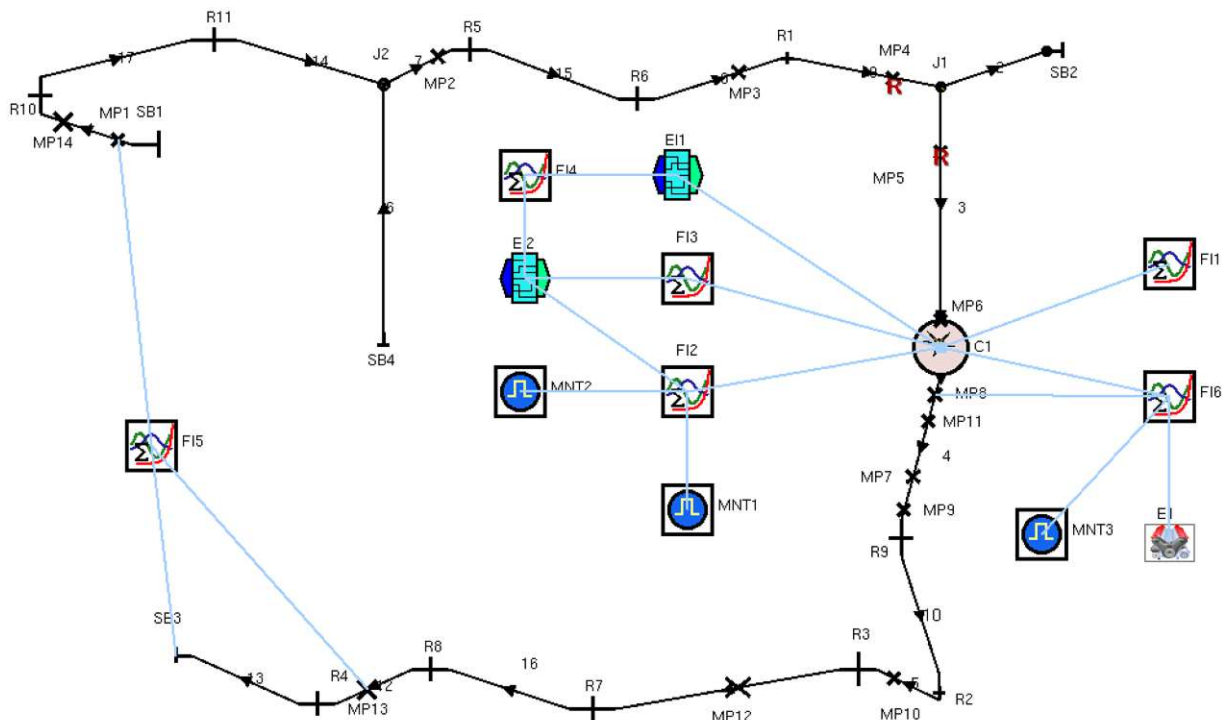


Abbildung 36: 1D-Simulationsmodell des Versuchsmotors

Es wurde eine Diskretisierungslänge von 100 mm verwendet und über weite Teile des Kurbelwinkelbereichs eine Courant-Zahl von 0.9. Während der Brennverzugszeit wurde die Courant-Zahl auf 0.1 und während der restlichen Verbrennung auf 0.25 reduziert. Dadurch wurde erreicht, dass der Start der Zylinderverbrennung durch kleinere Zeitschrittweiten besser aufgelöst wird.

Bereits im Kapitel 2.3.3 wurde erwähnt, dass keine expliziten Verbrennungsmodelle für Großgasmotoren mit Vorkammerzündkerze existieren. In [48] wurde weiters gezeigt, dass prädiktive Verbrennungsmodelle für PKW-Anwendungen (am Beispiels des *Fractal Combustion Model*) eine unzureichende Genauigkeit bei der mageren Verbrennung aufweisen. Speziell die beim ottomotorischen Brennverfahren wichtige Wandverbrennung, siehe [78], ist hierbei kritisch. Deshalb wurden in einem ersten Schritt unterschiedliche Verbrennungsmodelle für Großgasmotoren evaluiert. Dabei zeigte sich, dass Verbrennungsmodelle für direkt gezündete Gasmotoren, am Beispiel des *Open Chamber*

Gas Engine-Modells (OCGE) [44, 79], eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Brennverläufen aufweisen als Verbrennungsmodelle für Gasmotoren mit gespülter Vorkammer, am Beispiel des *Pre-Chamber Spark Ignited Gas Engine*-Modells (PCSI) [43, 79]. Dies kann auf das magere Gemisch in der Vorkammerzündkerze und dessen kleines Kammervolumen zurückgeführt werden. Dadurch ergeben sich im Vergleich mit gespülten Vorkammern moderate Fackeleindringtiefen in den Hauptbrennraum. Folglich nimmt die Flammenausbreitung im Brennraum im weitesten Sinne eine sphärische Form an. Diese Rückschlüsse ergaben sich einerseits durch die LES-Untersuchungen, siehe [Abbildung 21](#), und den Analysen der unterschiedlichen Verbrennungskonzepte in [Abbildung 9](#).

Das *OCGE*-Modell besteht grundsätzlich aus zwei Submodellen. Das erste Submodell beschreibt die Zündverzugszeit⁶ und das zweite Submodell die daran anschließende Flammenausbreitung im Zylinder. Es stellte sich heraus, dass beide Submodelle die jeweiligen experimentellen Beobachtungen für unterschiedliche Betriebspunkte unzureichend wiedergaben. Einerseits war das Zündverzugsmodell nicht in der Lage, den korrekten Brennbeginn im Zylinder zu modellieren und andererseits wurde die Abhängigkeiten der Brenngeschwindigkeit im Zylinder von der Last nicht wiedergegeben. Da die Ergebnisqualität der originalen Modellformulierung nicht den Anforderungen an das prädiktive Motormodell genügte, wurden einige Modellerweiterungen durchgeführt.

5.2. Adaptionen am prädiktiven Verbrennungsmodell

Neben der Genauigkeitsverbesserung war ein weiteres Ziel, das Brennverhalten von unterschiedlichen Kraftstoffmischungen genau abzubilden. Deshalb wurden die Modellgleichungen auf Basis der Untersuchungen in Kapitel 4 durch die adiabate Flammentemperatur T_{ad} und die laminaren Flammgeschwindigkeit s_l erweitert:

- Das Submodell für die Zündverzugszeit bestimmt den Brennbeginn im Zylinder und ist daher ein Maß für die 0-10 % BD. Die experimentellen Ergebnisse zeigten einen starken Zusammenhang mit dem ZZP, siehe [Abbildung 22](#). Die ursprüngliche Modellformulierung basiert auf einer Kombination zwischen *Arrhenius*- und *Magnuss*-Ansatz [44]. Sie wurde für eine direkte Zündung im Brennraum entwickelt und ist deshalb nicht in der Lage, die Abhängigkeit der Zündverzugszeit

⁶ Die berechnete Zündverzugszeit ist definiert als die Zeitspanne zwischen Zündung und berechnetem Verbrennungsbeginn im Zylinder.

wiederzugeben. Deshalb wurde ein empirischer Ansatz implementiert, bei dem die Zündverzugszeit (ignition delay time, ID_{CAD}) als Funktion des ZZZP gesetzt wurde (Gl. (3)):

$$ID_{CAD} = C_1 \cdot ZZZP \cdot sl^{C_2} \cdot T_{ad}^{C_3} \quad (3)$$

- Das Submodell für die Flammenausbreitung beschreibt den Brennverlauf im Zylinder. Während der Phase, in der sich die Flamme im Zylinder frei ausbreiten kann, wird dies durch den Ansatz nach [80] modelliert. Die wesentlichen Einflussfaktoren dabei sind die turbulente kinetische Energie tkE und die zur Verfügung stehende Kraftstoffmenge $m_{F,av}$, siehe Gl. (4).

$$\frac{dQ_F}{d\alpha} = C_{ROHR} \cdot \frac{\sqrt{tkE}}{\sqrt[3]{V_C}} \cdot m_{F,av} \cdot \frac{H_u}{\frac{d\alpha}{dt}} \quad (4)$$

Die turbulente kinetische Energie k wird durch eine Transportgleichung abgebildet. Die verfügbare Kraftstoffmenge $m_{F,av}$ während der freien Flammenausbreitung ist durch das Flammenvolumen $m_{F,f}$ gemäß Gl. (5) gegeben, wobei r_{ff} den Radius der halbkugelförmigen Flammenfront und s dessen Dicke bezeichnet.

$$m_{F,av} = m_{F,f} = 2 \cdot \pi \cdot r_{ff}^2 \cdot s \quad (5)$$

Die Ausdehnung der Flammenfront wird maßgeblich durch die turbulente Flammengeschwindigkeit v_{turb} bestimmt, die nach Gülder [81] in Gl (6) gegeben ist:

$$v_{turb} = v_{lam}^{0.5} \cdot \left(\frac{2}{3} \cdot tkE\right)^{0.375} \cdot \left(\frac{\sqrt[3]{V_C}}{v_u}\right)^{0.25} \quad (6)$$

Dabei wird die laminare Flammengeschwindigkeit v_{lam} für reines Methan entsprechend der Korrelation von Gülder [82] von der Simulationssoftware bestimmt, siehe Gl. (7):

$$v_{lam} = 0.422 \cdot \Phi^{0.15} \cdot \exp[-4.18 \cdot (\Phi - 1.075)^2] \cdot \left(\frac{T_u}{T_o}\right)^2 \cdot \left(\frac{p}{p_0}\right)^{-0.5} \quad (7)$$

Der Ansatz nach Gl. (4) führt theoretisch zu einer druckunabhängigen Brenngeschwindigkeit. Die Simulationsergebnisse zeigten allerdings eine leicht zunehmende Brenndauer mit steigendem Druck, was nicht in Übereinstimmung mit den experimentellen Untersuchungen aus Kapitel 4.3.1 bzw. der Literatur [77] ist. Deshalb wurde der Modellkonstante „Rate of Heat Release Constant“ (C_{ROHR}) in Gl. (4) als Funktion des Zylinderdrucks p_c gesetzt (Gl. (8)):

$$C_{ROHR} = C_4 \cdot p_c \cdot sl \Big|_{\substack{900K \\ 100bar}}^{C5} \cdot T_{ad}^{C6} \quad (8)$$

Um die Brenneigenschaften unterschiedlicher Gase wiederzugeben, wurden Gl. 3 und Gl. 8 durch die laminare Flammgeschwindigkeit sl und die adiabate Flammentemperatur T_{ad} erweitert. Diese wurden mit Hilfe der detaillierten Reaktionskinetik kraftstoffspezifisch ermittelt. Da Gl. (7) bereits eine Druck- und Temperaturabhängigkeit beinhaltet, wird die laminare Flammgeschwindigkeit im Zylinder bei konstanten Bedingungen berücksichtigt.

Im weiteren Verlauf der Verbrennung trifft die Flammenfront auf die Brennraumwand und die Formulierung der verfügbaren Kraftstoffmenge $m_{F,av}$ gemäß Gl. (5) verliert ihre Gültigkeit. Stattdessen wird ein zweistufiger Ansatz entsprechend Gl. (9) verwendet, bei dem linear zwischen der Kraftstoffmenge in der Flammenfront $m_{F,f}$ und der verbleibenden unverbrannten Kraftstoffmenge im Brennraum $m_{F,ub}$ approximiert wird [44].

$$m_{F,av} = \gamma_{FC} \cdot m_{F,f} + (1 - \gamma_{FC}) \cdot m_{F,ub} \quad (9)$$

Die Gewichtungsfunktion γ_{FC} ist durch Gl. (10) gegeben, und nimmt Werte zwischen 0 und 1 an.

$$\gamma_{FC} = \frac{1}{1 + e^{\frac{MFB - \mu_T}{P_T}}} \quad (10)$$

P_T und μ_T stellen Modellkonstanten dar. Um trotz vereinfachtem 0D-Ansatz die komplexen 3D-Effekte der Wandverbrennung abzubilden (nähere Informationen dafür siehe [Abbildung](#)

35) wurde die Modellkonstante P_T in Abhängigkeit des Verdichtungsverhältnisses ε gesetzt⁷, siehe Gl. (11):

$$P_T = C_7 + C_8 \cdot \varepsilon \quad (11)$$

Die zusätzlichen Modellkonstanten C_1 bis C_8 wurden anhand der Messergebnisse abgestimmt.

5.2.1. Berechnung der laminaren Flamme und Implementierung ins Ladungswechselmodell

Die Eigenschaften der laminaren Flamme wurden mit dem Reaktionskinetik-Solver *DARS v2.08* ermittelt. Anhand experimenteller Daten aus der Literatur [83] wurden passende Mechanismen validiert. Diese experimentellen Daten decken einen Temperaturbereich bis 400 K, einen Druckbereich bis 20 bar und eine Abmagerung bis zu einem Äquivalenzverhältnisse von 0.53 ab. Die beste Übereinstimmung zeigte der Mechanismus *AramcoMech 1.3* [84]. Dieser Mechanismus umfasst 1542 Reaktionen und 253 Spezies. Die Validierungsergebnisse sind in [Abbildung 37](#) wiedergegeben. Die Werte für die Flammengeschwindigkeit und -dicke wurden über den in *DARS* verfügbaren Standardausgabeweg ermittelt.

⁷ Die Variation des Verdichtungsverhältnisses wurde bei den experimentellen Untersuchungen über unterschiedliche Muldentiefen realisiert. Diese Randbedingung wird für die folgenden Untersuchungen übernommen.

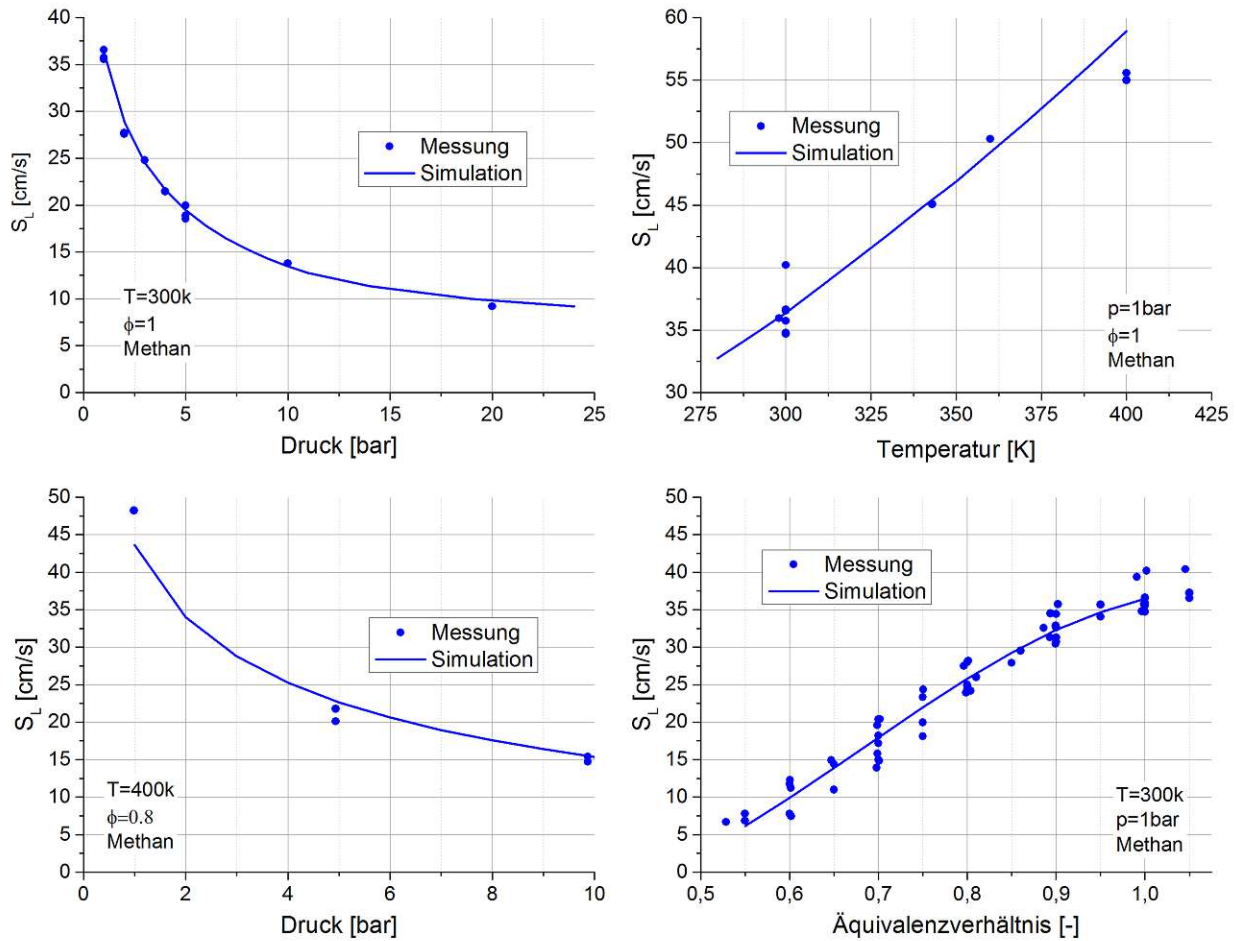


Abbildung 37: Validierung der berechneten laminaren Flammgeschwindigkeit (Reaktionsmechanismus: AramcoMech1.3)

Die berechneten laminaren Flammgeschwindigkeiten für die in der Modellvalidierung betrachteten Kraftstoffmischungen sind in [Abbildung 38](#) dargestellt.

Mithilfe der Reaktionskinetik wurde eine Datenbank für unterschiedliche Kraftstoffe erstellt. In Anlehnung an Metghalchi [85] wurden diese Datenbanken approximiert, siehe Gl. (12) bis Gl. (14):

$$S_L = C_{S1} \cdot \phi^{C_{S2}} \cdot T_u^{C_{S3}} \cdot p^{C_{S4}} \quad (12)$$

$$L_F = C_{L1} \cdot \phi^{C_{L2}} \cdot T_u^{C_{L3}} \cdot p^{C_{L4}} \quad (13)$$

$$T_{ad} = C_{Tad1} + \phi \cdot C_{Tad2} \quad (14)$$

Die Konstanten C_{S1-4} , C_{L1-4} und C_{Tad1-2} sind für unterschiedliche Kraftstoffmischungen im Anhang 11.1 gegeben. Der Ansatz für die Eigenschaften der laminaren Flamme wurde in das 1D-Motormodell implementiert.

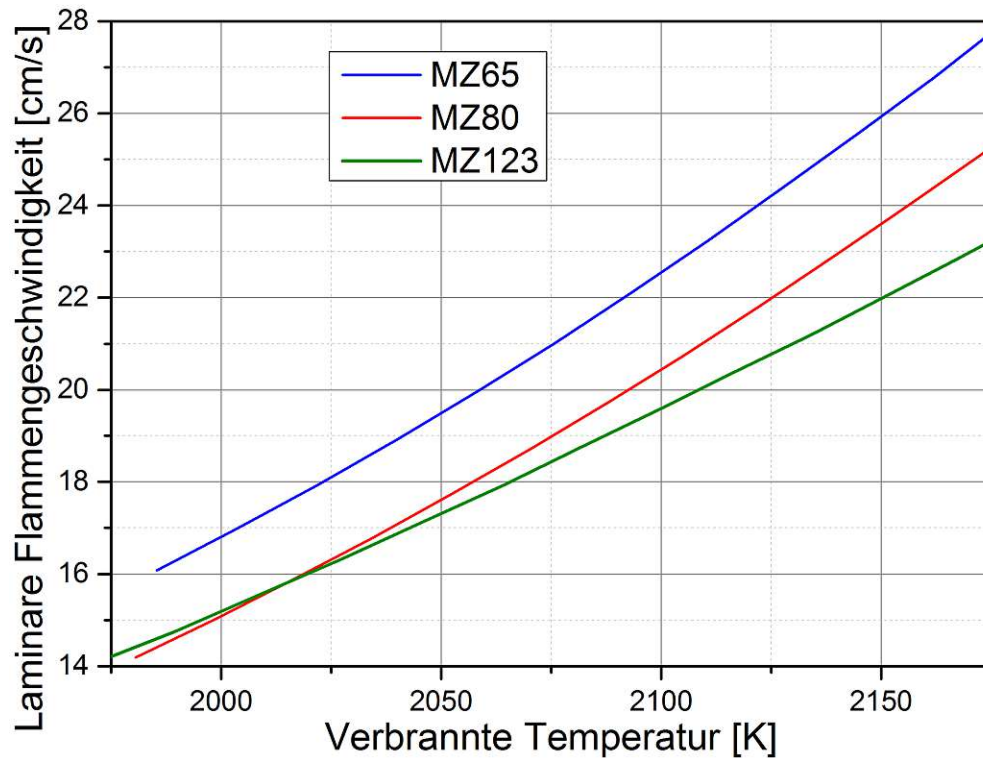


Abbildung 38: Laminare Flammgeschwindigkeit bei $T_u=900$ K und $p=100$ bar für unterschiedliche Kraftstoffe in Abhängigkeit der Temperatur im Verbrannten

5.3. Validierung anhand experimenteller Ergebnisse

Die Genauigkeit des modifizierten Verbrennungsmodells ist im Folgenden dargestellt. In [Abbildung 39](#) ist der berechnete Brennverlauf (10, 50 und 90 % Umsatzpunkt) und in [Abbildung 40](#) die berechnete Motorperformance (Mitteldruck, Spitzendruck und indizierter Wirkungsgrad) für 11 Betriebspunkte dargestellt. Die Betriebsparameter dieser Betriebspunkte sind in Tabelle 8 ersichtlich.

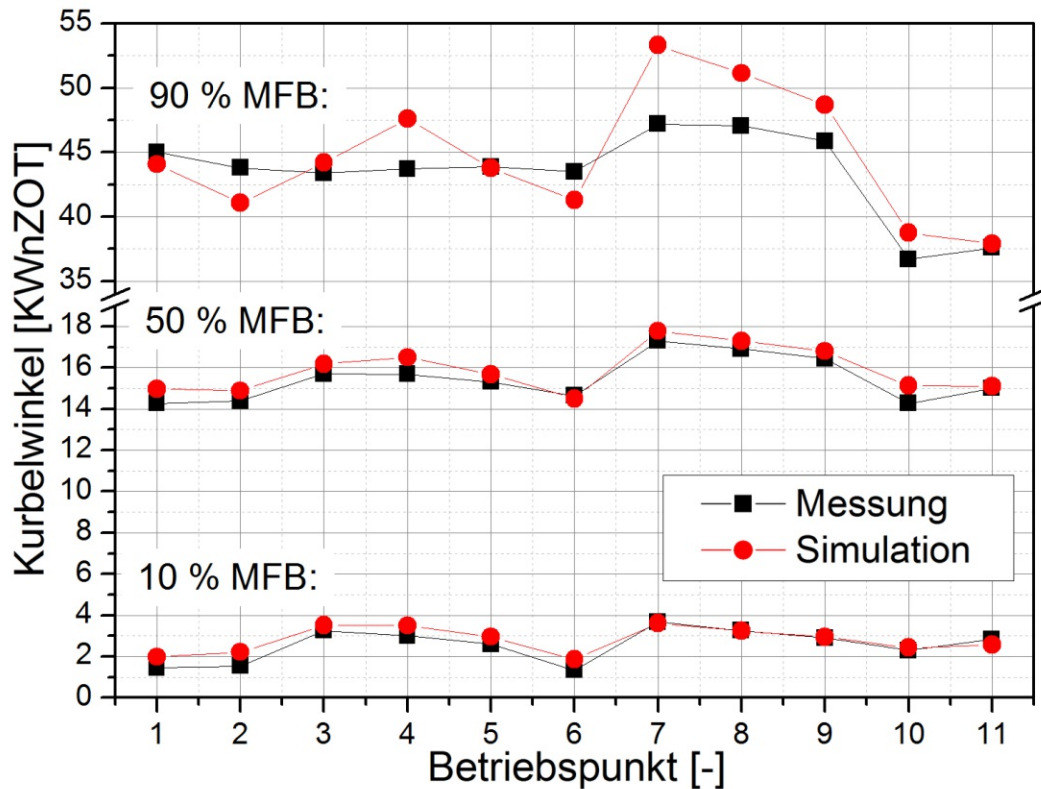


Abbildung 39: Validierung des berechneten Brennverlaufs für unterschiedliche Betriebspunkte

Es ist ersichtlich, dass das Verbrennungsmodell den mittleren Zyklus mit guter Genauigkeit beschreibt. Dabei ist es für unterschiedliche Ladedrücke, Zündzeitpunkte und Gemisch-Zusammensetzungen sensitiv und beschreibt den thermodynamischen Zustand im Zylinder in guter Übereinstimmung mit den Messungen.

Speziell der 10 % und der 50 % Umsatzpunkt korrelieren sehr gut mit den Messungen. Die Ergebnisse des 90 % Umsatzpunktes geben den experimentellen Trend ebenfalls wieder. Für die spätere Berechnung der klopfende Verbrennung und der Stickoxidbildung sollten diese kleinen Abweichungen von geringer Bedeutung sein.

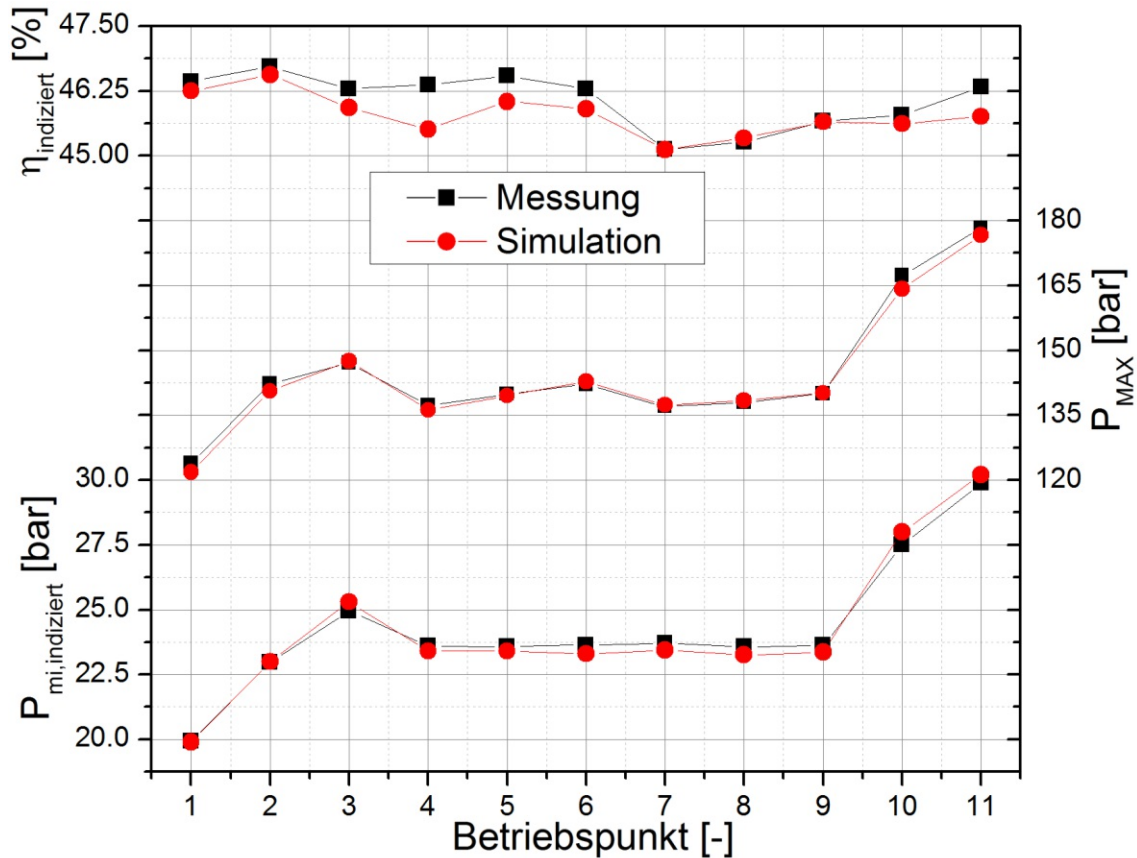


Abbildung 40: Validierung der berechneten Motorperformance für unterschiedliche Betriebspunkte

5.4. Erweiterung für unterschiedliche Miller-Zyklen

Frühe Schließzeiten des Einlassventils haben einen Einfluss auf den thermodynamischen Zustand im Zylinder und dadurch auf das Klopfverhalten und die Stickoxidemissionen [17, 86]. Deshalb wurde die Genauigkeit des 1D-Modells für die vier in [Abbildung 41](#) ersichtlichen Ventilhubkurven bewertet.

In [Abbildung 42](#) sind die Druckverläufe während der Ladungswechselschleife für zwei Miller-Zyklen gegenüber gestellt. Der Betriebspunkt Miller 480 weist ein Brennverfahren mit gespülter Vorkammer auf und wurde mit einem P_{mi} von 24,3 bar (entspricht einem Saugrohrdruck von 6,7 bar) bei $TA\text{-Luft } \frac{1}{2}$ betrieben. Miller 520 entspricht OP2 aus Tabelle 8. Die gute Übereinstimmung zwischen den gemessenen (durchgezogenen Linien) und berechneten Druckverläufen (strichlierte Linien) während des Ladungswechsels ist dabei gut erkennbar.

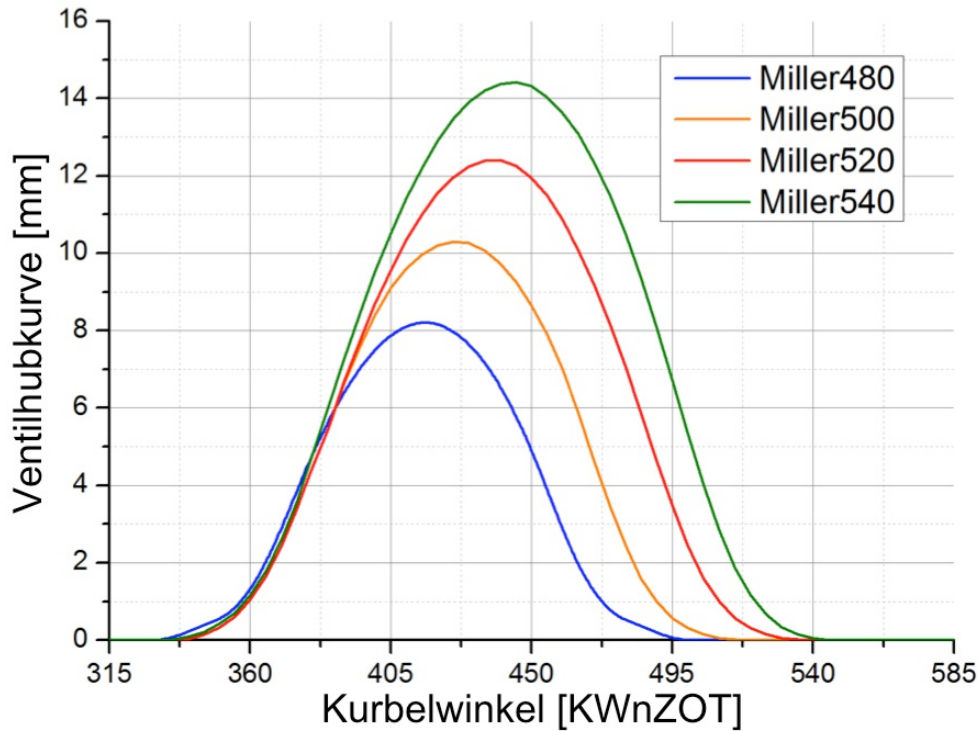


Abbildung 41: Ventilhubkurven der unterschiedlichen Miller-Zyklen

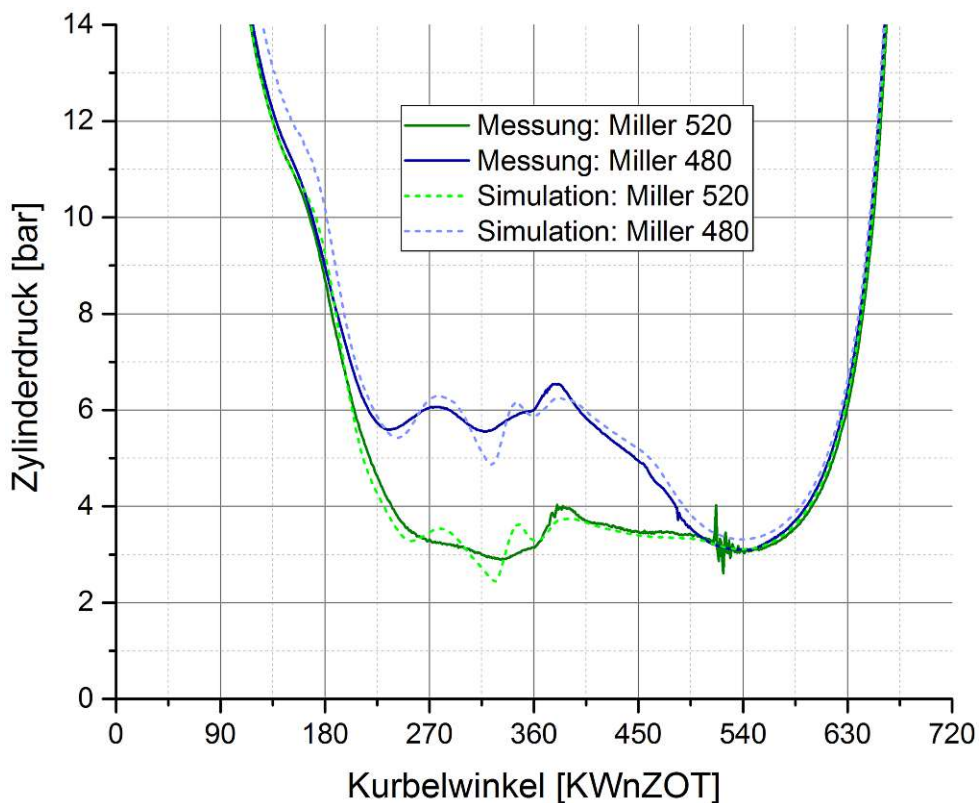


Abbildung 42: Validierung des Zylinderdrucks während der Ladungswechselschleife für zwei Miller-Zyklen

Da keine Messdaten für unterschiedliche Miller-Zyklen für das Brennverfahren mit passiver Vorkammerzündkerze vorhanden waren, wurde der Turbulenzverlauf des 1D-

Verbrennungsmodells anhand von 3D-CFD-Rechnungen abgestimmt. Wie bereits erwähnt, beschreibt beim 1D-Modell eine einfache Transportgleichung den Verlauf der turbulenten kinetischen Energie im Zylinder während der Verdichtung und Verbrennung [44]. Auf Basis dieses Turbulenzverlaufs wird die Verbrennungsgeschwindigkeit ermittelt, siehe Gl. (4) und (6). Dadurch stellt sie eine wichtige Größe des Verbrennungsmodells dar. Dabei wurde auf das RANS-Modell aus Kapitel 4.2.1 zurückgegriffen, mit abgeändertem Berechnungsnetz für unterschiedliche Steuerzeiten.

In Abbildung 43 ist der Vergleich zwischen 1D- und 3D-Modell ersichtlich. Während der Modellabstimmung zeigte sich, dass die Konstante „*initial turbulence level at intake valve closing*“ für jede Steuerzeit individuell gewählt werden muss. Im Gegensatz dazu ist die Transportgleichung des 1D-Modells in der Lage, den Turbulenzverlauf mit einem einheitlichen Parametersatz gut wiederzugeben. Speziell im Bereich der Verbrennung, 700 bis 750 KWnZOT, ist eine sehr gute Übereinstimmung ersichtlich.

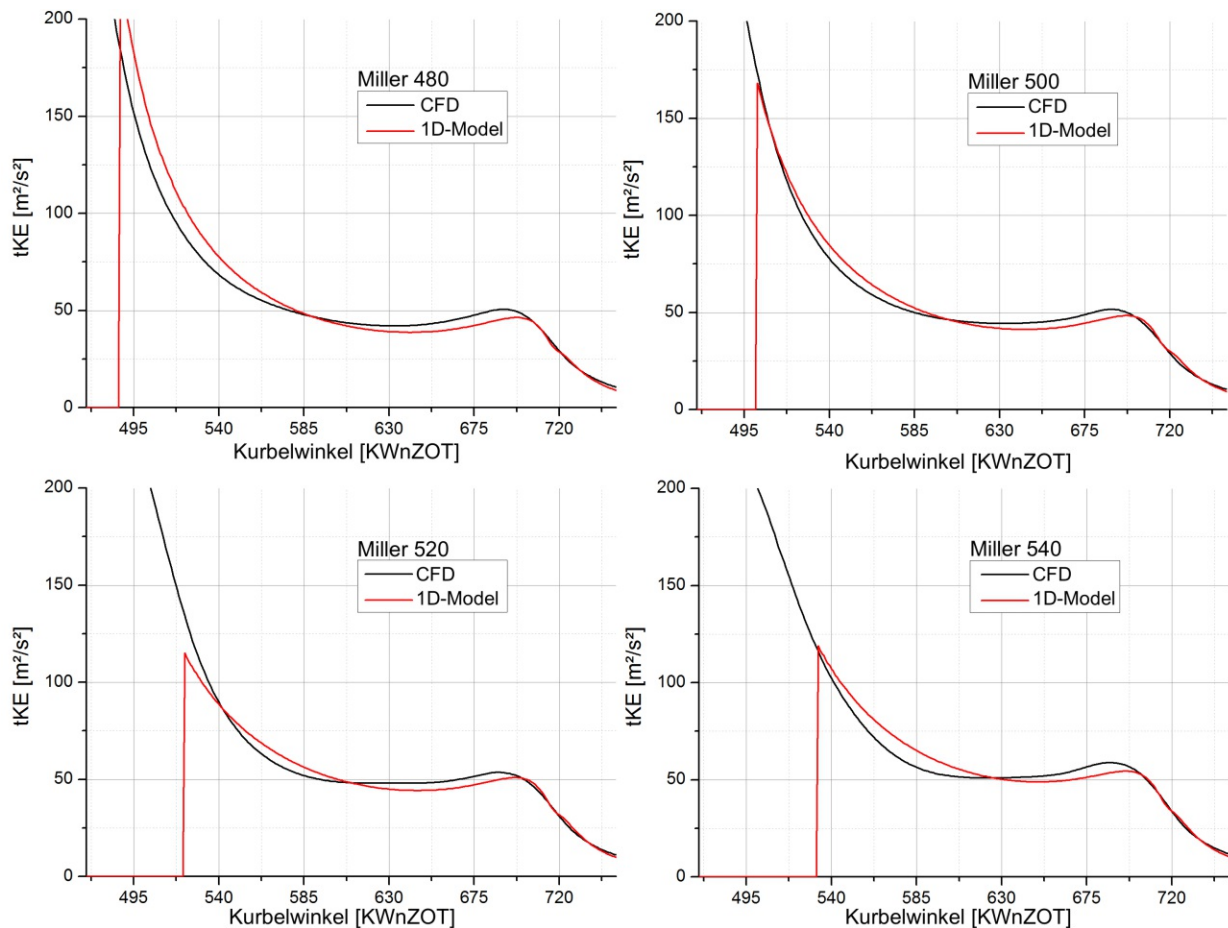


Abbildung 43: Validierung der turbulenten kinetischen Energie des 1D-Modells anhand von CFD-Simulation

6. Entwicklung des 0D-Zyklusschwankungsmodells

Aus der Literatur ist bekannt, dass die zyklischen Schwankungen das Klopfverhalten eines Betriebspunktes beeinflusst. Dabei sind Zyklen mit früher Verbrennungslage anfällig für eine klopfende Verbrennung, wohingegen der mittlere Zyklus meistens eine reguläre Verbrennung aufweist [54, 55]. Für die detaillierte Modellierung der klopfenden Verbrennung ist es deshalb notwendig, auch die zyklischen Schwankungen zu modellieren. Für die Erstellung eines Zyklusschwankungsmodells ist ein fundiertes Wissen über diesen Zusammenhang notwendig. Deshalb wurde mit dem Tool *GCA* von *AVL Concerto* eine zyklusaufgelöste Verbrennungsanalyse durchgeführt. In Abbildung 44 sind der 10 % und der 50 % Umsatzpunkt für 250 Zyklen eines klopfenden Betriebspunktes dargestellt. Die klopfenden Zyklen sind dabei farblich hervorgehoben. Ein deutlicher Zusammenhang zwischen früher Verbrennungslage und klopfender Verbrennung ist bereits für den 10 % MFB ersichtlich. Liegt für diesen Betriebspunkt der 10 % Umsatzpunkt vor ZOT, besteht eine hohe Wahrscheinlichkeit, dass der jeweilige Zyklus eine klopfende Verbrennung aufweist.

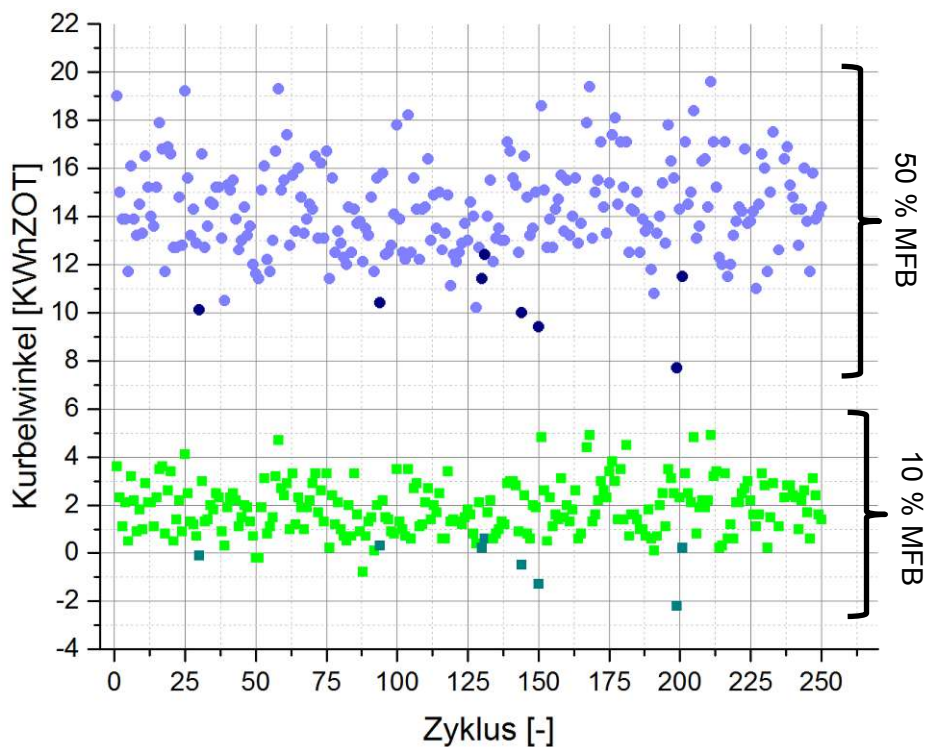


Abbildung 44: *Abhängigkeit zwischen zyklischen Schwankungen und klopfender Verbrennung (dunkle Punkte) anhand des 10 % MFB und des 50 % MFB*

Um den Zusammenhang zwischen zyklischen Schwankungen und Klopfverhalten aufzuzeigen, sind in Abbildung 45 die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (WDF) der 0-10 % Brenndauer für zwei Betriebspunkte relativ zum mittleren Zyklus dargestellt. Die beiden

Betriebspunkte repräsentieren jene Punkte mit den minimalen bzw. maximalen gemessenen zyklischen Schwankungen und unterscheiden sich im wesentlichen durch eine unterschiedlich starke Abmagerung, siehe Tabelle 8. Zusätzlich ist in Abbildung 45 ein Klopfindex eingeführt, der das zyklus aufgelöste Klopfverhalten in Abhängigkeit der Brennverzugszeit visualisiert. Ein Wert von 1 bedeutet, dass Zyklen mit dieser oder kürzerer Brennverzugszeit eine klopfende Verbrennung aufweisen. Ein Wert von 0 kennzeichnet eine reguläre Verbrennung. Der Bereich zwischen 0 und 1 ist eine Übergangszone, bei der sowohl klopfende als auch nichtklopfende Zyklen auftreten. Dadurch bestätigt sich, dass nur schnelle Zyklen eine klopfende Verbrennung aufweisen. Speziell die Wahl der Brennverzugszeit als Maß für die zyklischen Schwankungen führt zu einer deutlichen Abgrenzung zwischen regulärem und klopfendem Betrieb.

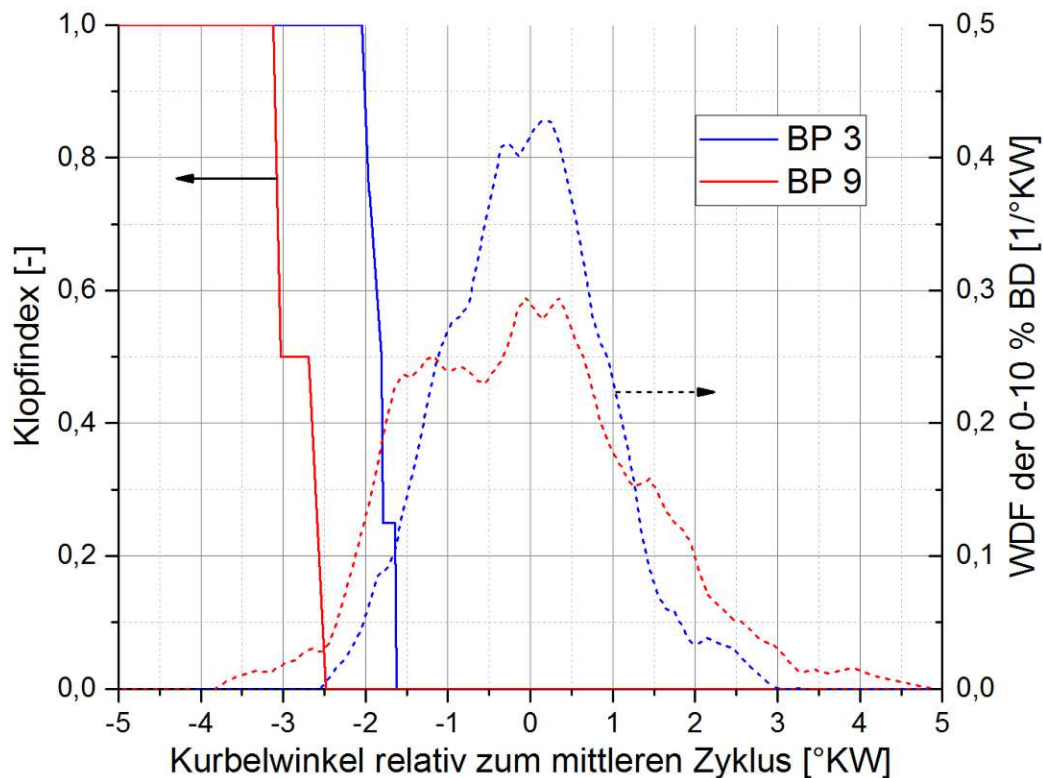


Abbildung 45: *Zusammenhang zwischen den zyklischen Schwankungen und der Klopfgrenze für zwei typische Betriebspunkte*

Die zwei dargestellten Betriebspunkte unterschieden sich bezüglich Klopfgrenze und zyklischen Schwankungen. Obwohl der mittlere Zyklus des BP9 einen größeren Abstand zur Klopfgrenze aufweist, verursachen die erhöhten zyklischen Schwankungen eine ähnliche Klopfneigung verglichen zu BP3. Infolge der detaillierten Klopfmodellierung mittels Reaktionskinetik ist es wichtig, diese Unterschiede durch ein Zyklusschwankungsmodell abzubilden.

6.1. Experimentelle Untersuchungen der zyklischen Schwankungen

Generell ist bekannt, dass der Verbrennungsschwerpunkt maßgeblich für den thermodynamischen Zustand im Zylinder ist. Er wird deshalb als jene Größe angesehen, die maßgeblich für die Selbstzündung ist. Um zu klären, warum bereits die Dauer der ersten Verbrennungsphase eine sehr große Korrelation mit der Selbstzündung besitzt, ist in [Abbildung 46](#) der Zusammenhang zwischen 10 % und 50 % Umsatzpunkt für 250 Zyklen dargestellt. Jeder Punkt repräsentiert dabei einen individuellen Zyklus.

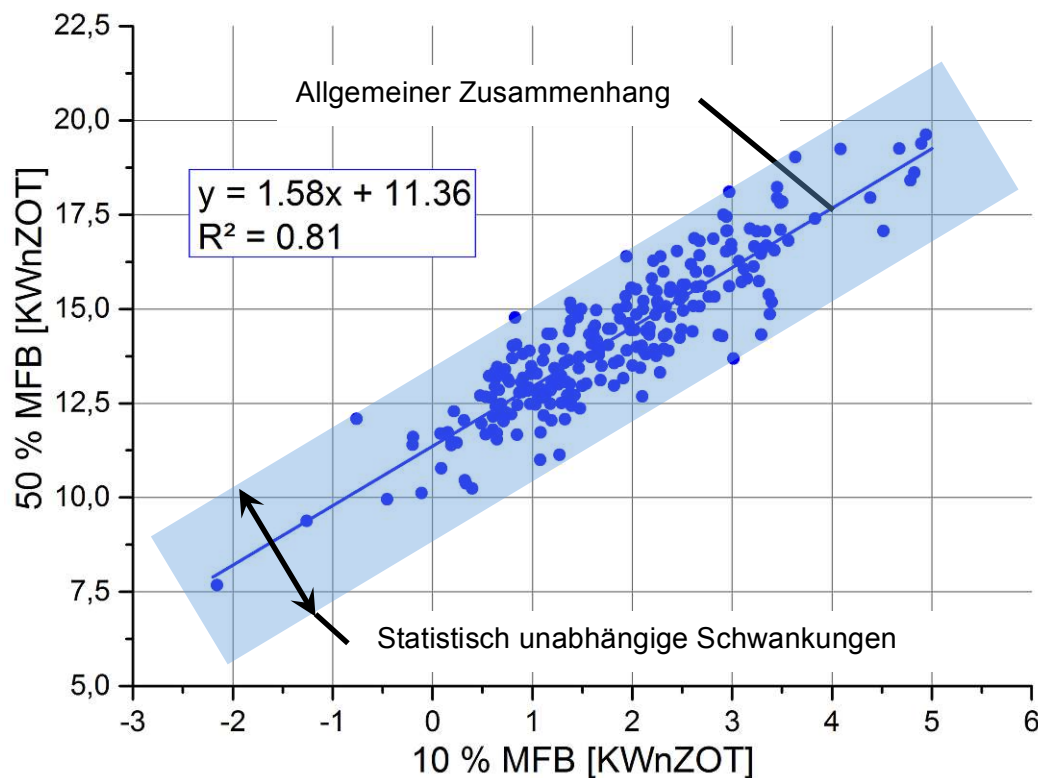


Abbildung 46: Analyse des Zusammenhangs zwischen dem 10 % und dem 50 % Umsatzpunkt für einen typischen Betriebspunkt (BP2)

Der Betrag der Ausgleichsgeradensteigung über 1 deutet dabei auf einen „Allgemeinen Zusammenhang“ zwischen schnellen Brennverzugszeiten und kurzen 10-50 % Brenndauern hin. Dieser Zusammenhang wurde bereits in Kapitel 4.2.3 durch die LES-Untersuchungen beobachtet und diskutiert.

Dem allgemeinen Zusammenhang sind „Statistisch unabhängige Schwankungen“ überlagert, die von der stochastischen Natur der turbulenten Strömung herrühren und durch das Bestimmtheitsmaß von 0.81 quantifiziert werden.

Beide Effekte stellen einen 2D-Raum der zyklischen Schwankungen dar, dessen genaue Modellierung zu einem großen numerischen Aufwand führen würde. Denn dieser 2D-Raum

benötigt zwei unabhängige Parameter, beispielsweise die Schwankungsbreite der Brennverzugszeit und die Schwankungen der 10-90% Brenndauer. Um alle möglichen Kombinationen dieser zwei unabhängigen Parameter zu berücksichtigen, müsste eine große Anzahl an Zyklen berechnet werden. Um ein effizientes Zyklusschwankungsmodell zu entwickeln, ist es daher zielführend, die zyklischen Schwankungen durch einen einzelnen Parameter abzubilden. Deshalb werden in [Abbildung 47](#) zwei vereinfachte Ansätze betrachtet:

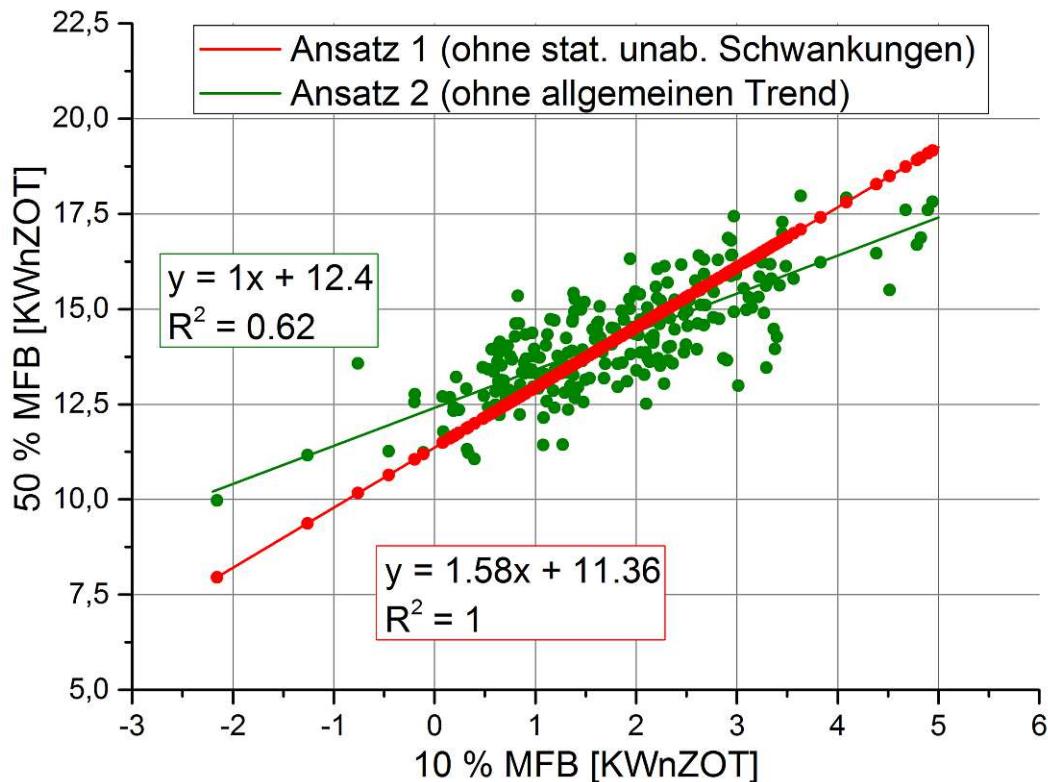


Abbildung 47: *Zwei Ansätze zur Vereinfachung des Zusammenhang zwischen 10 % und 50 % Umsatzpunkt*

- Ansatz 1 vernachlässigt die statistisch unabhängigen Schwankungen der 10-50 % BD. Dadurch ergibt sich ein eindeutiger Zusammenhang zwischen 10% MFB und Verbrennungsschwerpunkt. Die Ausgleichsgerade bleibt die Gleiche wie bei den experimentellen Daten, allerdings ergibt sich ein Bestimmtheitsmaß von eins.
- Bei Ansatz 2 wird der allgemeine Trend zwischen 10 % MFB und 50 % MFB herausgefiltert. Folglich ergibt sich eine Steigung der Ausgleichsgerade von eins. Das Bestimmtheitsmaß kleiner eins deutet an, dass nur die statistisch unabhängigen Schwankungen während der 10-50 % Brenndauer durch diesen Ansatz betrachtet werden.

Tabelle 9 gibt die Standardabweichung des Verbrennungsschwerpunktes für beide Ansätze wieder und vergleicht sie mit dem gemessenen Wert. Die zyklischen Schwankungen nehmen bei der Messung vom 10 % zum 50 % Umsatzpunkt um 0.9 °KW zu. Für Ansatz 1 ergibt sich ein Wert von 0.7 °KW und für Ansatz 2 von 0.3 °KW. Die Zunahme der gemessenen zyklischen Schwankungen können dadurch hauptsächlich auf den allgemeinen Zusammenhang zwischen Brenndauer und Brennverzugszeit laut Ansatz 1 zurückgeführt werden. Dadurch verdeutlicht sich der hohe Stellenwert der ersten Verbrennungsphase für die zyklischen Schwankungen. Ähnliche Untersuchungen anderer Betriebspunkte zeigten die gleichen Erkenntnisse. Die Modellierung der zyklischen Schwankungen der 0-10% BD mit dem empirischen Zyklusschwankungsmodell ist deshalb zielführend und wird im Weiteren beschrieben.

| | Standardabweichung |
|-------------------|--------------------|
| Messung: 10 % MFB | 1.1 °KW |
| Messung: 50 % MFB | 2.0 °KW |
| Ansatz 1: 50% MFB | 1.8 °KW |
| Ansatz 2: 50% MFB | 1.4 °KW |

Tabelle 9: Standardabweichung verschiedener Verbrennungsphasen

6.2. Modellierung der zyklischen Schwankungen

6.2.1. Methodischer Ansatz

Die Grundidee des hier präsentierten Zyklusschwankungsmodells ist es, den in Kapitel 2.3.4 erwähnten Ansatz auf Basis dimensionslose Kennzahl der Flammentheorie zu erweitern und für Großgasmotore anzupassen. Ziel ist dabei, die Schwankungsbreite der Brennverzugszeit mit einer dimensionslosen Kennzahl der Flammentheorie, siehe Gl. (1) und Gl. (2), auf Basis des mittleren Zyklus zu beschreiben. Die Kennzahl wird zum Zündzeitpunkt in der Vorkammer ausgewertet. Dafür ist die Ermittlung der chemischen und turbulenten Geschwindigkeits- bzw. Längenskalen in der Vorkammer notwendig.

6.2.2. Ableiten der Eingangsparameter des Zyklusschwankungsmodells

6.2.2.1. Geschwindigkeit- und Längenskalen der turbulenten Strömung

In Kapitel 4.2.2 wurde bereits gezeigt, dass die RANS-Rechnung das Strömungs- und Turbulenzfeld mit guter Genauigkeit wiedergibt. Deshalb wurden die turbulenten Größen in der Vorkammer im Folgenden mit diesem Modell ermittelt. Durch die moderaten Rechenzeiten der RANS-Rechnung ist zudem eine schnelle Anpassung des Zyklusschwankungsmodells an unterschiedliche Gasmotoren möglich.

In Abbildung 48 ist der Verlauf der turbulente Schwankungsgeschwindigkeit u' für einen typischen Betriebspunkt gegeben. Der prinzipielle Verlauf im Zylinder und in der Vorkammer wurde bereits anhand von Abbildung 16 diskutiert. Durch die kleinen Abmessungen der Vorkammer sind die Zeitskalen in der Vorkammer deutlich geringer als im Zylinder. Dadurch dissipiert die während des Einlasstaktes erzeugte Turbulenz bis zum Ende des Ansaugtaktes fast vollständig. Im Verlauf des Verdichtungstaktes wird Frischladung in die Vorkammer gedrückt, was eine erneute Turbulenzbildung zur Folge hat.

Anhand des integralen Längenmaßes l_t in Abbildung 49 kann die Größe der Turbulenzwirbel abgeschätzt werden. Diese wurde durch die Korrelation in Gl. (15) anhand der turbulenten kinetischen Energie tkE und der Dissipationsrate ε berechnet [22]:

$$l_t = c_1 \cdot \frac{tkE^{1.5}}{\varepsilon} \quad (15)$$

Die Konstante c_1 wurde mit dem in der Literatur üblichen Wert $(2/3)^{3/2}$ angenommen.

Zu Beginn des Verdichtungstaktes besitzen die Turbulenzwirbel im Zylinder eine sehr große Längenskala. Diese Wirbel werden durch den Kolben gestaucht und während der Verbrennung zeigt sich ein typischer Durchmesser von zirka 2 mm.

Im Gegensatz dazu zeigt sich in der Vorkammer ein annähernd konstanter Verlauf der Turbulenzskalen. Durch die geringe Baugröße der Vorkammer sind sie in der Größenordnung von 0.2 mm und damit um eine Potenz kleiner als im Zylinder.

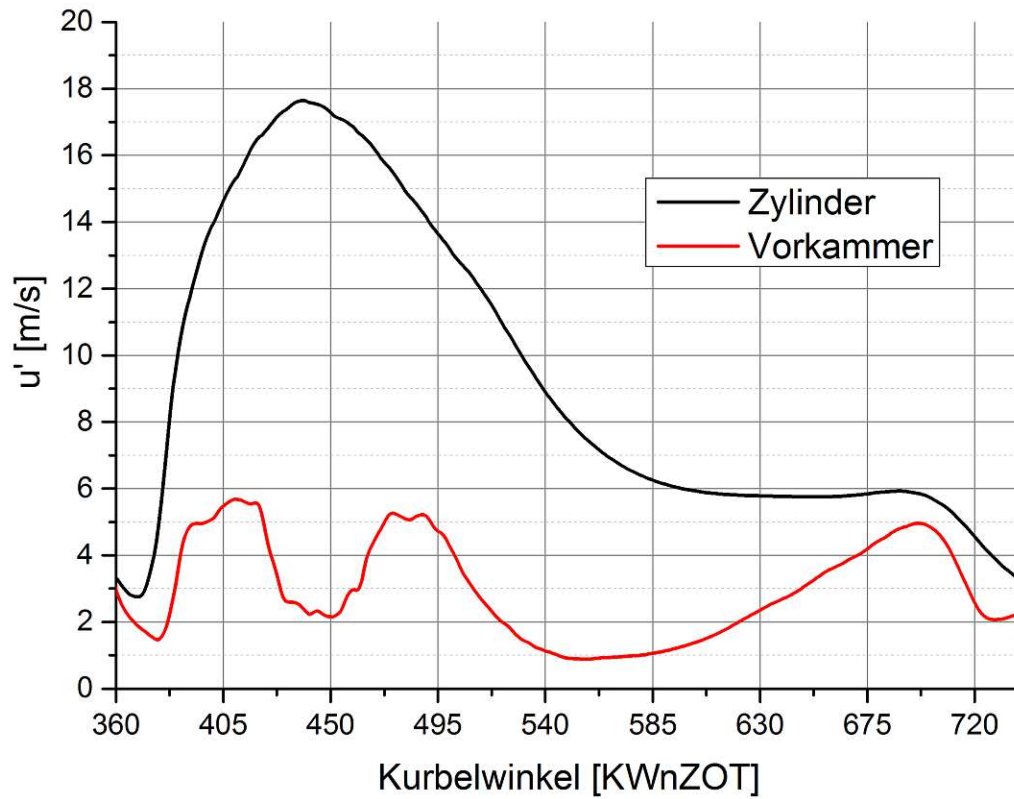


Abbildung 48: Zeitlicher Verlauf der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen im Zylinder und in der Vorkammer

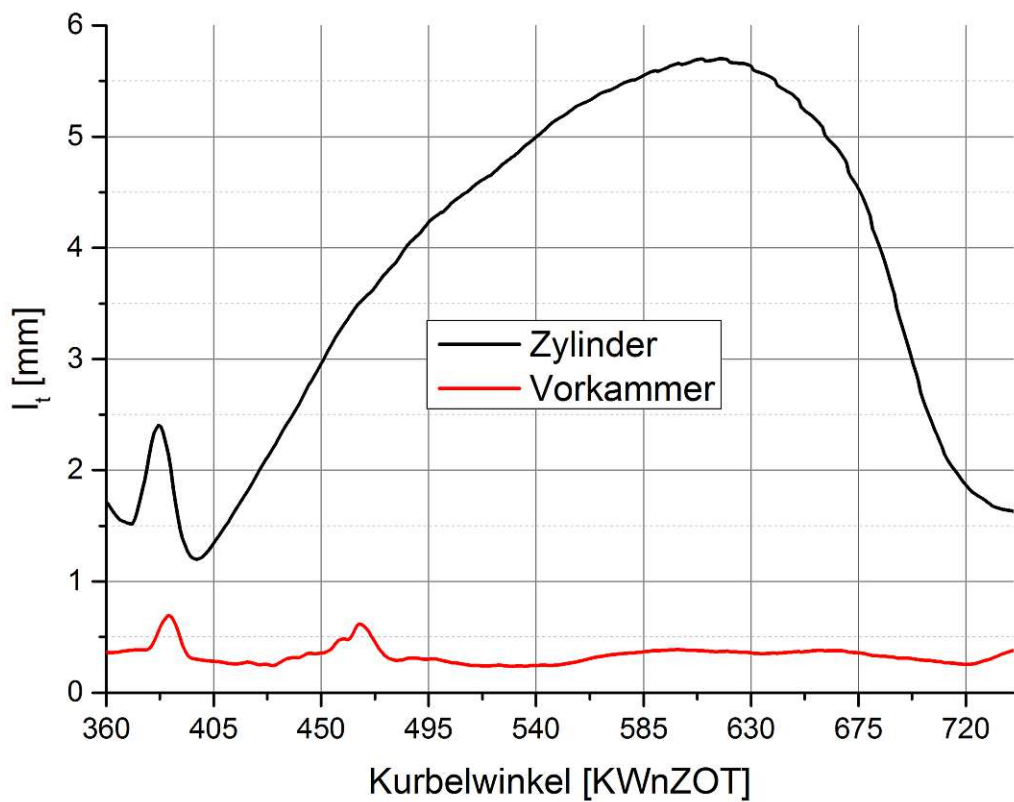


Abbildung 49: Zeitlicher Verlauf des integralen Längenmaßes im Zylinder und in der Vorkammer

Beide Turbulenzgrößen wurden im Bereich der Zündung für die Vorkammer durch einen Polynomansatz in Abhängigkeit des Kurbelwinkels approximiert und in das Ladungswechselmodell implementiert.

6.2.2.2. Geschwindigkeit- und Längenskalen der laminaren Flamme

Die laminare Flamme wurde mit detaillierter Reaktionskinetik berechnet, siehe Kapitel 5.2.1. Dessen Brenngeschwindigkeit und Dicke ist in [Abbildung 50](#) und [Abbildung 51](#) für motorrelevante Bedingungen gegeben. Dabei werden die Erkenntnisse aus [85] bestätigt, dass die laminare Flammengeschwindigkeit mit steigender Temperatur zunimmt, aber mit steigendem Druck abnimmt. Weiters reduziert sich die Brenngeschwindigkeit durch eine Abmagerung im Vergleich zu stöchiometrischen Bedingungen.

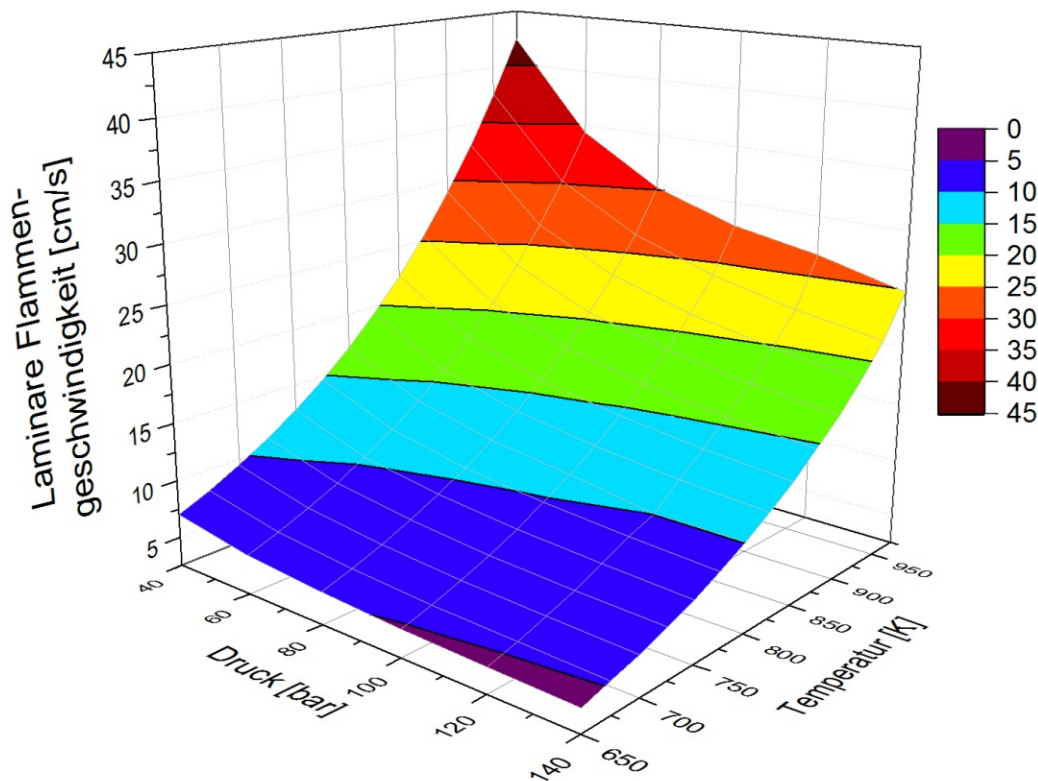


Abbildung 50: *Laminare Flammengeschwindigkeit für Kraftstoffmischung MZ80 bei einem Äquivalenzverhältnis von 0.55 und motorrelevanten Bedingungen*

Die laminare Flammendicke nimmt mit steigendem Druck und Temperatur ab. Eine Abmagerung führt gegenüber stöchiometrischen Bedingungen zu einer Zunahme der Dicke.

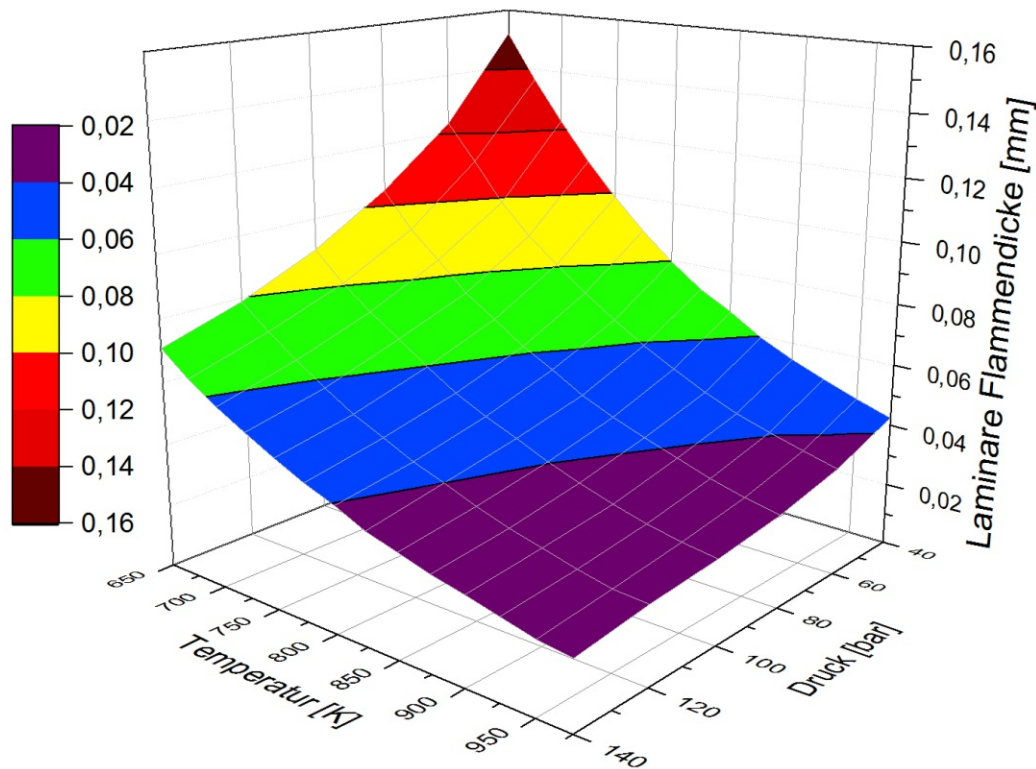


Abbildung 51: *Laminare Flammendicke für Kraftstoffmischung MZ80 bei einem Äquivalenzverhältnis von 0.55 und motorrelevanten Bedingungen*

Um die laminare Flamme in der Vorkammer zu berechnen, wurden die thermodynamischen Randbedingungen darin durch die CFD-Rechnungen ermittelt. In [Abbildung 52](#) sind die Dicke und Geschwindigkeit der laminaren Flamme im Bereich des Zündzeitpunktes für einen typischen Betriebspunkt mit MZ80 gegeben.

Verglichen mit dem Zylinder nimmt die laminare Flammengeschwindigkeit in der Vorkammer durch die erhöhte Temperatur zu. Weiters zeigt [Abbildung 52](#), dass während der Verdichtung die Temperaturabhängigkeit die Druckabhängigkeit überkompensiert und die laminare Flammengeschwindigkeit ansteigt. Weiters ist die starke Abnahme der laminaren Flammendicke während der Verdichtung ersichtlich, die eine Folge der Temperatur und Druckabhängigkeit ist.

Der Ansatz zur Implementierung der laminaren Flamme ins Ladungswechselmodell wurde bereits in Kapitel 5.2.1 vorgestellt, siehe Gl. (12) und Gl. (13).

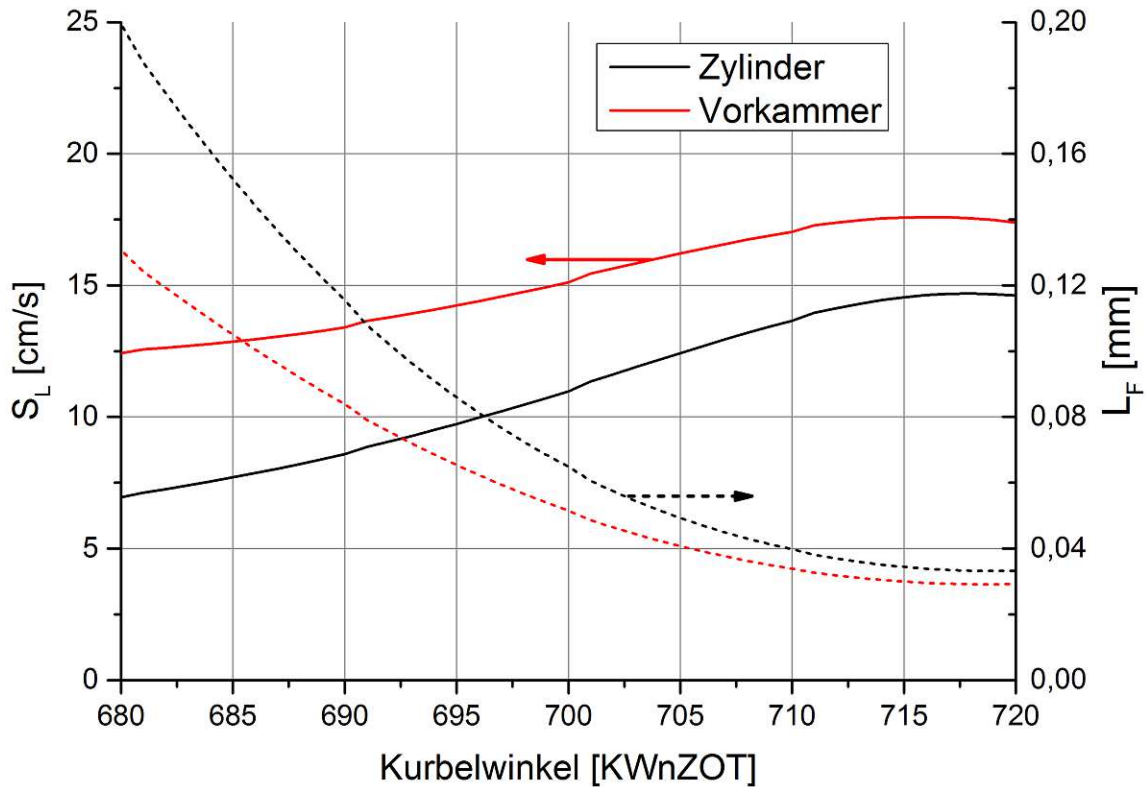


Abbildung 52: Zeitlicher Verlauf der laminaren Flammgeschwindigkeit (s_l) und der laminaren Flammendicke (δl) im Zylinder und in der Vorkammer

6.2.3. Ableiten des Zyklusschwankungsmodells

Nachdem die Kenngrößen der Flammentheorie im Bereich des Zündzeitpunktes ermittelt wurden, wird die turbulente Flamme anhand des Borghi-Peters-Diagramms in [Abbildung 53](#) charakterisiert. Um das Diagramm in unterschiedliche Regime der turbulenten Flamme einzuteilen, sind charakteristische Karlovitz- und Damköhler-Zahlen eingezeichnet. Nähere Informationen zu deren Bedeutung können in der Literatur gefunden werden [22, 87].

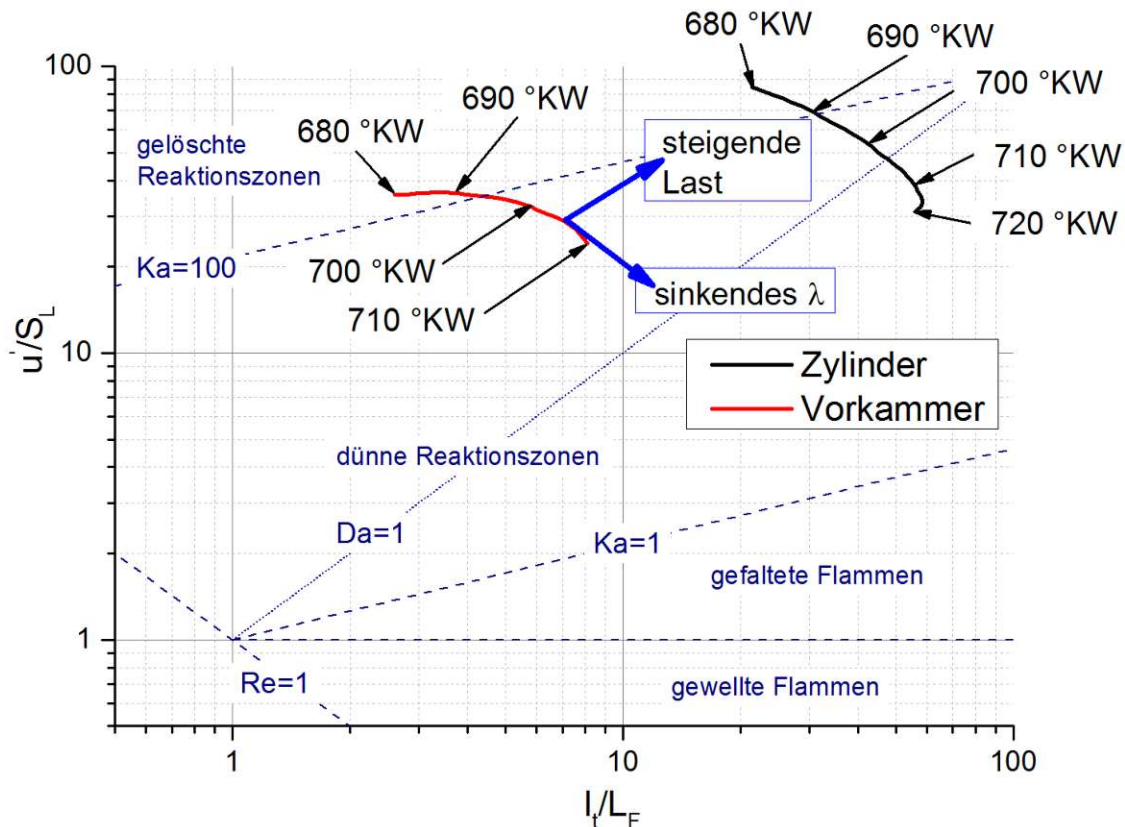


Abbildung 53: Charakterisierung der turbulenten Flamme im Borghi-Peters-Diagramm eines typischen Betriebspunktes

Sowohl die Verbrennung in der Vorkammer als auch im Zylinder weisen sehr hohe Karlovitz-Zahlen von ungefähr 100 auf. Der Unterschied zwischen beiden Flammen ist durch die Längenskalen gegeben. Dabei sind die kleinen Turbulenzwirbel in der Vorkammerzündkerze für die Stabilität des Vorkammer-Brennverfahrens verantwortlich. Weiters ist in [Abbildung 53](#) der Einfluss unterschiedlicher Betriebsparameter auf die Verbrennung angedeutet. Höhere Lasten verschieben die Position im Borghi-Peters-Diagramm nach rechts oben, höhere Äquivalenzverhältnisse und spätere ZZZP nach rechts unten.

Um einen Zusammenhang zwischen der Position im Borghi-Peters-Diagramm und den zyklischen Schwankungen zu finden, wurden alle 44 Betriebspunkte zum Zündzeitpunkt in der Vorkammer ausgewertet und in [Abbildung 54](#) eingetragen. Dabei kennzeichnet jeder Punkt einen individuellen Betriebspunkt und die gemessenen zyklischen Schwankungen der 0-10 % Brenndauer sind über die Farbe gekennzeichnet.

Durch diese Darstellung ist ein Zusammenhang zwischen Position und zyklischen Schwankungen ersichtlich: Betriebspunkte mit großen zyklischen Schwankungen sind in der linken oberen Ecke angesiedelt, Betriebspunkte mit geringen Schwankungen rechts unten.

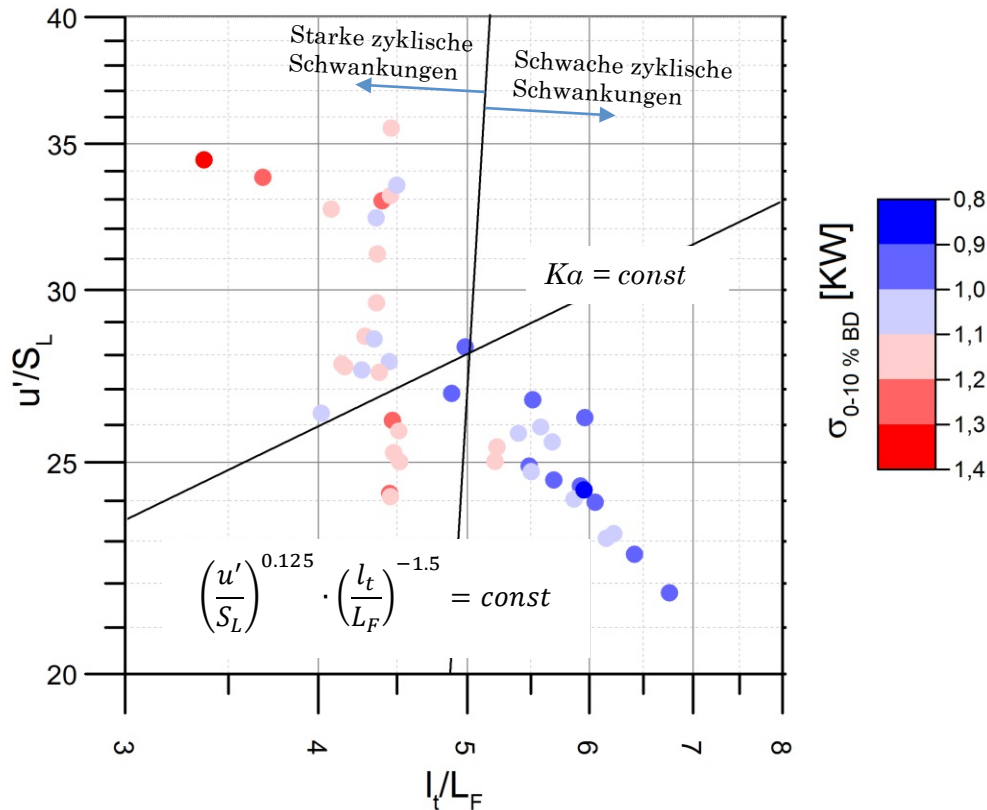


Abbildung 54: Zusammenhang zwischen $\delta_{0-10\% BD}$ und der Position im Borghi-Peters-Diagramm für 44 Betriebspunkte (jeder Punkt repräsentiert einen Betriebspunkt, die Farbe gibt die gemessenen zyklischen Schwankungen wieder)

Die Grundidee des Zyklusschwankungsmodells ist es, die zyklischen Schwankungen der Brennverzugszeit durch eine dimensionslose Kennzahl der Flammentheorie (*DKFT*) zu beschreiben. Eine dimensionslose Kennzahl ist in allgemeiner Schreibweise durch Gl. (16) angegeben:

$$DKFT = \left(u'/S_L\right)^\alpha \cdot \left(l_t/L_F\right)^\beta \quad (16)$$

Die beste Korrelation zwischen gemessenen zyklischen Schwankungen und *DKFT* wurde für ein α von 1/8 und ein β von -3/2 erreicht. Eine Linie mit dieser Steigung ist zusätzlich in [Abbildung 54](#) eingetragen.

[Abbildung 55](#) zeigt die Übereinstimmung zwischen abgeleiteter *DKFT* und gemessenen zyklischen Schwankungen. Dabei ergibt sich eine Genauigkeit von 0.1 °KW. In Anbetracht einer experimentellen Reproduzierbarkeit von 0.05 °KW ist die Genauigkeit des Zyklusschwankungsmodells damit sehr zufriedenstellend.

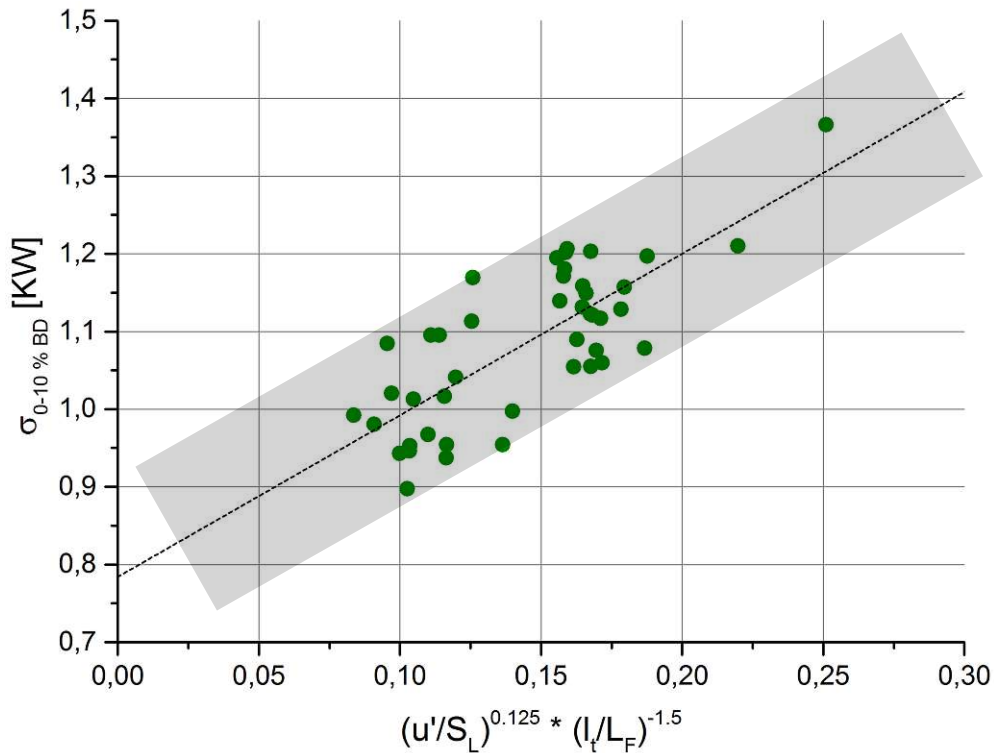


Abbildung 55: Vergleich zwischen gemessenen $\delta_{0-10\% \text{ BD}}$ und abgeleiteter *DKFT* für 44 Betriebspunkte

6.2.4. Implementierung des Zyklusschwankungsmodells ins 1D-Motormodell

Durch das Zyklusschwankungsmodell können die zyklischen Schwankungen in Abhängigkeit der Last, des Zündzeitpunkts, der Gemischzusammensetzung und des Kraftstofftyps berechnet werden. Um die Implementierung ins 1D-Motormodell zu verdeutlichen, ist in [Abbildung 56](#) der Simulationsablauf für BP 5 dargestellt:

1. Vergleichbar mit einer klassischen Ladungswechselrechnung werden anfänglich 40 Zyklen bis zum konvergierten Zustand berechnet. Auf Basis des konvergierten mittleren Zyklus werden die charakteristischen chemischen und turbulenten Längen- und Geschwindigkeitsskalen bestimmt.
2. Mithilfe dieser Daten berechnet das Zyklusschwankungsmodell die *DKFT* und in weiterer Folge die Standardabweichung der 0-10 % Brenndauer ($\delta_{0-10\% \text{ BD}}$).
3. Basierend auf Punkt 2 werden weitere Zyklen mit adaptierter Zündverzugszeit berechnet. Dabei wird die Zündverzugszeit ID_{CAD} , siehe Kapitel 5.2, für schnelle Zyklen um Vielfache der $\delta_{0-10\% \text{ BD}}$ reduziert bzw. für langsame Zyklen entsprechend verlängert.

In [Abbildung 56](#) wurden beispielsweise drei schnelle und drei langsame Zyklen berechnet. Der Schnellste (bzw. Langsamste) beschreibt eine drei Sigma schnelle (bzw. langsame) Verbrennung. Der Abstand zwischen den einzelnen Zyklen wurde mit einem Sigma gewählt.

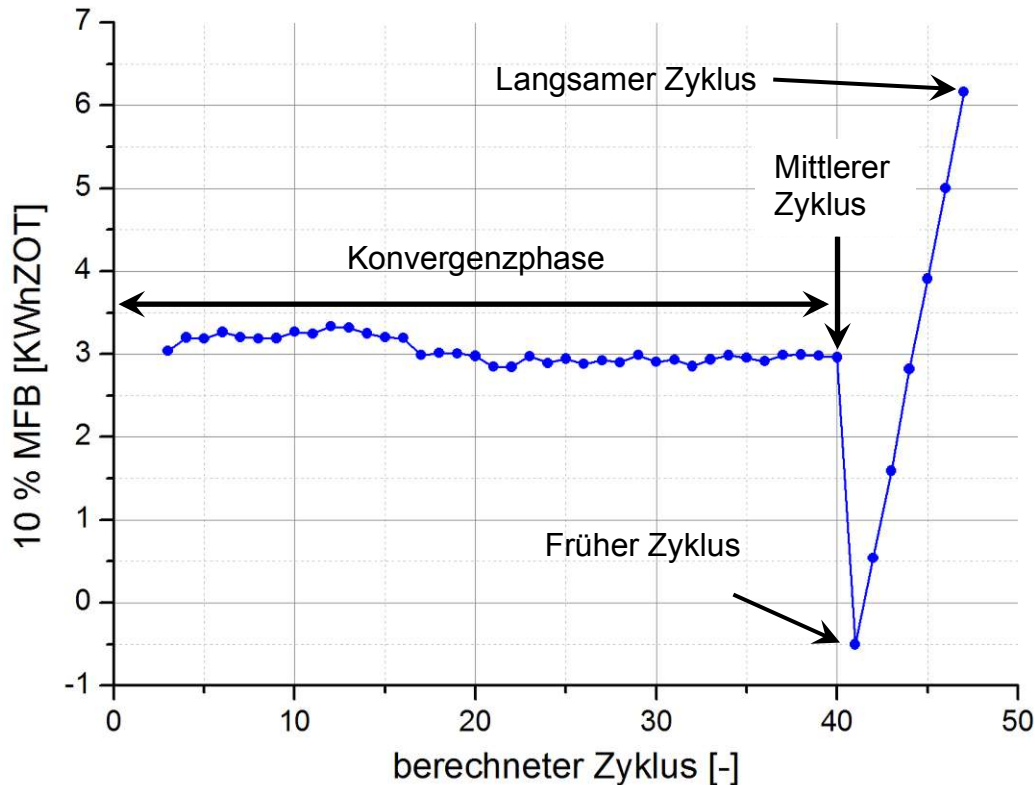


Abbildung 56: *Simulationsablauf des 1D-Modells inklusive zyklischer Schwankungen*

6.3. Validierung anhand experimenteller Ergebnisse

Durch die Wahl der dreifachen Standardabweichung werden theoretisch 99.7 % der zyklischen Schwankungen abgebildet. [Abbildung 57](#) zeigt einen Vergleich der gemessenen und berechneten zyklischen Schwankungen für BP 5. Weiters ist anhand [Abbildung 58](#) ersichtlich, dass die Methodik in der Lage ist, den „Allgemeinen Zusammenhang“ nach Ansatz 1 korrekt für BP5 wiederzugeben. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Schwankungen der ersten Verbrennungsphase durch das Zyklus-schwankungsmodell vorgegeben werden. Das prädiktive Verbrennungsmodell modelliert im Weiteren die veränderte Brenngeschwindigkeit. Im Anhang 11.2 ist ersichtlich, dass diese Übereinstimmung für mehrere Betriebspunkte gegeben ist.

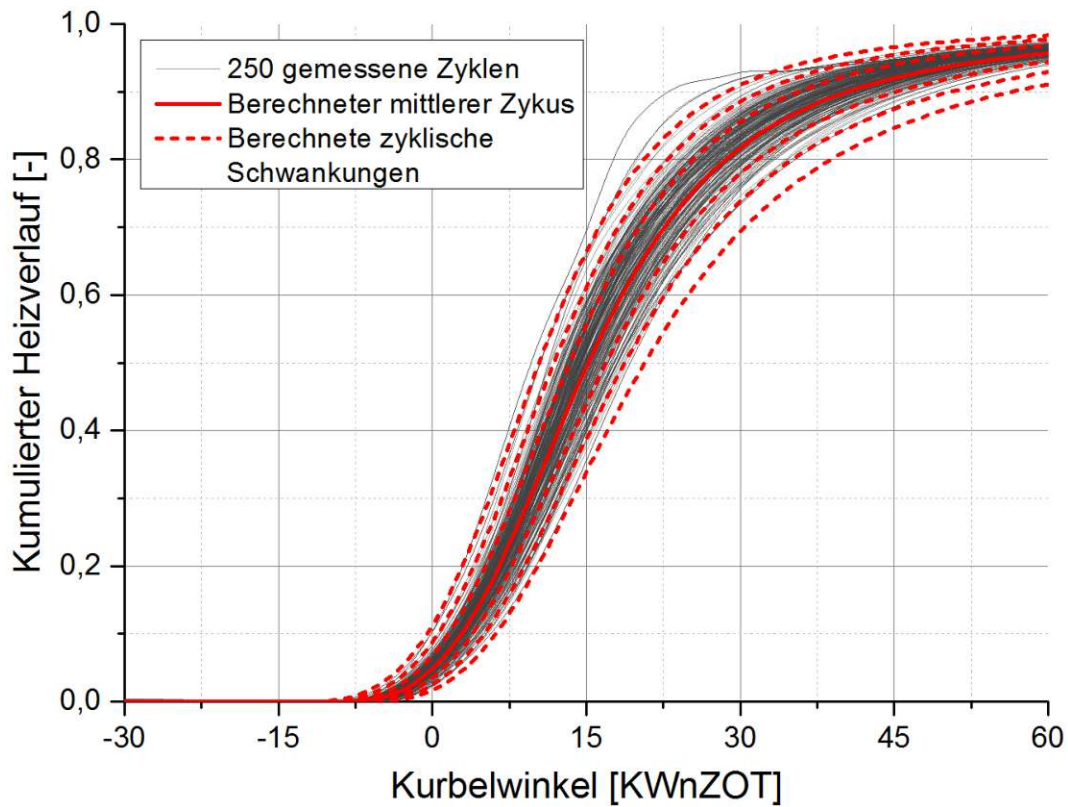


Abbildung 57: Vergleich der berechneten und gemessenen zyklischen Schwankungen anhand BP5; die Berechnung gibt einen Schwankungsbereich von -3 bis +3 Sigma wieder

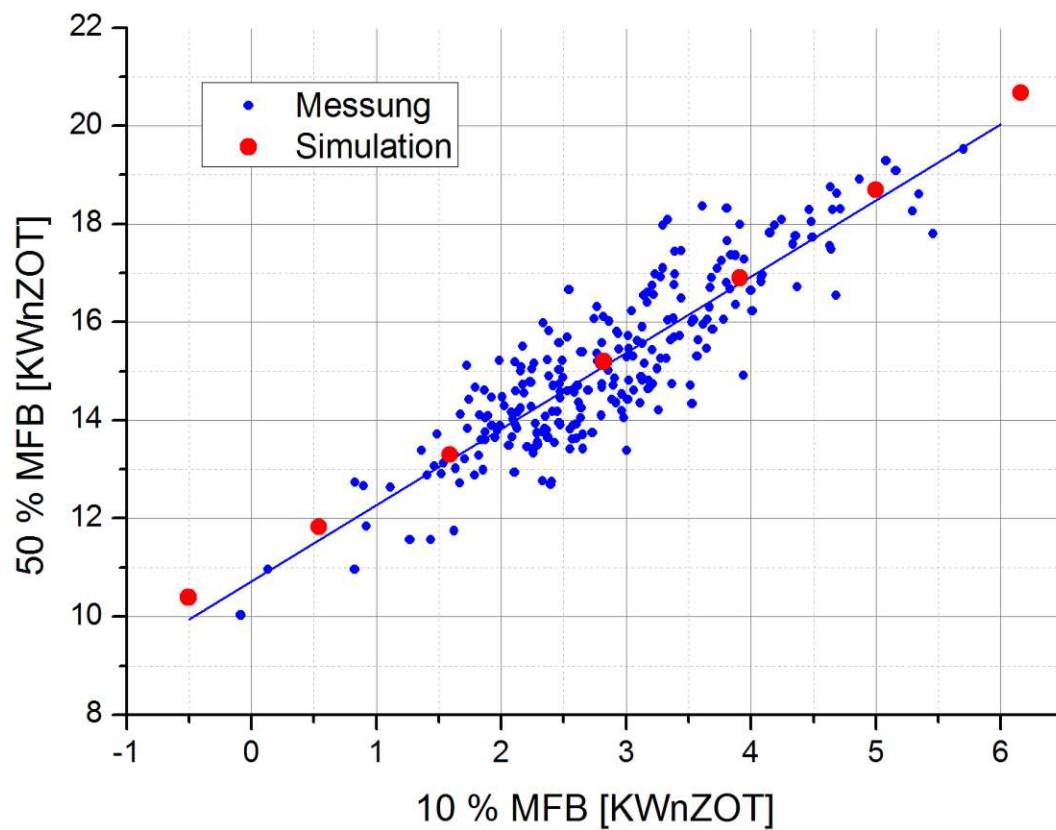


Abbildung 58: Wiedergabe des „allgemeinen Trends“ durch das Zyklusmodell für BP5

Abbildung 59 zeigt die Genauigkeit des Zykluschwankungsmodells für 11 Betriebspunkte. Dadurch ist das prädiktive Motormodell in der Lage, zwischen Betriebspunkten mit starken oder schwachen zyklischen Schwankungen zu differenzieren. Dies ist für die Klopfmodellierung wichtig. Gleichzeitig ist durch die Wahl der 0-10 % BD als wesentlicher Parameter gegeben, dass die zyklischen Schwankungen effizient durch wenige bzw. einen einzelnen schnellen Zyklus statistisch abgebildet werden.

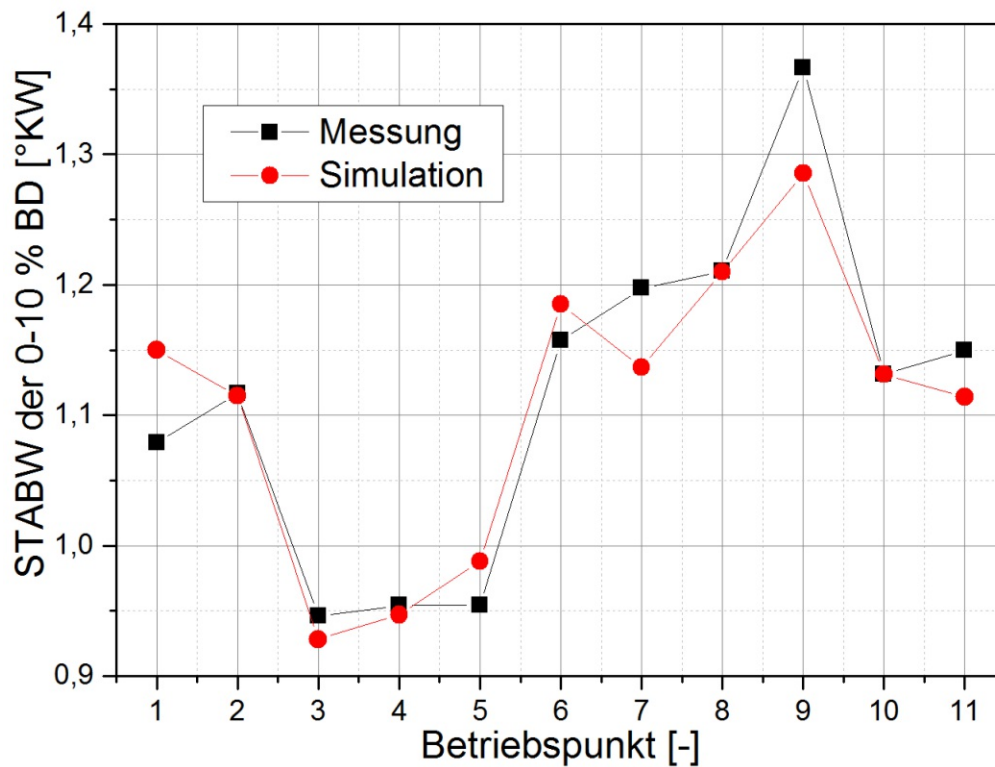


Abbildung 59: Validierung der berechneten zyklischen Schwankungen anhand 11 Betriebspunkten

7. Modellierung der kinetisch kontrollierten Prozesse

Auf Basis der thermodynamischen Randbedingungen eines schnellen Zyklus kann die klopfende Verbrennung mit detaillierter Reaktionskinetik berechnet werden. Im Folgenden werden die klopfende Verbrennung und die Stickoxidbildung mit einem stochastischen Reaktormodell untersucht. Dabei werden passende Reaktionsmechanismen für die kinetisch kontrollierten Prozesse validiert und adaptiert. Als letzter Punkt wird die Reaktionskinetik ins prädiktive Ladungswechselmodell implementiert und eine Validierung für 11 Betriebspunkte durchgeführt.

7.1. Methodik

In der Literatur wurde bereits gezeigt, dass heiße Bereiche in der unverbrannten Zylinderladung die Selbstzündung einleiten und deshalb diese Inhomogenitäten im Temperaturfeld das Klopfverhalten beeinflussen [88, 89]. Stochastische Reaktormodelle (SRM) sind in der Lage, diese Effekte zu berücksichtigen [52, 53, 90]. Die Inhomogenitäten werden durch Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (WDF) abgebildet, die durch eine Unterteilung des Zylinders in 100 Subvolumen numerisch abgebildet werden. Diese Subvolumina besitzen dabei keine räumliche Information (0D-Ansatz), und werden im Folgenden als Partikel bezeichnet. Während eines Zeitschrittes werden für alle Partikel die chemischen Reaktionen, der Wärmetransport und die turbulente Mischung berechnet. Der Brennverlauf wurde in einem ersten Schritt von zyklusaufgelösten Messdaten übernommen und durch einen Doppel-Wiebe-Brennverlauf approximiert. Für die Untersuchungen wurde die Software *SRM engine suite 8.2* von *cmcl innovations* eingesetzt [91].

7.2. Klopfende Verbrennung

7.2.1. Wahl des Reaktionsmechanismus

Im Rahmen des FFG-Projektes 835806 („BioFlame - Numerische Optimierung der Biogas-Verbrennung in Schiffsmotoren“) wurde in Zusammenhang mit dem *Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften* der *Technischen Universität Wien* eine umfassende Literaturrecherche durchgeführt, um passende Reaktionsmechanismen für die Selbstzündung von Methan und Propan bei hohen Druck zu

identifizieren [92]. Alles in allem wurden 25 Reaktionsmechanismen gefunden. Am Vielversprechendsten von dieser großen Auswahl war der Reaktionsmechanismus *NATURAL GAS III* aus Galway [93-97]. Er zeichnet sich durch eine umfangreiche Validierung am Stoßrohr und an der Rapid Compression Machine (RCM) aus und beschreibt die Nieder- und Übergangstemperaturchemie für Alkane bis C5 mit 293 Spezies und 1593 Reaktionen. Als Nachteilig erweist sich bei diesem Reaktionsmechanismus, dass er über keine Transportdaten verfügt. Dadurch ist die Berechnung der laminaren Flamme mit dem *NATURAL GAS III*-Mechanismus nicht möglich. Wie in Kapitel 5.2.1 erwähnt, wurde dafür dessen Weiterentwicklung *AramcoMech 1.3* [84] eingesetzt. Da allerdings zum Erscheinungsdatum des *AramcoMech 1.3* bereits umfassende Erfahrungen für die Berechnung der klopfenden Verbrennung gewonnen wurden, und für die Selbstzündung im gewünschten Einsatzbereich keine Genauigkeitsvorteile gefunden wurden, wurde die Selbstzündung weiterhin mit dem *NATURAL GAS III* berechnet.

7.2.2. Modellierung der klopfenden Verbrennung mit dem SRM

Um die thermischen Bedingungen in der unverbrannten Zone akkurat wiederzugeben, wurde das SRM auf Basis der CFD-Simulationen aufgesetzt. Das 3D-Temperaturfeld zum „Einlassventil schließt“ diente dabei als Anfangsbedingung für die WDF. Die Mischungsvorgänge in einer turbulenten Strömung werden durch stochastische instationäre Wirbel hervorgerufen. Daher kann die Mischungsgeschwindigkeit mit der Rotationsgeschwindigkeit der Wirbel beschrieben werden. Die Zeitdauer einer Umdrehung τ kann aus dem Verhältnis zwischen dem integralen Längenmaß l_t und der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen u' berechnet werden [22], siehe Gl. (17):

$$\tau = l_t / u' \quad (17)$$

Diese Größen wurden bereits in Kapitel 6.2.2 ermittelt. Dadurch konnte der Verlauf der Temperaturverteilung in guter Übereinstimmung mit den CFD-Ergebnissen abgebildet werden.

Ein Vergleich des Druck- und Heizverlaufs für zwei schnelle Zyklen mit und ohne Selbstzündung ist in [Abbildung 60](#) und [Abbildung 61](#) gegeben. Dabei werden für Zyklus 199 das Einsetzen der Selbstzündung und der gemessene Selbstzündungszeitpunkt sehr genau wiedergegeben. Dadurch zeigt sich, dass der Reaktionsmechanismus *NATURAL GAS III* die Selbstzündung unter motorische Bedingungen sehr genau beschreibt und

daher die zyklus aufgelöste Klopfmodellierung möglich ist. Dabei ist die Reaktionskinetik nicht auf eine vorher definierte Kraftstoffmischung bzw. Einsatzbereich beschränkt. Dies ist der große Vorteil der Reaktionskinetik.

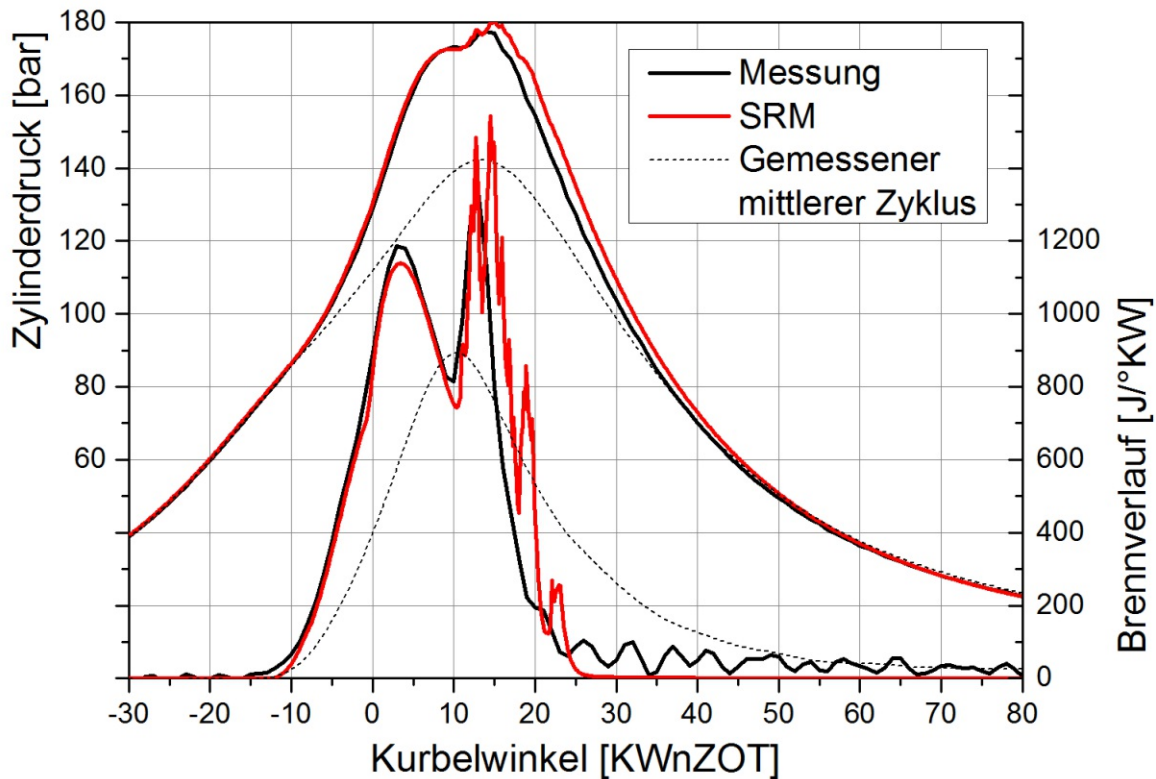


Abbildung 60: *Druck und Heizverlauf des klopfenden Zyklus 199 von OP2*

Für Zyklus 217 wurde am Prüfstand keine Selbstzündung beobachtet, siehe [Abbildung 61](#). Im Gegensatz dazu berechnet das SRM bei ungefähr 20 KWnZOT eine Selbstzündung. Eine wahrscheinliche Erklärung für den Unterschied ist ein kausaler Zusammenhang zwischen der Flammenausbreitung und der räumlichen Temperaturverteilung im Zylinder. Die Entzündung des Endgases wird durch die heißen Bereiche im Zylinder eingeleitet. Entsprechend der CFD-Simulation befinden sich diese in der Kolbenmulde, siehe [Abbildung 62](#). Nachdem die Flamme diese heißen Bereiche verbrannt hat, sind die Reaktionsraten im kalten Squish-Bereich nahe der Zylinderwand zu gering für eine weitere Selbstzündung.

SRM beschreibt die Temperaturverteilung ohne räumliche Information durch eine 0D-Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Dadurch wird die Brennreihenfolge der Partikel durch einen Zufallsalgorithmus bestimmt.

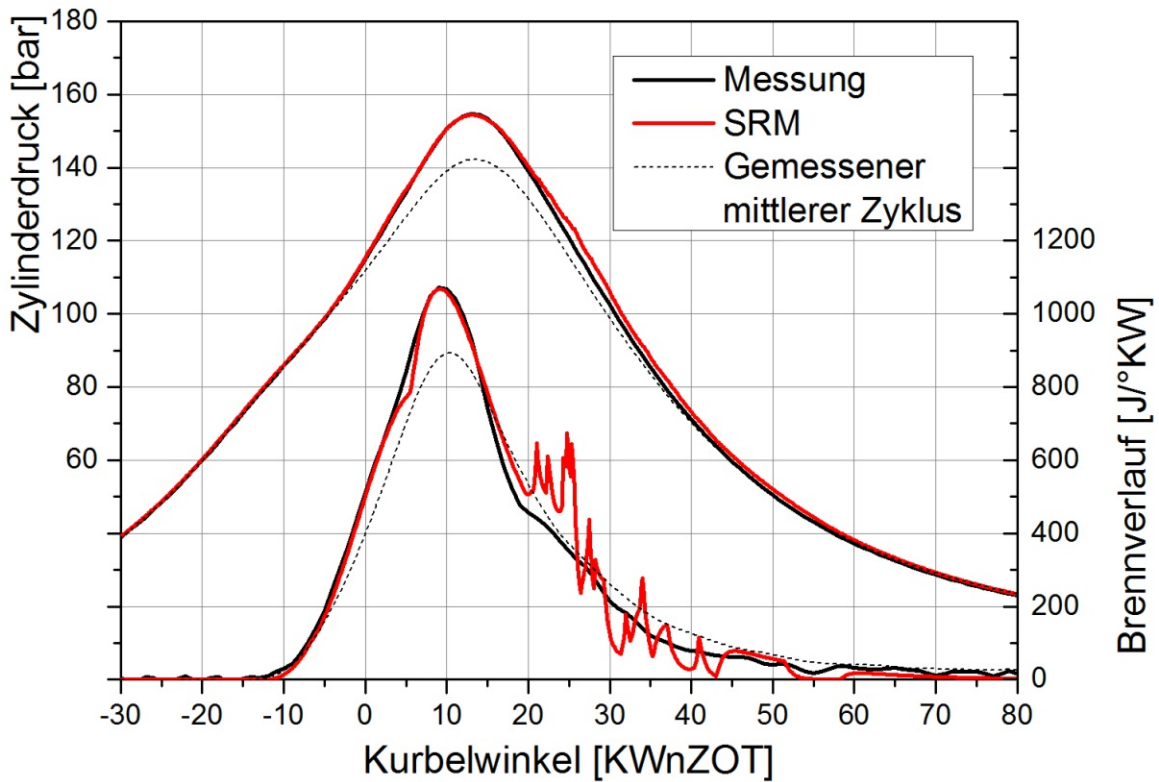


Abbildung 61: Druck und Heizverlauf des regulären Zyklus 217 von OP2

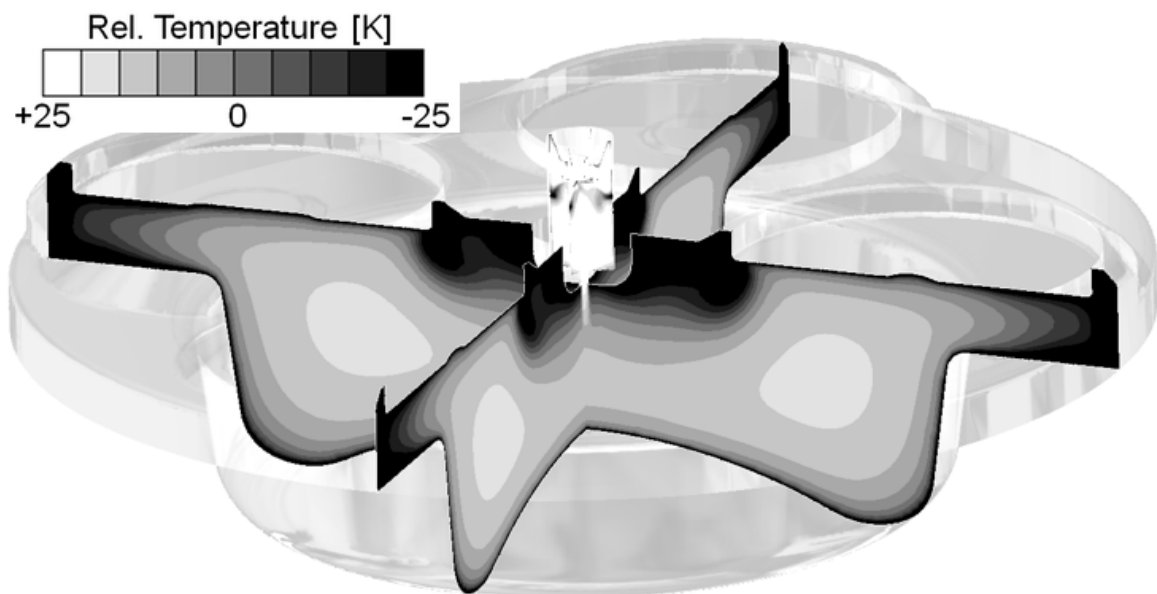


Abbildung 62: Relative Temperaturverteilung im Vergleich zur mittleren Temperatur im Brennraum bei 10 °KWnZOT für einen geschleppten Zyklus

Die realen physikalischen Vorgänge im Zylinder werden dadurch nicht exakt wiedergegeben. Folglich wurde eine empirische Beschränkung eingeführt, bei der nur Selbstzündungszeitpunkte vor dem 72.5 % Umsatzpunkt als physikalisch plausibel

aufgefasst werden. Diese Grenze wurde mittels CFD-Simulationen aus Kapitel 4.2.2.2 entsprechend des Ausbrands der Mulde abgeleitet, siehe Abbildung 63.

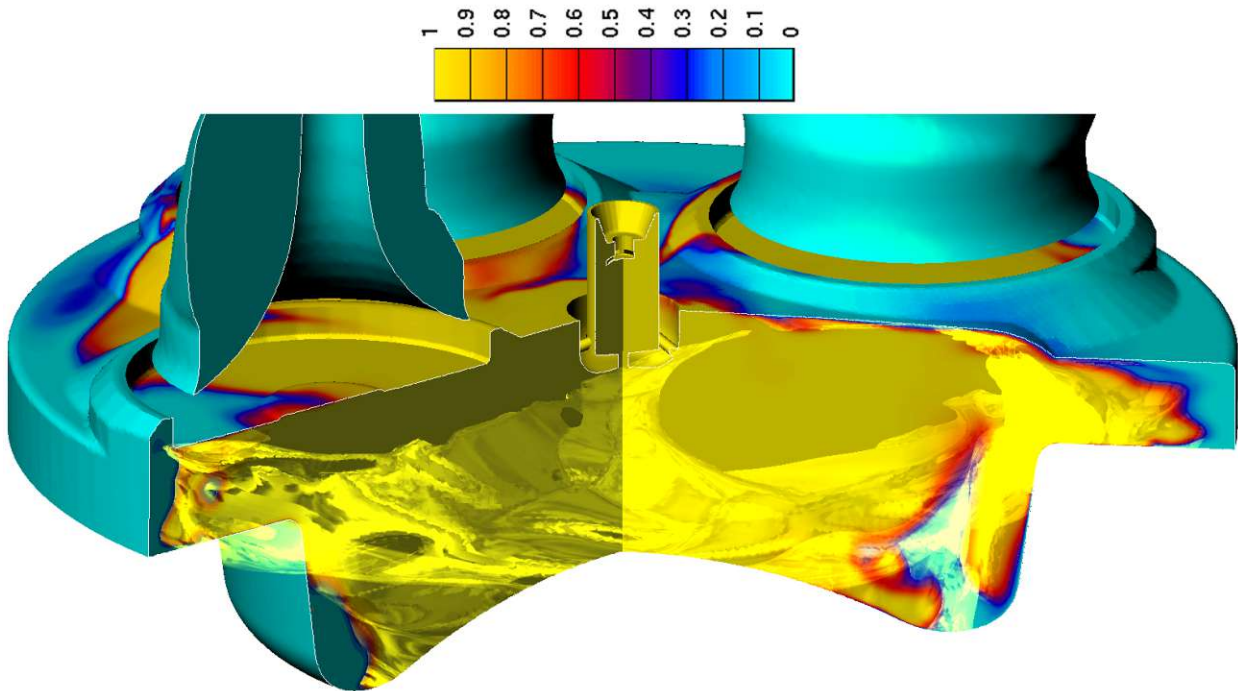


Abbildung 63: *Reaktionsfortschritt bei 72.5 % MFB eines mittleren Zyklus, berechnet mittels LES*

Für eine weitere Veranschaulichung sind in Abbildung 64 der gemessene und berechnete Klopfindex für BP2 dargestellt. Dabei wurden mit dem SRM die schnellsten 100 Zyklen betrachtet. Die Simulation überschätzt ohne die eingeführte Beschränkung die Anzahl der klopfenden Zyklen (rote Linie). Durch Einführung der empirischen Beschränkung werden die Messergebnisse jedoch mit guter Genauigkeit wiedergegeben (blaue Linie).

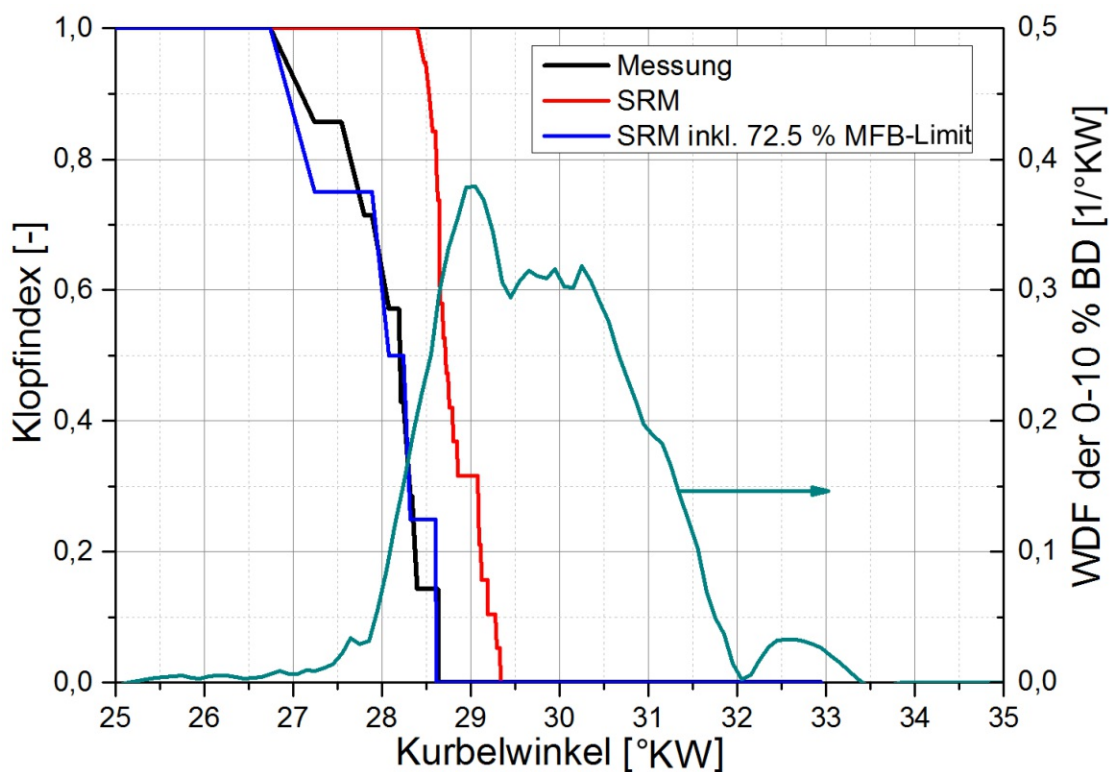


Abbildung 64: Vergleich zwischen gemessener und berechneter Klopfgrenze für OP2

Ein weiterer Vorteil der Reaktionskinetik ist neben dem breiten Einsatzbereich der detaillierte Einblick in den Selbstzündungsprozess. Beispielsweise kann der Verlauf wichtiger Radikale ermittelt werden. Dazu zählen das Hydroxyl- (OH) und das Hydroperoxyl-Radikal (HO_2) [51, 98]. Die berechneten Verläufe sind für den mittleren und einen klopfenden Zyklus in [Abbildung 65](#) dargestellt. Dabei gibt jede Linie den Verlauf eines Partikels wieder. Im oberen linken Bild ist erkennbar, dass der OH-Molanteil im unverbrannten Bereich sehr gering ist (Größenordnung $1\text{E}-10$). Bei ungefähr -7 KWnZOT verbrennt das erste Partikel und folglich ist ein sprunghafter Anstieg des OH-Stoffmengenanteils auf ungefähr $1\text{E}-3$ ersichtlich. Die Konzentration in der verbrannten Zone ist durch eine rot strichlierte Linie verdeutlicht.

Im Laufe der Verbrennung ist für alle Partikel eine sprunghafte Änderung der Radikal-Konzentration ersichtlich. Dies ist charakteristisch für einen regulären Zyklus ohne Selbstzündung.

Im Gegensatz dazu ist beim klopfenden Zyklus ein stetiger Anstieg der unverbrannten OH-Konzentration ab zirka 15 KWnZOT ersichtlich. Dies ist auf die Vorreaktionen zurückzuführen, die entsprechend der Nieder- und Übergangstemperaturchemie eine Selbstzündung einleiten.

In der unteren Spalte von [Abbildung 65](#) ist der HO_2 -Molanteil gezeigt. Während der Verbrennung ist der HO_2 -Anteil in der verbrannten Zone geringer als in der unverbrannten Zone. Darüber hinaus ist er um ungefähr zwei Größenordnungen geringer als der OH-Anteil.

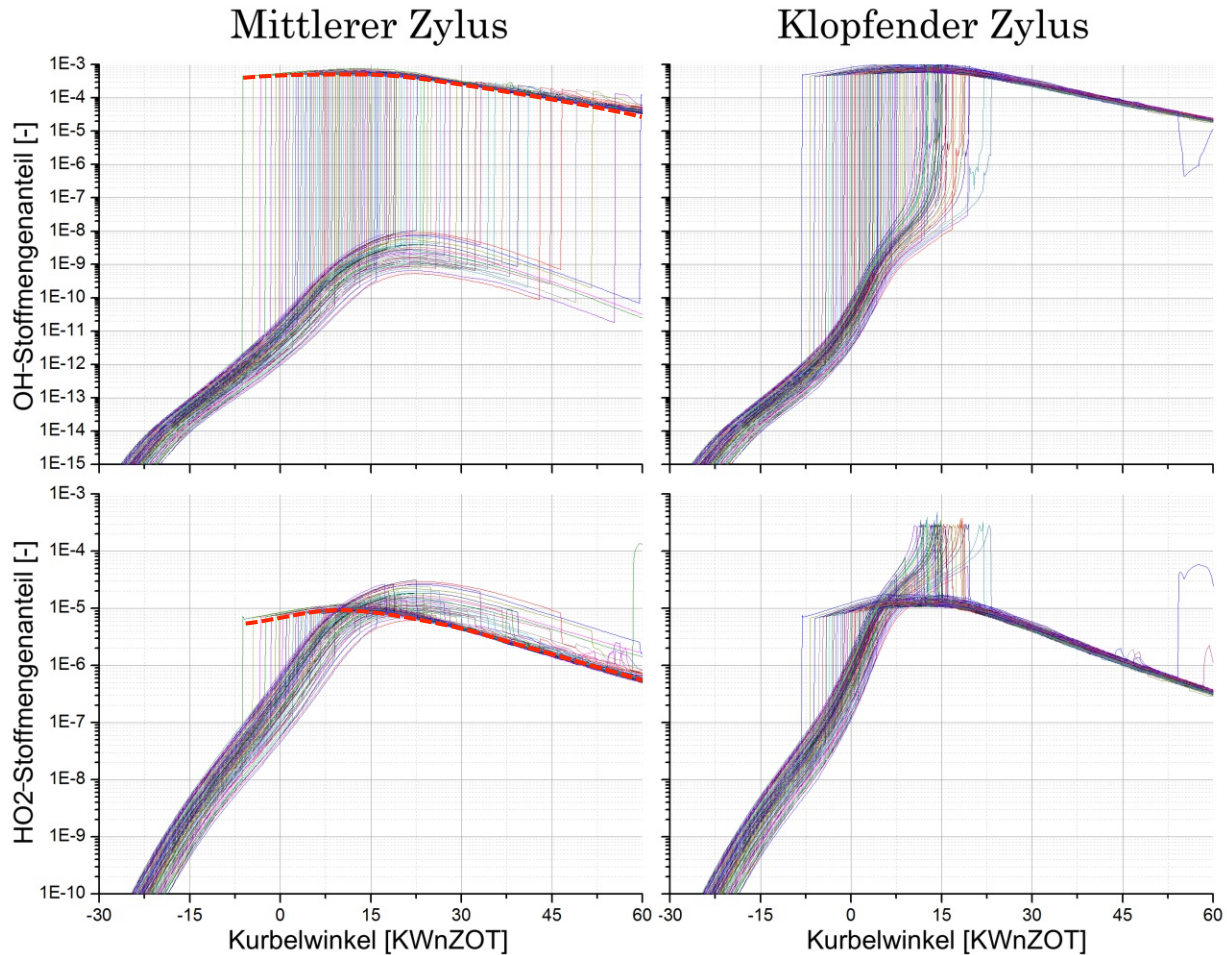


Abbildung 65: Berechneter OH- und HO_2 -Anteil während der Verbrennung für einen mittleren und einen klopfenden Zyklus; rot strichlierte Linien kennzeichnen die Radikalkonzentration in der verbrannten Zone

Die Verläufe der Radikale während der Selbstzündung und in der verbrannten Zone sind weiters für die NO_x -Bildung wichtig. Deshalb werden sie zu einem späteren Zeitpunkt für die Ableitung eines NO_x -Reaktionsmechanismus noch hilfreich sein.

7.2.3. Implementierung der Reaktionskinetik in das 1D-Modell

Anhand der guten Übereinstimmungen mit den Messungen konnte gezeigt werden, dass die Reaktionskinetik den Selbstzündungsprozess sehr detailliert wiedergibt und daher das einsetzen einer klopfenden Verbrennung für individuelle Zyklen verlässlich berechnet wird.

Die Ladungswechselsoftware *AVL BOOST v2013.2* beinhaltet standardmäßig einen Reaktionskinetik-Solver. Dieser erlaubt die Berechnung unterschiedlicher Reaktionsmechanismen für die verbrannte und die unverbrannte Zone. In der unverbrannten Zone wurde deshalb der *NATURAL GAS III*-Mechanismus eingesetzt. Obwohl das Lösen der Differentialgleichungen kein grundlegendes Problem für das Ladungswechselmodell darstellt, entfällt durch den 2-Zonen Ansatz die Berücksichtigung der inhomogenen Temperaturverteilung durch den WDF-Ansatz. Deshalb wurden die vorangegangenen Untersuchungen am BP2 mit dem 1D-Motormodell ebenfalls durchgeführt. Der Vergleich des Klopfindex in [Abbildung 66](#) zeigt, dass der 2-Zonen Ansatz ähnliche Ergebnisse wie das modifizierte SRM erzielt und damit eine gute Genauigkeit aufweist. Dadurch zeigt sich, dass die Mittelung der Temperatur einen ähnlichen Einfluss auf das Einsetzen der Selbstzündung hat wie die zuvor eingeführte empirische Beschränkung. Für letzteres wurde ein minimaler Ladungsanteil definiert, der für eine physikalische Selbstzündung vorhanden sein muss. Im Fall des 2-Zonen Ansatzes führt die Vernachlässigung der heißen Bereiche zu einer Reduktion der Reaktionsgeschwindigkeit. Es zeigt sich, dass beide Ansätze eine ähnliche Auswirkung auf die klopfende Verbrennung haben. Deshalb ist die reaktionskinetische Berechnung der klopfenden Verbrennung bei Brennverfahren mit Muldenkolben auch mit einem 2-Zonen Ansatz zulässig.

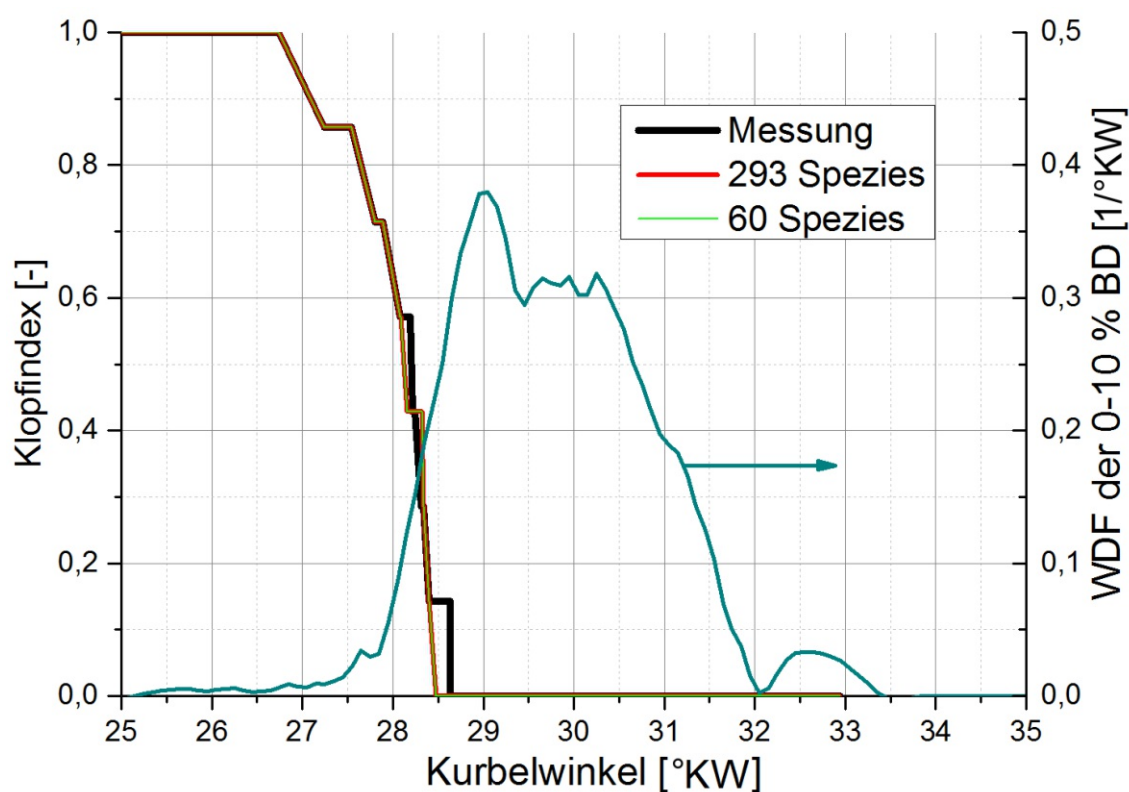


Abbildung 66: Validierung des berechneten Klopfindex für den 2-Zonen Ansatz; zwei unterschiedliche Versionen des Reaktionsmechanismus wurden betrachtet

Um die Rechenzeiten des Motormodells zu verringern, wurde im Rahmen des FFG-Projektes 835806 der *NATURAL GAS III*-Mechanismus vom *Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften* der *Technischen Universität Wien* reduziert. Dabei wurden Reaktionsfluß- und Sensitivitätsanalysen eingesetzt [62]. Der finale Mechanismus beinhaltet die Nieder- und Übergangstemperaturchemie für Kohlenwasserstoffe bis zur C3-Chemie und besteht aus 60 Spezies und 286 Reaktionen. Dadurch konnte die Rechenzeit auf 1/12 reduziert werden. Trotz der starken Reduktion konnte für magere Gemische eine gute Übereinstimmung zum originalen Mechanismus erreicht werden, siehe [Abbildung 67](#). [Abbildung 66](#) zeigt weiters, dass der reduzierte Mechanismus im Motormodell ähnlich gute Ergebnisse liefert wie der originale Reaktionsmechanismus.

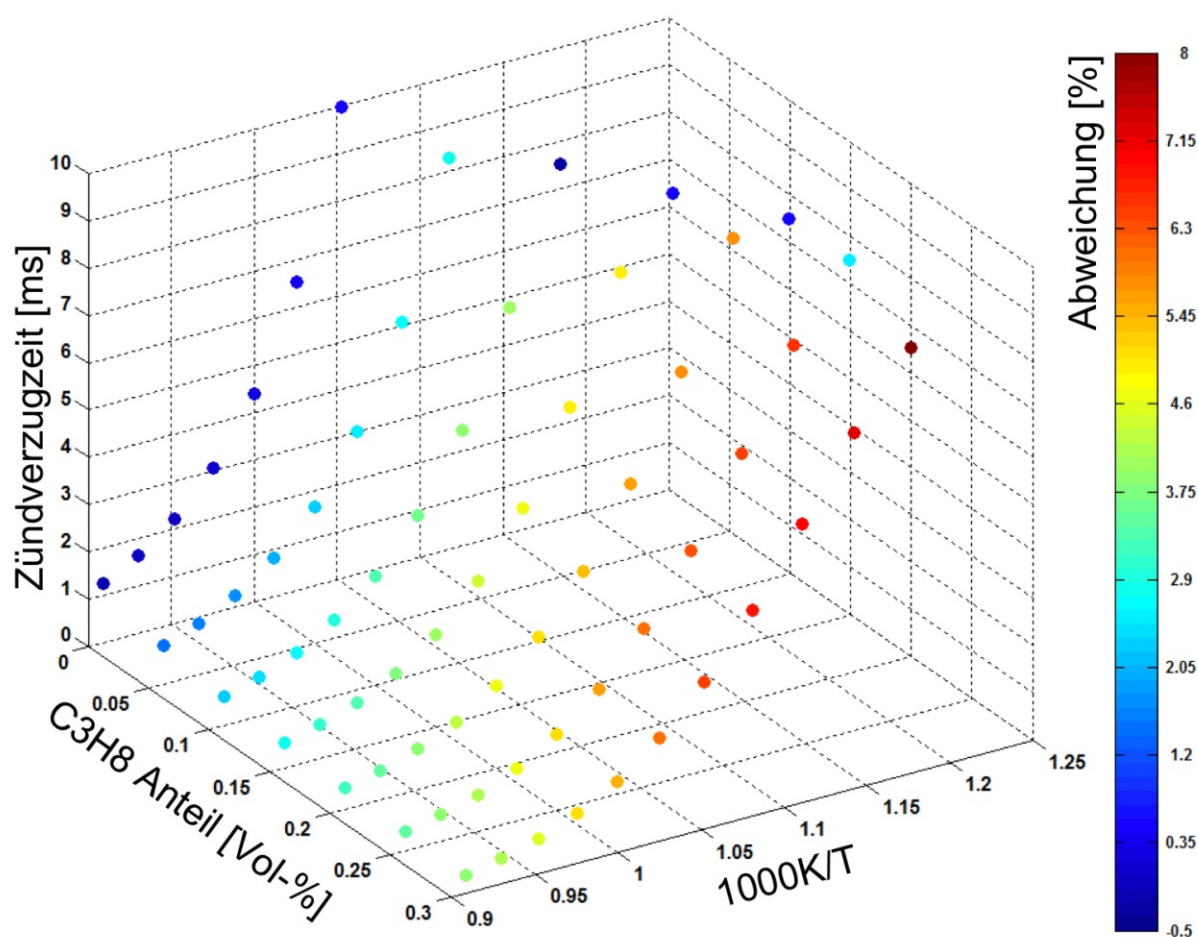


Abbildung 67: Vergleich des originalen *NATURAL GAS III*-Mechanismus und des reduzierten Mechanismus für unterschiedliche C3H8-Beimischungen und Temperaturen [99]. Randbedingung: Druck=100bar, Äquivalenzverhältnis=0.53

7.2.4. Berechnung des Klopfverhaltens mit dem prädiktiven Motormodell

Im vorigen Kapitel wurde gezeigt, dass die Reaktionskinetik in Verbindung mit einem 2-Zonen Ansatz die klopfende Verbrennung für den untersuchten Motor mit guter Genauigkeit beschreibt. Deswegen wird im nächsten Schritt das prädiktive Verbrennungsmodell mit der Reaktionskinetik kombiniert.

Wie bereits in Kapitel 6.2.4 beschrieben, werden nach der Konvergenzphase zusätzliche Zyklen berechnet um die zyklischen Schwankungen statistisch abzubilden. Um die Simulationszeit gering zu halten, wird nur ein schneller Zyklus mit einer $3 \cdot \delta_{0-10} \% \text{BD}$ reduzierten Brennverzugszeit betrachtet. Bei diesem zusätzlichen Zyklus wird die Chemie in der unverbrannten Zone durch den reduzierten *NATURAL GAS III*-Mechanismus berechnet.

Auf Basis des Fortschrittes der regulären Verbrennung während des Selbstzündungszeitpunktes wird das Klopfverhalten des Betriebspunktes beschrieben. Die berechnete Klopfneigung wird für 11 Betriebspunkte in [Abbildung 68](#) mit dem *MAHLE-KI*-Index verglichen [100]. Der *MAHLE-KI*-Index bestimmt die Klopfintensität eines Betriebspunktes auf Basis der Zylinderdruckoszillationen. Dafür wird der Zylinderdruck durch eine Bandpassfilterung mit den Grenzfrequenzen 3.2 bis 80 kHz gefiltert.

Obwohl das experimentelle und das numerische Klopfmaß nicht exakt vergleichbar sind, kann die Genauigkeit des Simulationsmodells in [Abbildung 68](#) bewertet werden. Die Differenzierung zwischen stark klopfenden (BP2), schwach klopfenden (BP3, 5, 6 und 9) und nicht klopfenden Betriebspunkten wird mit guter Genauigkeit wiedergegeben.

Der Einfluss der Kraftstoffqualität kann anhand der Betriebspunkte 10 und 11 beobachtet werden, die einen *Pmi* von bis zu 30 bar aufweisen. Trotz hoher Last weisen diese BP aufgrund des geringen Propan-Anteils im Kraftstoff MZ80 keine klopfende Verbrennung auf. Im Gegensatz dazu ergibt sich bei BP 6, trotz der hohen Methanzahl von 123, selbst bei einem *Pmi* von 23.6 bar bereits eine klopfende Verbrennung. Zurückzuführen ist dies auf die Messmethode der Methanzahl, die am CFR-Motor unter stöchiometrischen Bedingungen bestimmt wird. Sie ist nicht in der Lage, das Klopfverhalten von Schwachgasen im Magerbetrieb wiederzugeben [50]. Im Gegensatz dazu beschreibt das prädiktive Motormodell aufgrund der Reaktionskinetik das Klopfverhalten von unterschiedlichen Kraftstoffen sehr genau und erfüllt damit die Ansprüche an das Modell.

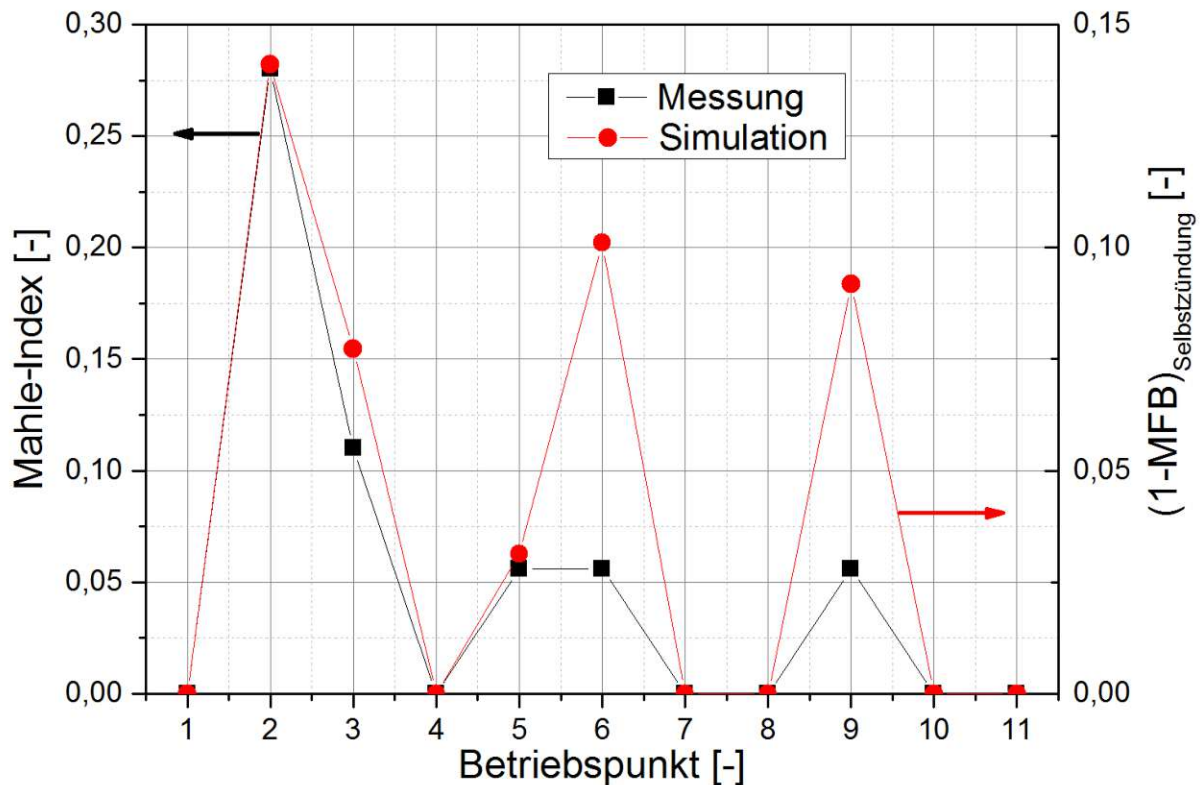


Abbildung 68: Vergleich des berechneten Klopfverhaltens mit dem gemessenen Mahle-Index

7.3. Stickoxidbildung

7.3.1. Analyse der Stickoxidbildung mittels SRM

Die Stickoxidbildung in der verbrannten Zone wird durch das NO_x Add-on der UC San Diego beschrieben [101]. Dieses Add-on wurde für die SRM-Untersuchungen dem *NATURAL GAS III*-Mechanismus hinzugefügt. Dadurch vergrößert sich der Mechanismus um 53 Reaktionen und 13 Spezies.

Um den Einfluss der zyklischen Schwankungen auf die NO_x -Emissionen zu bewerten, wurden 100 aufeinanderfolgende Zyklen von BP2 mit dem SRM berechnet. In der linken Seite von [Abbildung 69](#) ist der exponentielle Zusammenhang zwischen Verbrennungsschwerpunkt und NO_x -Emissionen ersichtlich. Der Mittelwert dieser 100 individuellen Zyklen wurde gebildet und in der rechten Seite von [Abbildung 69](#) ist die gute Übereinstimmung mit dem Messwert ersichtlich.

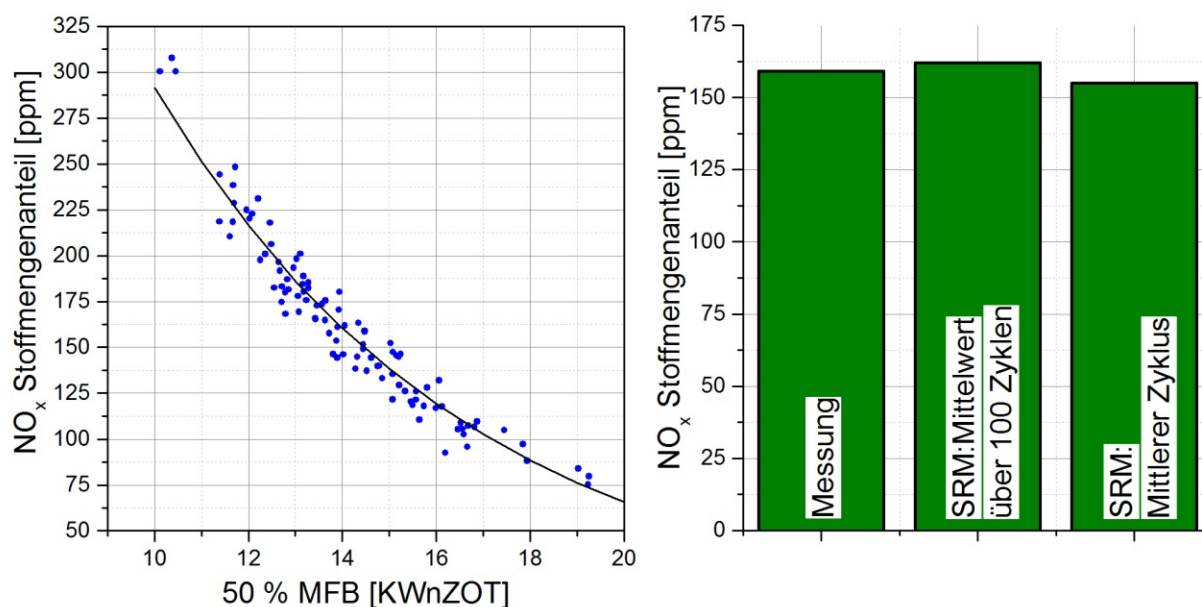


Abbildung 69: Stickoxid-Emissionen für 100 individuelle Zyklen (links) und Validierung der Simulationsergebnisse (rechts)

Zusätzlich wurden die NO_x-Emissionen des mittleren Zyklus ermittelt und sind zudem im rechten Diagramm eingetragen. Der geringe Unterschied zum Mittelwert der 100 individuellen Zyklen zeigt, dass der exponentielle Zusammenhang zum Verbrennungsschwerpunkt eine geringe Auswirkung auf den mittleren Stickoxidausstoß hat. Daher kann der mittlere Zyklus für deren Berechnung herangezogen werden. Dies ist eine wichtige Erkenntnis für die spätere Berechnung der Stickoxidemissionen mit dem prädiktiven Motormodell.

Die gute Übereinstimmung zeigt, dass das *NO_x Add-on* die Stickoxidbildung mit einer hohen Genauigkeit wiedergibt und als Basis für die weiteren NO_x-Untersuchungen dient.

7.3.2. Ableiten eines NO_x-Reaktionsmechanismus für den 2-Zonen Ansatz

Wie bereits erwähnt wurde, ermöglicht *AVL BOOST* den Einsatz verschiedener Reaktionsmechanismen in den unterschiedlichen Zonen. Deswegen ist es in der verbrannten Zone zielführend, nur die Reaktionen der Stickoxidbildung zu berechnen und jene für die Selbstzündung zu vernachlässigen. Da das *Add-on* für den Stand-Alone-Betrieb nicht entwickelt wurde, sind weitere Modifikationen am NO_x-Mechanismus erforderlich.

Um diese zu realisieren, wurden zuerst die Entstehungsmechanismen der Stickoxidbildung bei Magerbetrieb bewertet. Ein offener Punkt ist beispielsweise der Einfluss der regulären Flammenfront auf die NO_x-Bildung, da sie durch den 2-Zonen-Ansatz modeltypisch nicht aufgelöst wird. Auf Basis der daraus gewonnenen Erkenntnisse wird ein eigenständiger

Reaktionsmechanismus für die Stickoxidbildung abgeleitet, der in der verbrannten Zone des prädiktiven Motormodells eingesetzt werden kann.

Die Stickoxidbildung ist in der Literatur bereits sehr gut beschrieben. Es gibt vier Mechanismen die für die Stickoxidbildung relevant sind [62, 102]:

- Thermisches NO, gebildet nach dem Zeldovich-Mechanismus:
Oxidation des Luftstickstoffes N_2 durch atomaren Sauerstoff O bei hohen Temperaturen.
- Promptes NO, gebildet nach dem Fenimore-Mechanismus:
Reaktion des CH-Radikals mit Luftstickstoff N_2 bei niedrigen Temperaturen und kraftstoffreicher Verbrennung.
- Über Distickstoffoxid erzeugtes NO:
Reaktion von Distickstoffoxid N_2O mit atomarem Sauerstoff O.
- NO über Kraftstoff gebundenem Stickstoff:
Hauptsächlich bei Kohleverbrennung relevant, bei gasförmigen Kraftstoffen wie Erdgas liegt kein kraftstoffgebundener Stickstoff vor.

Das NO_x Add-on beinhaltet die Reaktionsgleichungen aller vier Entstehungsmechanismen. Der Hauptanteil der NO-Emissionen wird nach dem thermischen NO gebildet. Die Reaktionsgleichungen dafür sind in RG.1 bis RG.3 gegeben [62]:



Die Stickoxidbildung über Kraftstoff gebundenem Stickstoff und promptes NO spielt für den untersuchten Motor keine Bedeutung. Allerdings kann beim Magerbetrieb und hohem Druck ein bedeutender Anteil der gesamten NO-Emissionen über die Reaktion $N_2O + O \leftrightarrow NO + NO$ gebildet werden [62]. Das N_2O bildet sich dabei laut des NO_x Add-on über die RG.4 bis RG.6:



Aufgrund des Dreierstoßes weist RG.4 eine steigende Reaktionsrate mit zunehmendem Druck auf. RG.5 und RG.6 beschreiben weiters die Bildung von N_2O über OH bzw. HO_2 . Diese Radikale sind während der Verbrennung in erhöhter Konzentration vorhanden, siehe [Abbildung 65](#).

Um deren Einfluss zu quantifizieren, wurden in *DARS v2.08* Untersuchungen in einem konstantem Druck Reaktor durchgeführt. Die Randbedingungen wurden entsprechend der thermischen Bedingungen in einem Großgasmotor mit 100 bar und einer verbrannten Temperatur von 2150 K gewählt. Bei einem Äquivalenzverhältnis von 0.55 ergibt sich für Methan eine unverbrannte Temperatur von 992 K und eine Selbstzündungszeit von 5.25 ms. Da die Stickoxidbildung rein kinetisch kontrolliert ist, ist die Verweilzeit im verbrannten Bereich entscheidend für die gebildete NO_x -Menge. Diese wird mit 10 °KW angenommen. Bei einer Drehzahl von 1500 min^{-1} ergibt sich dadurch eine Zeitspanne von 1 ms. Deshalb wurde die gesamte Rechenzeit mit 6.25 ms angesetzt.

Zur Bewertung der NO-Bildung über N_2O wurden drei Modifikationen des Reaktionsmechanismus verwendet:

- Vollständiger Mechanismus: *NATURAL GAS III*-Mechanismus inklusive originale NO_x Add-on (vergleiche Kapitel 7.3.1).
- Thermisches NO: *NATURAL GAS III*-Mechanismus inklusive der drei Zeldovich-Reaktionsgleichungen. Die Differenz zum „Vollständigen Mechanismus“ gibt Aufschluss über die NO-Bildung über N_2O .
- NO-Mechanismus ohne RG. 6: Ähnlich zum „Vollständigen Mechanismus“, allerdings ohne RG. 6. Dadurch kann der Einfluss der hohen HO_2 -Konzentration vor der Verbrennung bewertet werden.

In [Abbildung 70](#) sind die berechneten HO_2 , OH, N_2O und NO-Molanteile für die drei Reaktionsmechanismen gegeben. Da in allen drei Modifikationen der vollständige Selbstzündungsmechanismus vorhanden ist, unterschieden sich die Verläufe von OH und HO_2 nicht. Anhand N_2O sind die Unterschiede der Mechanismen allerdings deutlich ersichtlich. Der „Vollständige Mechanismus“ weist bereits vor der Zündung⁸ eine hohe Konzentration an N_2O auf, welches über RG. 6 durch die hohe HO_2 -Konzentration unmittelbar vor und während der Zündung gebildet wird. Ein Vergleich mit der blauen Linie bestätigt dies: Im Fall „NO-Mechanismus ohne RG.6“ wird erst während der Zündung das N_2O über RG. 4 und 5 gebildet. Danach ergibt sich ein ähnlicher, quasistationärer

⁸ Die Zeitskala wird auf den Zündzeitpunkt normiert.

Zustand für N_2O . Beim „Thermischen NO“-Mechanismus bildet sich trivialerweise kein N_2O .

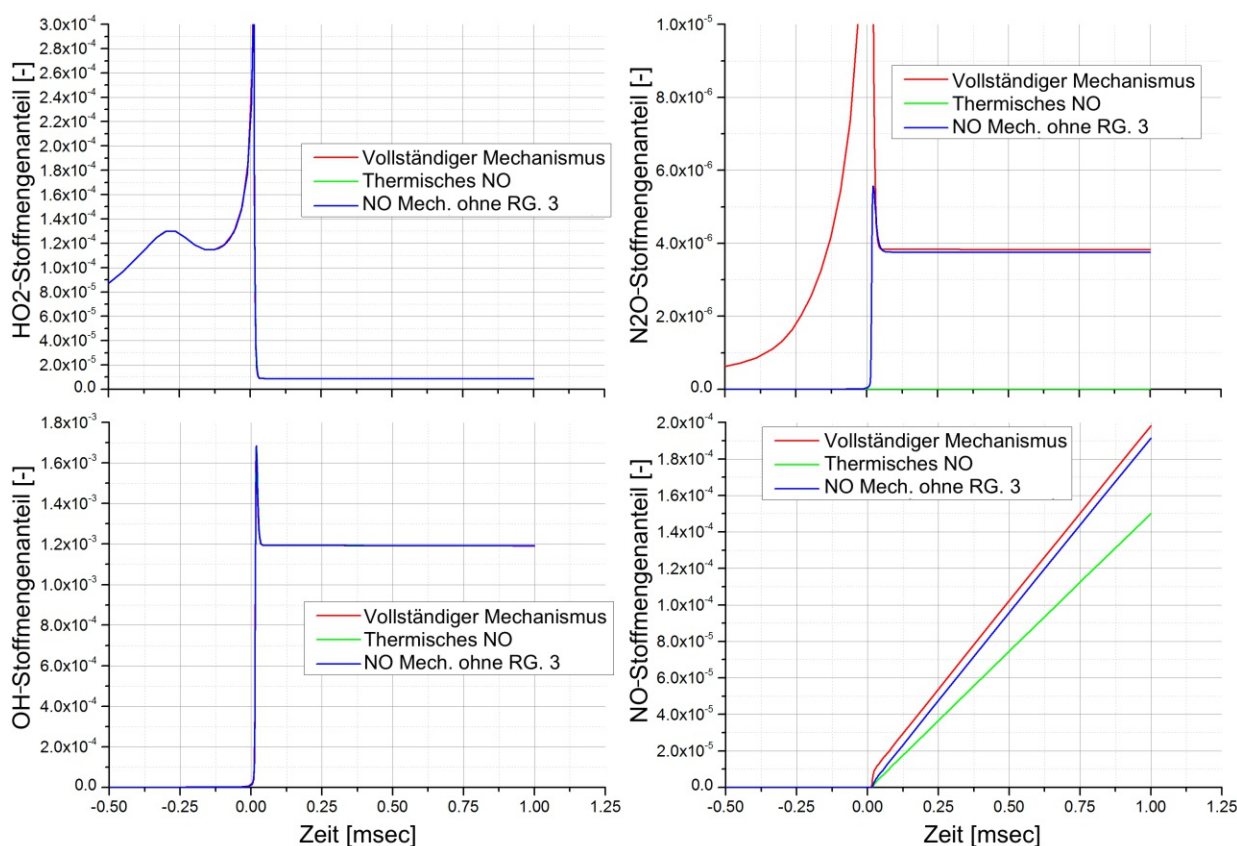


Abbildung 70: Untersuchung verschiedener NO_x -Entstehungsmechanismen

Die Stickstoffmonoxid-Bildung ist im linken unteren Diagramm ersichtlich. Dabei zeigt der „Vollständige Mechanismus“ direkt während der Zündung einen kleinen sprunghaften Anstieg aufgrund der hohen N_2O -Konzentration während der Zündung. Nachdem der N_2O -Verlauf einen stationären Zustand eingenommen hat, zeigt sich eine lineare Zunahme der NO-Konzentration auf einen Wert von 199 ppm nach einer Millisekunde. Für die blaue Linie bleibt zwar der erste sprunghafte Anstieg aus, die lineare NO-Zunahme danach wird mit der gleichen Steigung wiedergegeben und es ergibt sich ein finaler NO-Anteil von ca. 191 ppm. Die grüne Linie zeigt dagegen eine deutlich geringere Steigung und einen finalen NO-Anteil von 150 ppm.

Durch die Untersuchungen zeigt sich, dass zirka 25 % der gesamten NO-Emissionen bei gasmotorischen Betriebsbedingungen über N_2O gebildet werden (Differenz zwischen roter und grüner Linie in [Abbildung 70](#)) und daher berücksichtigt werden müssen. Im Gegensatz dazu besitzen der HO₂ und OH-Verlauf vor der Selbstzündung nur einen geringen Einfluss auf die Stickoxidbildung. Dieser Unterschied wird bei einer regulären Deflagration im Gasmotor nochmals geringer ausfallen, da die Verbrennung entsprechend der

Hochtemperaturchemie abläuft und dadurch geringere HO_2 -Konzentrationen im Unverbrannten auftreten, siehe linke Spalte von [Abbildung 65](#). Dadurch kann die Stickoxidbildung auch durch den 2-Zonen-Ansatz abgebildet werden, bei dem keine chemische Kopplung zwischen verbrannter und unverbrannter Zone durch die Flamme vorhanden ist. Allerdings muss das OH-Gleichgewicht in der verbrannten Zone korrekt abgebildet werden, da ein beträchtlicher Anteil des N_2O über OH gebildet wird. Da das *NO_x Add-on* keine H/O-Chemie enthält, wurde für den Stand-Alone-Einsatz im prädiktiven Verbrennungsmodell die H/O-Chemie des *NATURAL GAS III*-Mechanismus hinzugefügt (inklusive Dissoziation des Luftsauerstoffs O_2 in elementarem Sauerstoff O).

In einem letzten Schritt wurde der NO_x -Reaktionsmechanismus reduziert. Dabei wurden die Gleichungen und Spezies für promptes NO und kraftstoffgebundenes Stickstoff entfernt. Die Anzahl der zusätzlichen Spezies für die Stickoxidbildung reduzierte sich von 13 auf 5. Der modifizierte und reduzierte Mechanismus sind im Anhang 11.3 ersichtlich.

7.3.3. Modellierung der Stickoxidbildung mit dem 1D-Modell

Die modifizierten und validierten Mechanismen für die Stickoxidbildung und der klopfenden Verbrennung wurden in das prädiktive Motormodell implementiert. Auf Basis des mittleren Zyklus wird die Stickstoffoxid-Bildung in der verbrannten Zone berechnet. In [Abbildung 71](#) ist ein Vergleich der berechneten und gemessenen NO_x -Emissionen für unterschiedliche Betriebspunkte gegeben. Die BP wurden dabei mit unterschiedlichen Kraftstoffen und Betriebsparameter betrieben, siehe Tabelle 8, und erfüllen unterschiedliche gesetzliche Grenzwerte (BP 1-5 und 10-11 *TA Luft*, BP 7-9 *TA Luft* $\frac{1}{2}$). Das Modell ist sensitiv für diese Variationen und bildet die Stickoxidbildung mit guter Genauigkeit ab.

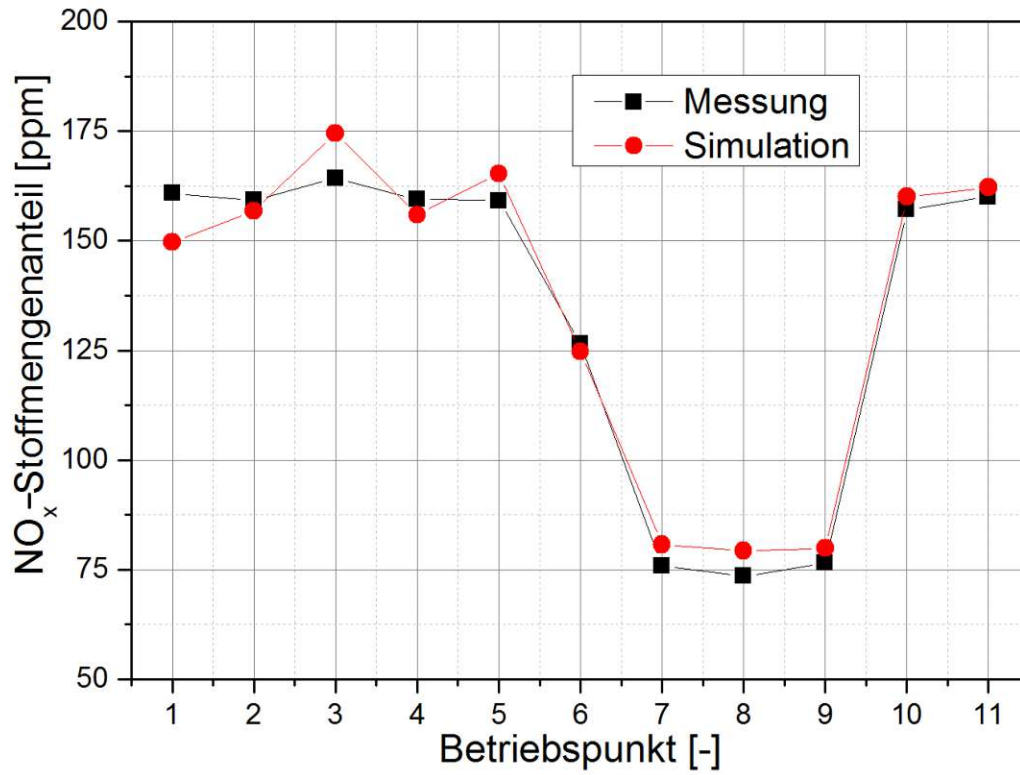


Abbildung 71: Validierung der berechneten Stickoxidemissionen anhand von Messdaten

8. Analyse und Optimierung der thermodynamischen Motorauslegung

In den Kapiteln 5, 6 und 7 wurden die Teilmodelle des prädiktiven Motormodells beschrieben. Eine Zusammenfassung über den Simulationsablauf ist in [Abbildung 72](#) gegeben. In Abhängigkeit der Eingangsparameter, die sich aus den Betriebsparametern und der Kraftstoffzusammensetzung ergeben, berechnet das Ladungswechselmodell den mittleren Zyklus. Dadurch können, wie bei jeder Ladungswechselrechnung, der Kraftstoffverbrauch, Mitteldruck und weitere Größen des mittleren Zyklus ermittelt werden. Zusätzlich wird in der verbrannten Zone für den konvergierten mittleren Zyklus die Stickoxidbildung mittels NO_x -Reaktionsmechanismus berechnet. Ebenfalls auf Basis des mittleren Zyklus wird die dimensionslose turbulente Kennzahl der Flammentheorie zum Zündzeitpunkt ermittelt. Daraus leitet das Zyklusschwankungsmodell die Standardabweichung der 0-10 % BD ab. Ein zusätzlicher Zyklus mit schneller Verbrennung wird berechnet, bei dem die Reaktionskinetik die Nieder- und Übergangskinetik in der unverbrannten Zone berechnet. Je nach Einsetzen einer Selbstzündung kann das Klopfverhalten des untersuchten Betriebspunktes bewertet werden. Die Simulationsdauer des prädiktiven Motormodells beträgt zirka 30 min je Betriebspunkt.

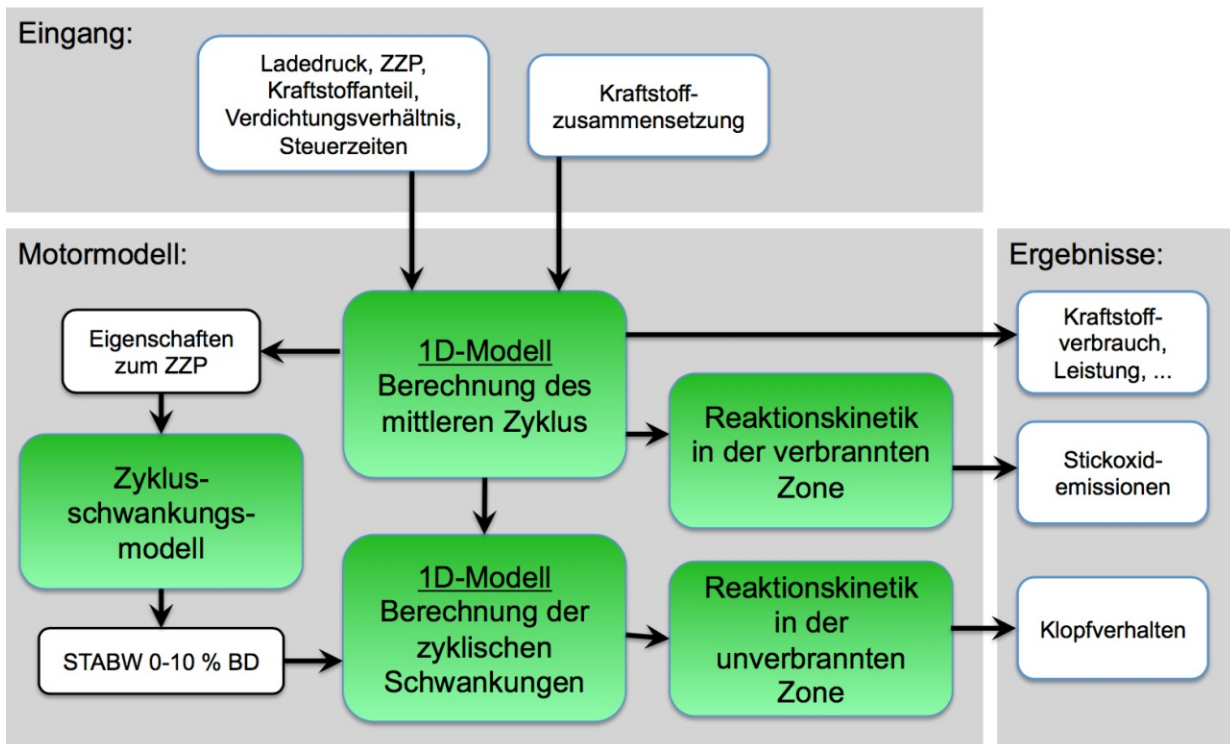


Abbildung 72: Überblick über das prädiktive 1D-Motormodell

Das prädiktive Motormodell ist dadurch in der Lage, die Motor-Performance, Stickoxidbildung und klopfende Verbrennung für unterschiedliche Kraftstoffmischungen und Betriebsparameter mit hoher Genauigkeit zu beschreiben. Im Folgenden wird es eingesetzt, um eine Motoroptimierung für Großgasmotoren in Abhängigkeit der Kraftstoffqualität durchzuführen.

8.1. Thermodynamische Untersuchung des Verbrennungsprozesses

Um einen Einblick in das Betriebsverhalten des Gasmotors zu erhalten, wurde eine umfassende Sensitivitätsanalyse durchgeführt. Ziel war es, die Auswirkungen des Verdichtungsverhältnisses, der Last und der Miller-Steuerzeit auf die Effizienz des Motors aufzuzeigen. Der indizierte Mitteldruck wurde dabei zwischen 20 und 45 bar variiert. Die vier betrachteten Einlassventilkurven sind in [Abbildung 41](#) ersichtlich. Die weiteren Randbedingungen sind:

- Zündzeitpunkt: -28 KWnZOT
- Methan/Propan-Kraftstoffmischung mit MZ65
- Luft/Kraftstoff-Verhältnis zur Einhaltung der NO_x-Emissionen gemäß TA-Luft
- Maximales Verdichtungsverhältnis für einen klopfreien Betrieb
- Konstanter Reibmitteldruck von 2.93 bar
- Auslassgedruck gemäß Turboladergleichung (1-stufige Aufladung mit $\eta_{TC}=65\%$ bis $\pi_V=5.6$, darüber 2-stufige Aufladung mit $\eta_{TC}=72\%$)
- Druckverlust vor Verdichter: 42 mbar
- Druckverlust nach Turbine: 70 mbar

Die gewählte Kraftstoffmischung weist bereits eine erhöhte Klopfneigung auf, wodurch die Beschränkung des Betriebszustandes infolge einer klopfenden Verbrennung deutlich gezeigt wird. Für den untersuchten Einzylinder Versuchsmotor konnte in einem weitem Lastbereich keine eindeutige Abhängigkeit des Reibmitteldrucks gegenüber des Spitzendrucks oder der Last beobachtet werden, siehe [Abbildung 73](#). Deswegen wurde ein konstanter Reibmitteldruck angenommen. Für produktionsnahe Vollmotoren sollte diese Annahme gegebenenfalls adaptiert werden.

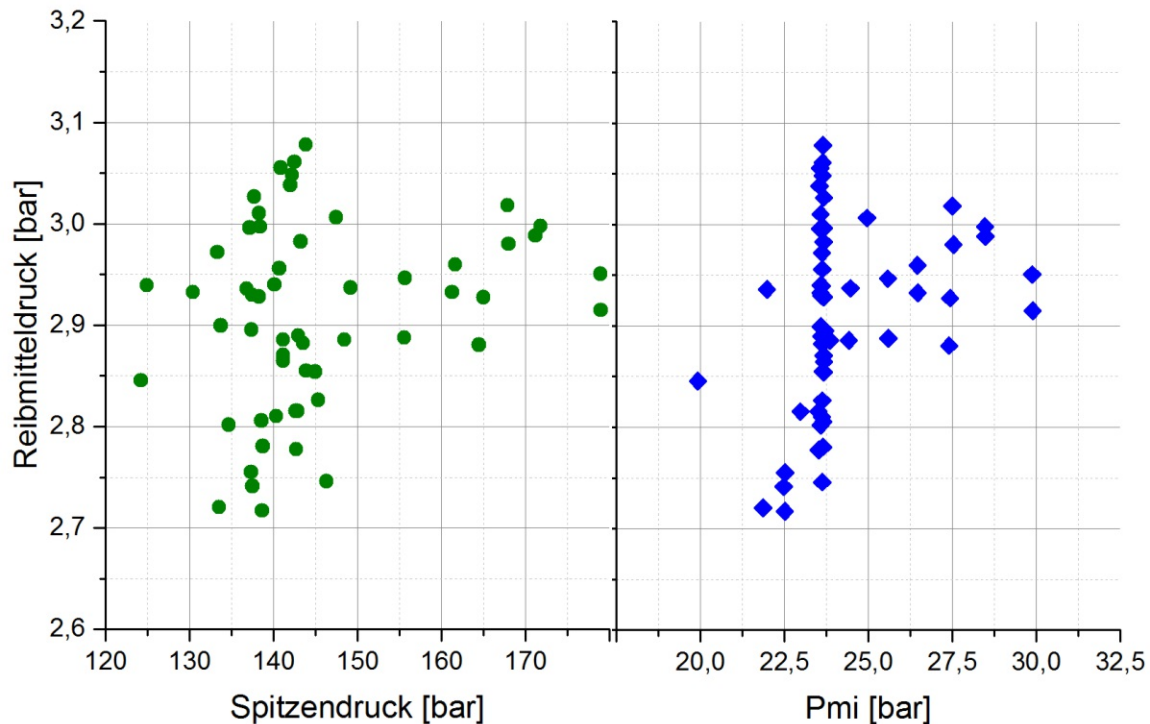


Abbildung 73: *Reibmitteldruck in Abhängigkeit des Spitzendrucks und des indiziertem Mitteldruck für unterschiedliche Betriebspunkte*

Um die gewünschten Randbedingungen zu erreichen, war ein iteratives Vorgehen notwendig. Dabei wurden gleichzeitig das Verdichtungsverhältnis und das Äquivalenzverhältnis gesteigert, bis die Klopfgrenze und die NO_x-Emissionen nach TA-Luft erreicht wurden. Dies wurde für alle vier Miller-Strategien und unterschiedliche Ladedrücke durchgeführt.

In [Abbildung 74](#) ist der erforderliche Saugrohrdruck für unterschiedliche Lasten und Miller-Zeiten gegeben. Zusätzlich ist die Grenze der einstufigen Aufladung dargestellt. Es ergibt sich ein annähernd linearer Zusammenhang zwischen Last und Saugrohrdruck für eine gegebene Ventilsteuerzeit (vertikale Variation). Die deutliche Zunahme des benötigten Ladedrucks für aggressive Miller-Strategien ist anhand einer horizontalen Variation ersichtlich. Beispielsweise wird für einen indizierten Mitteldruck von 35 bar bei Miller 480 um 2,2 bar mehr Saugrohrdruck benötigt als bei Miller 520. Der Vorteil eines frühen EVS ist allerdings eine reduzierte Ladungstemperatur im Zylinder. Dadurch reduziert sich die Klopfneigung und höhere Verdichtungsverhältnisse können realisiert werden, siehe [Abbildung 75](#).

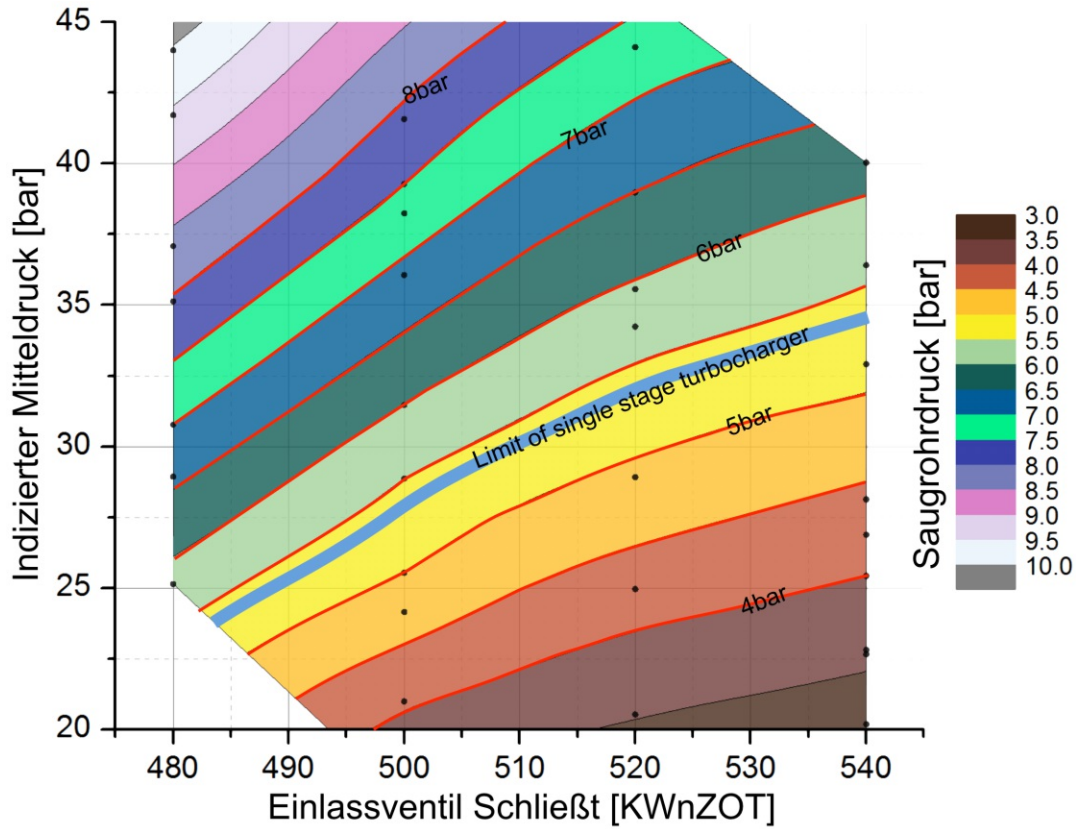


Abbildung 74: Erforderlicher Saugrohrdruck für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

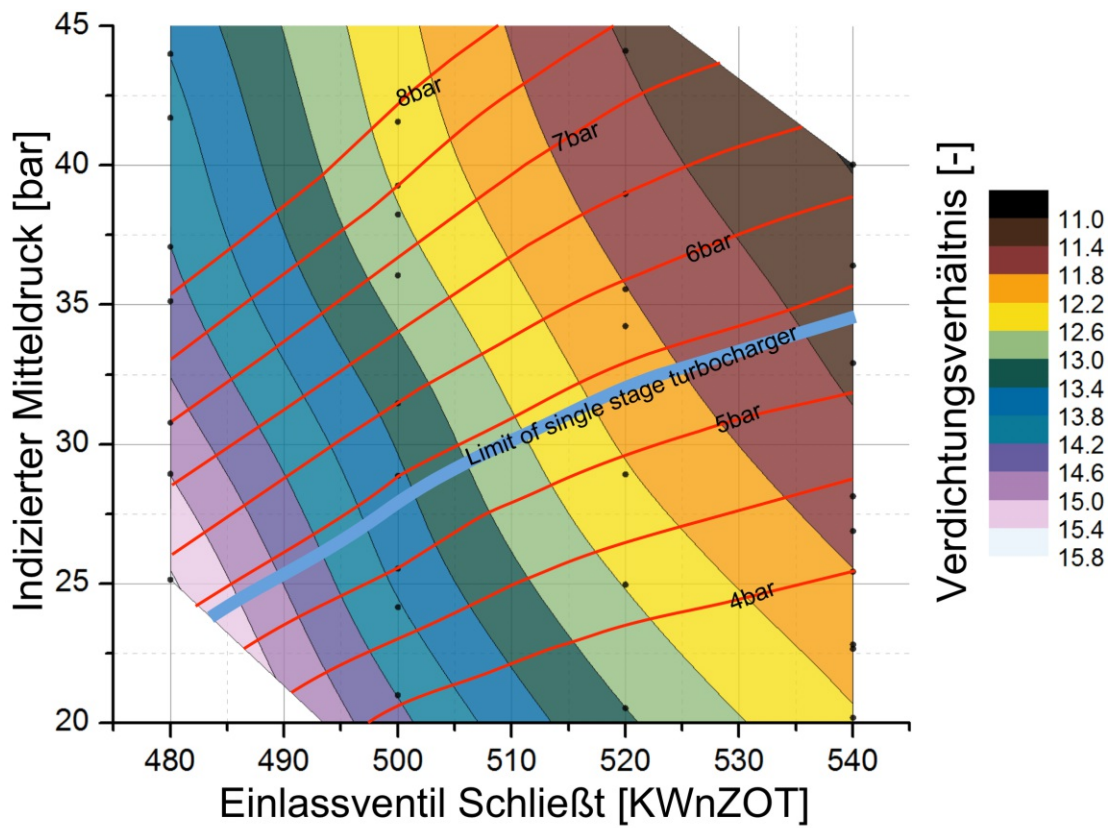


Abbildung 75: Verdichtungsverhältnis für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

Ein hohes Verdichtungsverhältnis bewirkt eine Steigerung des induzierten Wirkungsgrades für die aggressiven Miller-Strategien, siehe [Abbildung 76](#). Weiters zeigt sich, dass der induzierte Wirkungsgrad weitgehend unabhängig von der Last ist.

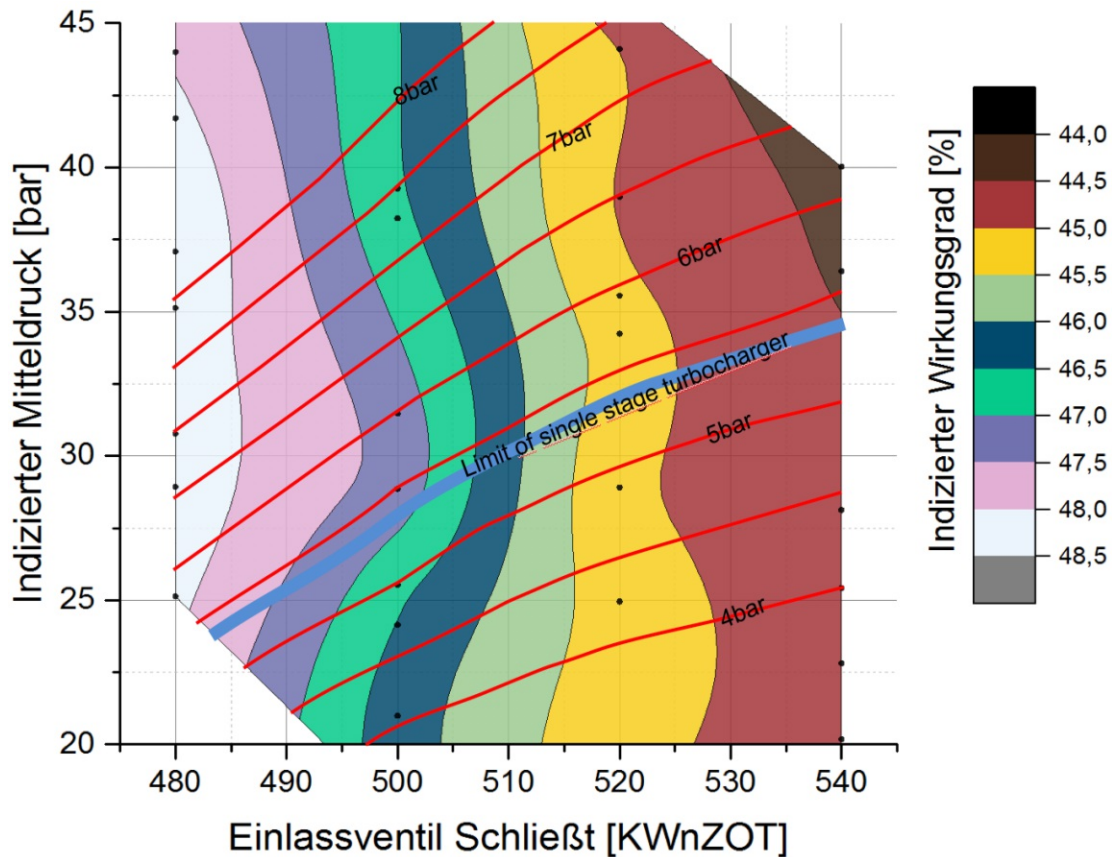


Abbildung 76: Indizierter Wirkungsgrad für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

Betrachtet man den effektiven Wirkungsgrad in [Abbildung 77](#), zeigt sich allerdings, dass Betriebspunkte mit hoher Last vorteilhaft für die Effizienz sind, da der prozentuelle Anteil der Reibungsverluste abnimmt. Die optimale Miller-Zeit hängt vom Saugrohrdruck ab. Während bei Drücken unter 4 bar eine Miller-Zeit zwischen 520 und 540 optimal ist, verschiebt sich der optimale EVS-Zeitpunkt bei einem Saugrohrdruck von 5 bar bereits zu Miller 500. Für Saugrohrdrücke über 6,5 bar werden die höchsten Wirkungsgrade mit der aggressivsten Miller-Zeit von 480 erreicht.

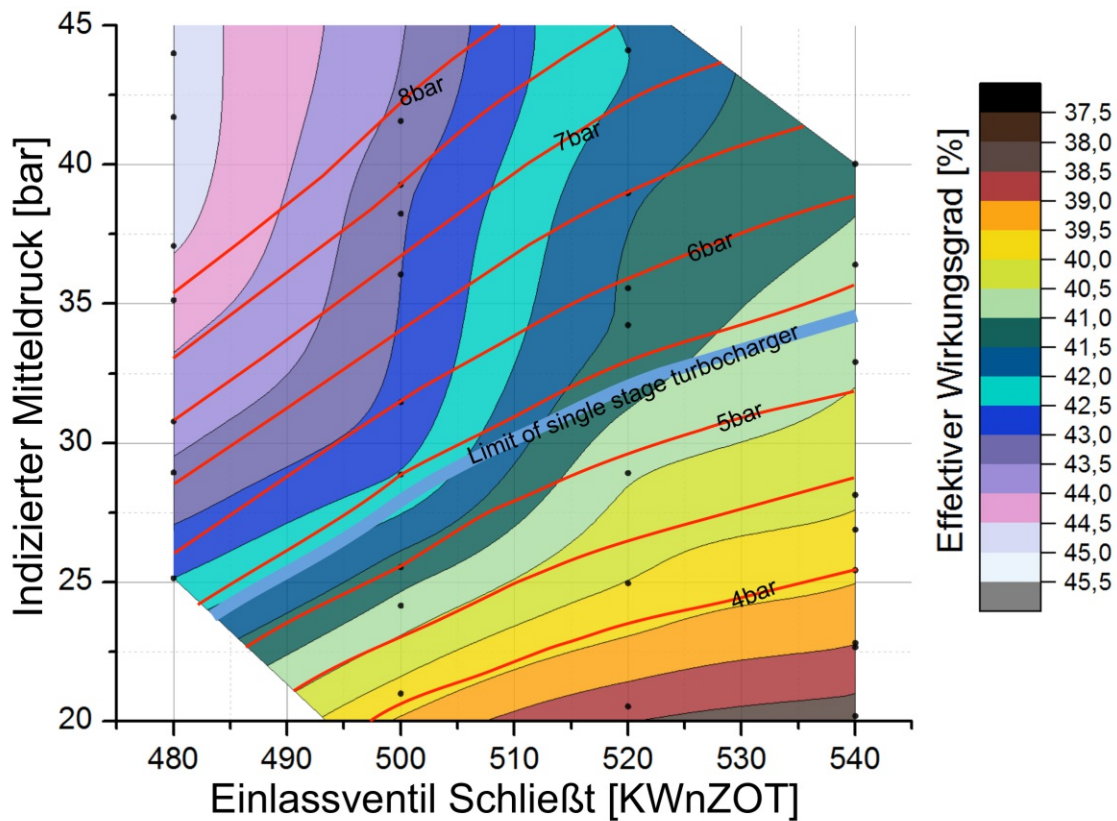


Abbildung 77: Effektiver Wirkungsgrad für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

Neben dem Verdichtungsverhältnis hat auch die Verbrennung einen großen Einfluss auf den Wirkungsgrad. Deswegen ist in [Abbildung 78](#) der Verbrennungsschwerpunkt dargestellt. Bei konstantem Zündzeitpunkt ergibt sich bei kurzen Ventilöffnungszeiten und niedrigen Lasten der früheste Verbrennungsschwerpunkt. Neben dem höheren Verdichtungsverhältnis ist dies ein weiterer Grund für die hohen Wirkungsgrade bei Miller 480.

Um einen detaillierteren Einblick in die Verbrennung zu erhalten, werden in den folgenden Diagrammen die charakteristischen Brenndauern der Verbrennung dargestellt. Dabei zeigt [Abbildung 79](#) die 0-10% Brenndauer, [Abbildung 80](#) die 10-50 % Brenndauer und [Abbildung 81](#) die 50-90 % Brenndauer. Es zeigt sich, dass die erste Verbrennungsphase (0-10 % BD) die kürzesten Werte bei niedrigen Lasten (vergleiche [Abbildung 32](#)) und hohen Verdichtungsverhältnissen (und folglich erhöhten Temperaturen in der Vorkammer) annimmt. Die Sensitivität der 0-10 % Brenndauer ist hauptsächlich für das Verhalten des Verbrennungsschwerpunktes verantwortlich.

Die 10-50 % Brenndauer nimmt mit steigendem Verdichtungsverhältnis und steigender Last ab (vergleiche [Abbildung 34](#)) wohingegen die 50-90% Brenndauer mit steigendem Verdichtungsverhältnis zu nimmt (vergleiche [Abbildung 35](#)).

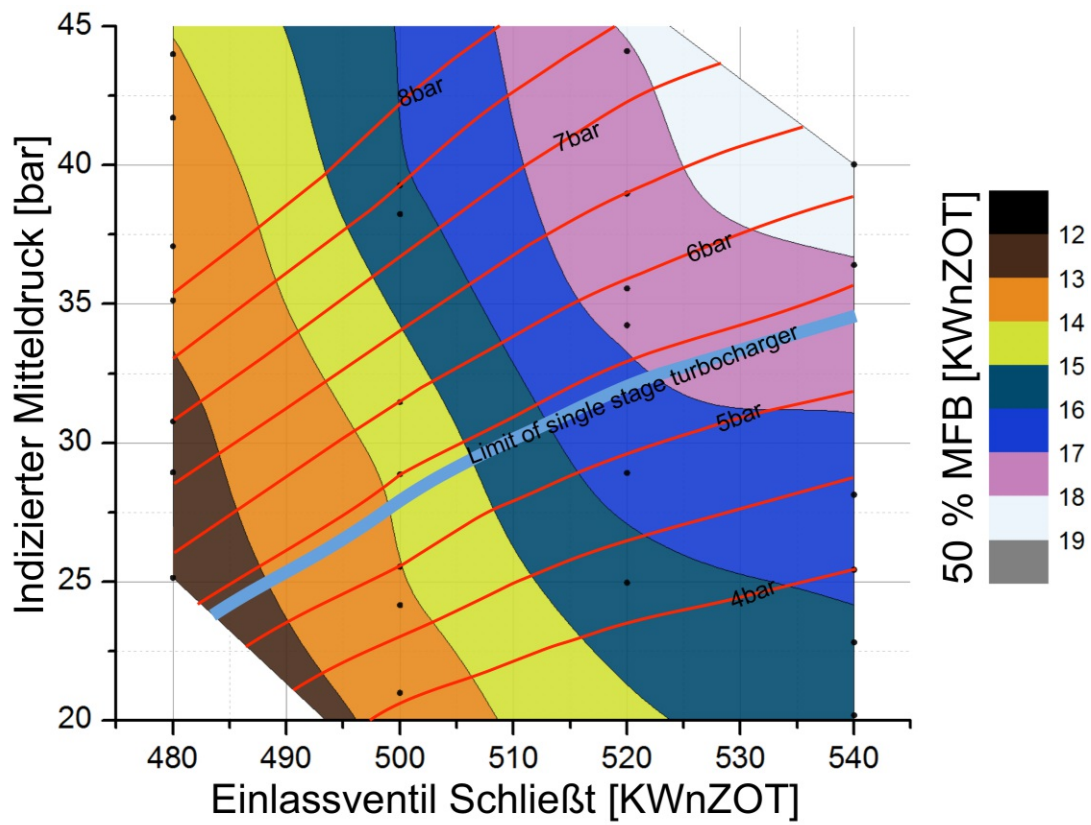


Abbildung 78: Verbrennungsschwerpunkt für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

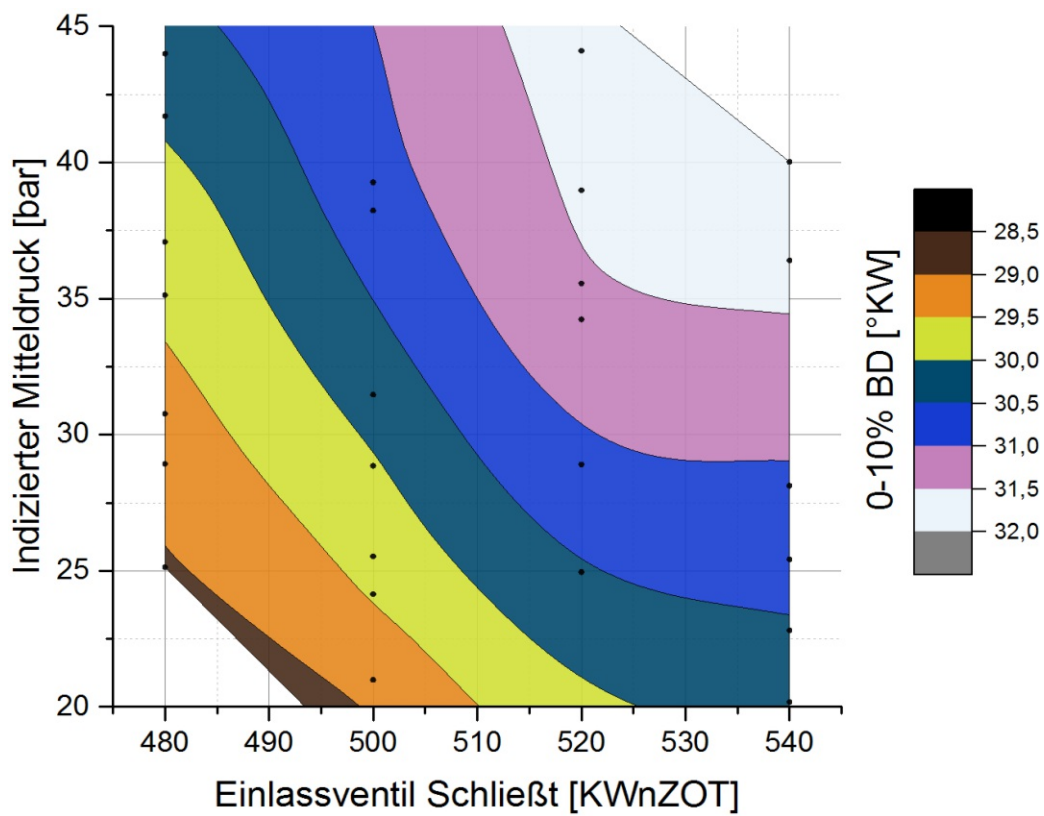


Abbildung 79: 0-10 % Brenndauer für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

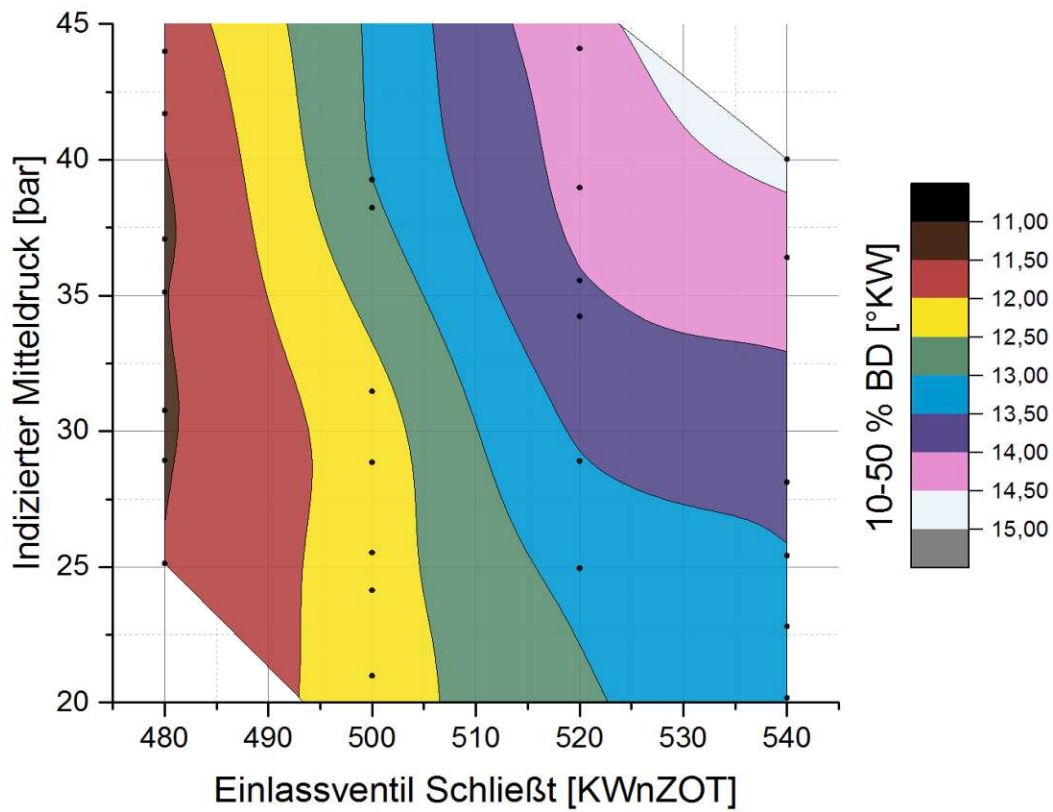


Abbildung 80: 10-50% Brenndauer für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

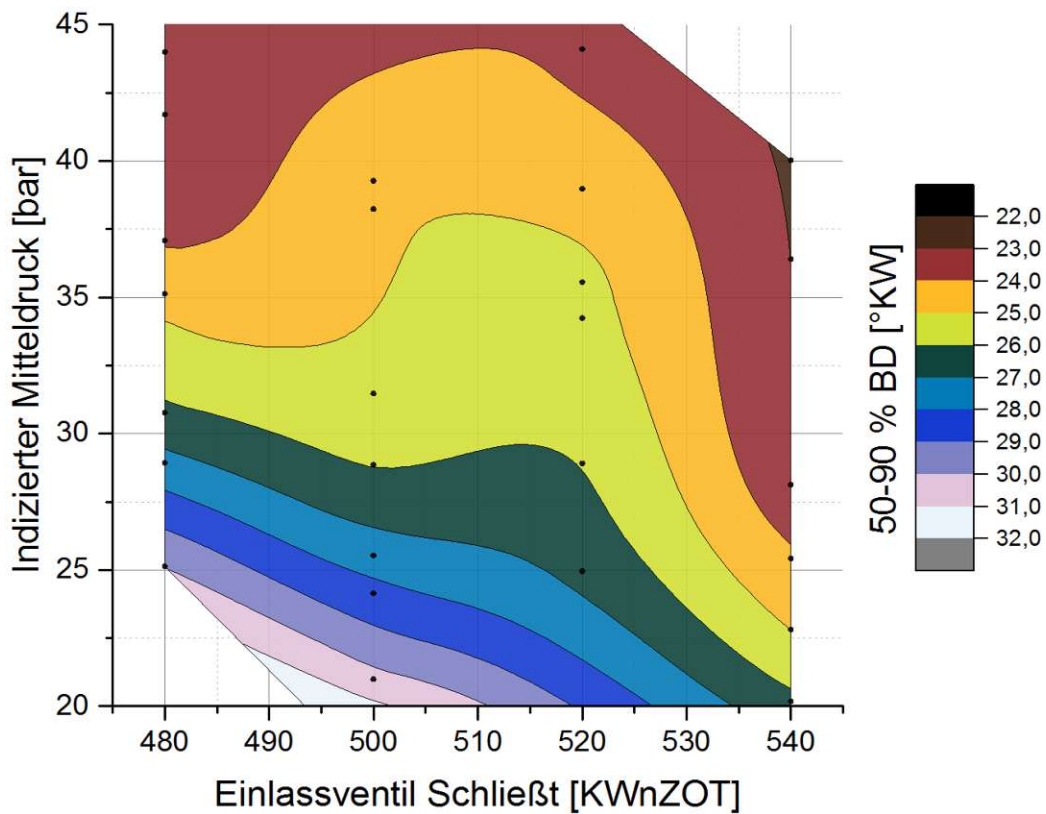


Abbildung 81: 50-90% Brenndauer für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

Durch das hohe Verdichtungsverhältnis und dem frühen Verbrennungsschwerpunkt ergeben sich für Miller 480 hohe Spitzendrücke, siehe [Abbildung 82](#). Dies wird vor allem bei hohen Lasten kritisch, da je nach Motorkonstruktion dies ein limitierender Faktor für die thermodynamische Auslegung sein kann.

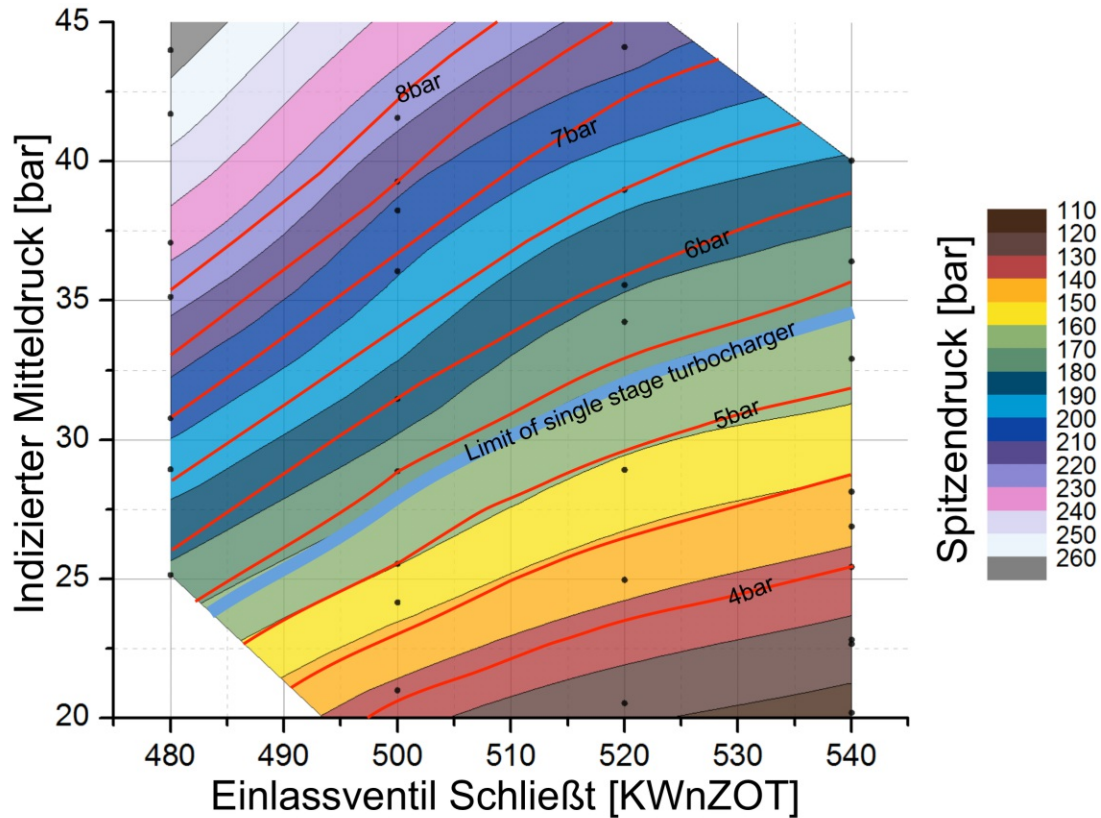


Abbildung 82: Spitzendruck für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

Das Äquivalenzverhältnis für NO_x-Emissionen gemäß *TA-Luft* bleibt über dem untersuchten Betriebsbereich annähernd konstant, da es hauptsächlich von der Temperatur in der verbrannten Zone abhängt. Diese nimmt einerseits für frühe EVS ab, und andererseits mit steigendem Verdichtungsverhältnis und Verbrennungsschwerpunkt zu. Beide Effekte egalieren sich bei einer Miller-Variation. Lediglich bei einem sehr hohen Verdichtungsverhältnis und frühen 50 % MFB, wie es beispielsweise für Miller 480 und niedrige Lasten möglich ist, zeigt sich die Notwendigkeit einer etwas stärkeren Abmagerung.

Da die Ladungswechselschleife in weiten Bereichen des Kennfeldes ein rechtslaufender Kreisprozess ist, wird zusätzliche Arbeit geleistet. Dieser Effekt ist vor allem bei hohen Ladedrücken und Miller-Zeiten zwischen 500 und 520 in [Abbildung 84](#) ersichtlich.

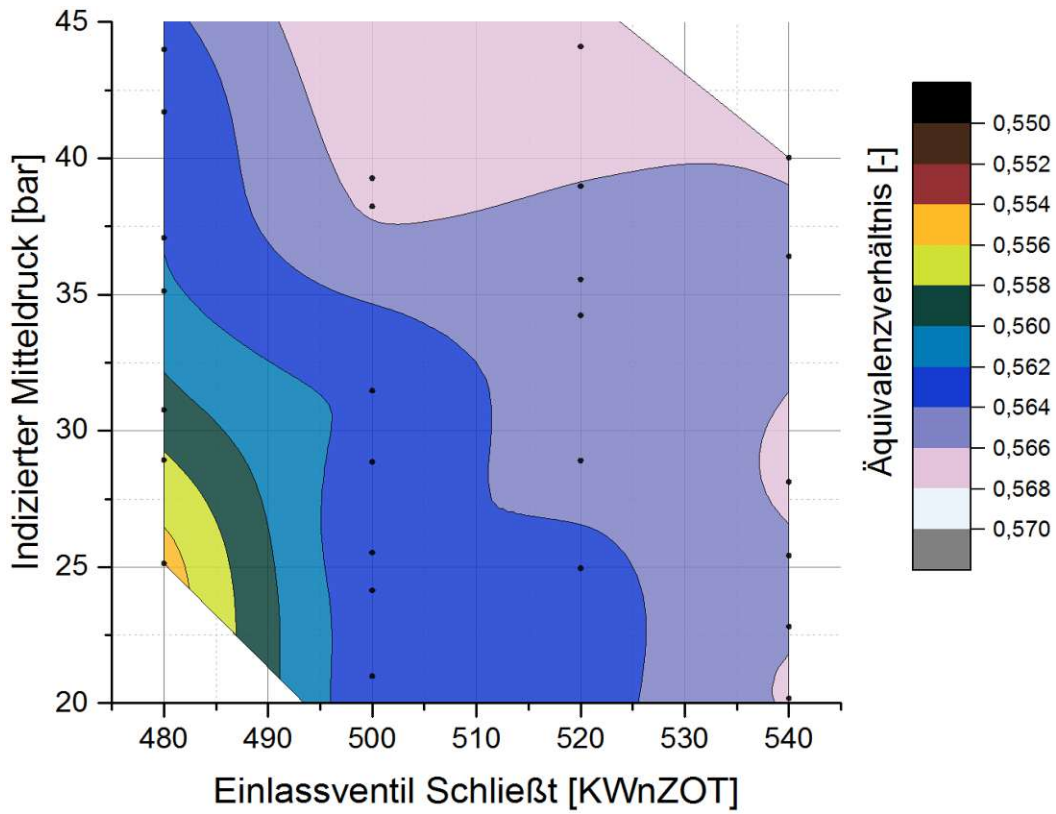


Abbildung 83: Äquivalenzverhältnis für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

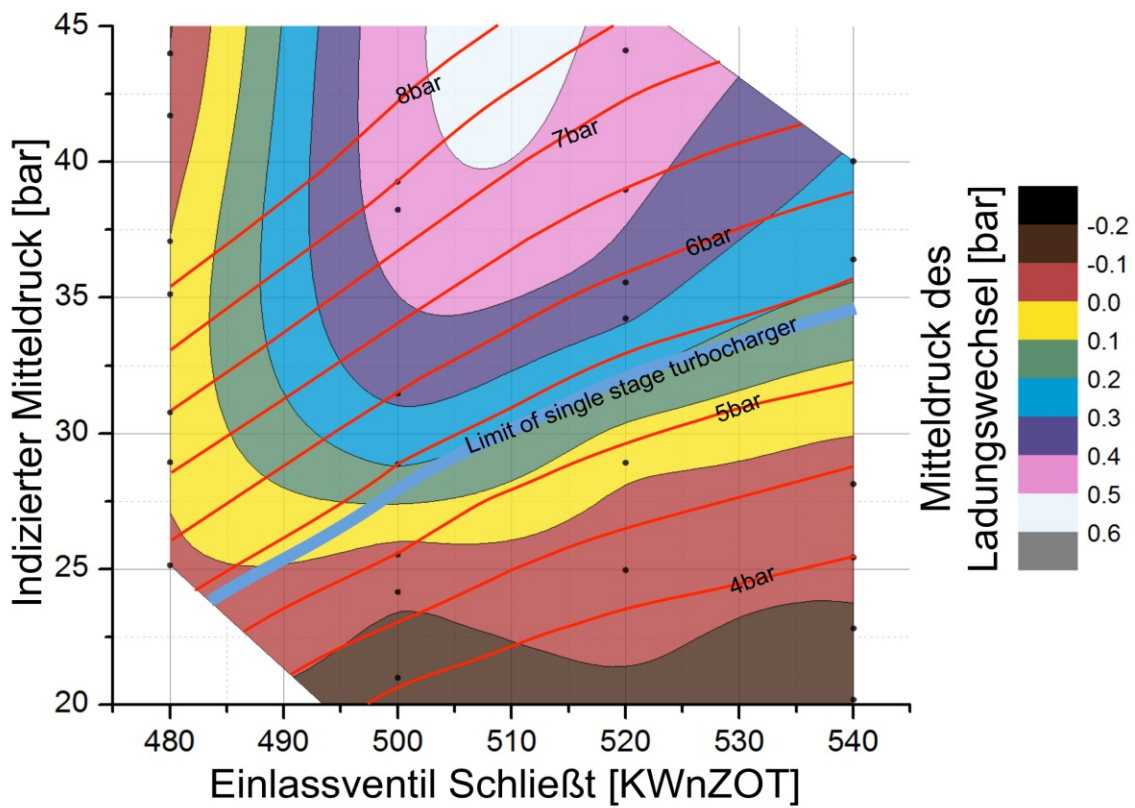


Abbildung 84: Mitteldruck während der ladungswechselschleife für unterschiedliche Mitteldrücke und Miller-Zeiten

Bei aggressiveren Miller-Zeiten nehmen die Verluste während des Einlasstaktes zu und der Effekt dreht sich um, wodurch sich negative Werte ergeben. Dies bedeutet, dass Arbeit für den Ladungswechsel aufgebracht werden muss. Da diese Nachteile durch die effizientere Hochdruckschleife überkompensiert werden, ergeben sich für Miller 480 trotzdem geringere Kraftstoffverbräuche bei hohen Lasten.

8.2. Numerische Optimierung des Motorprozesses

Die vorangegangenen Untersuchungen zeigten die Zusammenhänge zwischen Miller-Steuerzeit, Last und Wirkungsgrad für Großgasmotoren. Es ist anzunehmen, dass diese Zusammenhänge ebenfalls von der Klopfneigung des Kraftstoffes abhängen. Da die vorangegangenen Untersuchungen sehr zeitintensiv sind, stellen sie keine zielgerichtete Möglichkeit dar, um den Motorprozess in Abhängigkeit der Kraftstoffmischung optimal auszulegen. Dafür ist ein effizienterer Simulationsansatz für die Suche nach optimalen Betriebspunkten wünschenswert. Um dies zu erreichen, wurde ein Optimierungsverfahren in Zusammenarbeit mit dem Arbeitsbereich für *Algorithms and Complexity* des *Instituts für Computergraphik und Algorithmen* entwickelt [103] und mit *AVL BOOST* gekoppelt. Die Optimierungssoftware besteht aus drei Metaheuristiken, die sequenziell in drei Phasen abgearbeitet werden. Dadurch können die Stärken der einzelnen Algorithmen optimal genutzt werden und gleichzeitig die Schwächen der anderen ausgeglichen werden. Ein Überblick über den Optimierungsablauf gibt Abbildung 85.

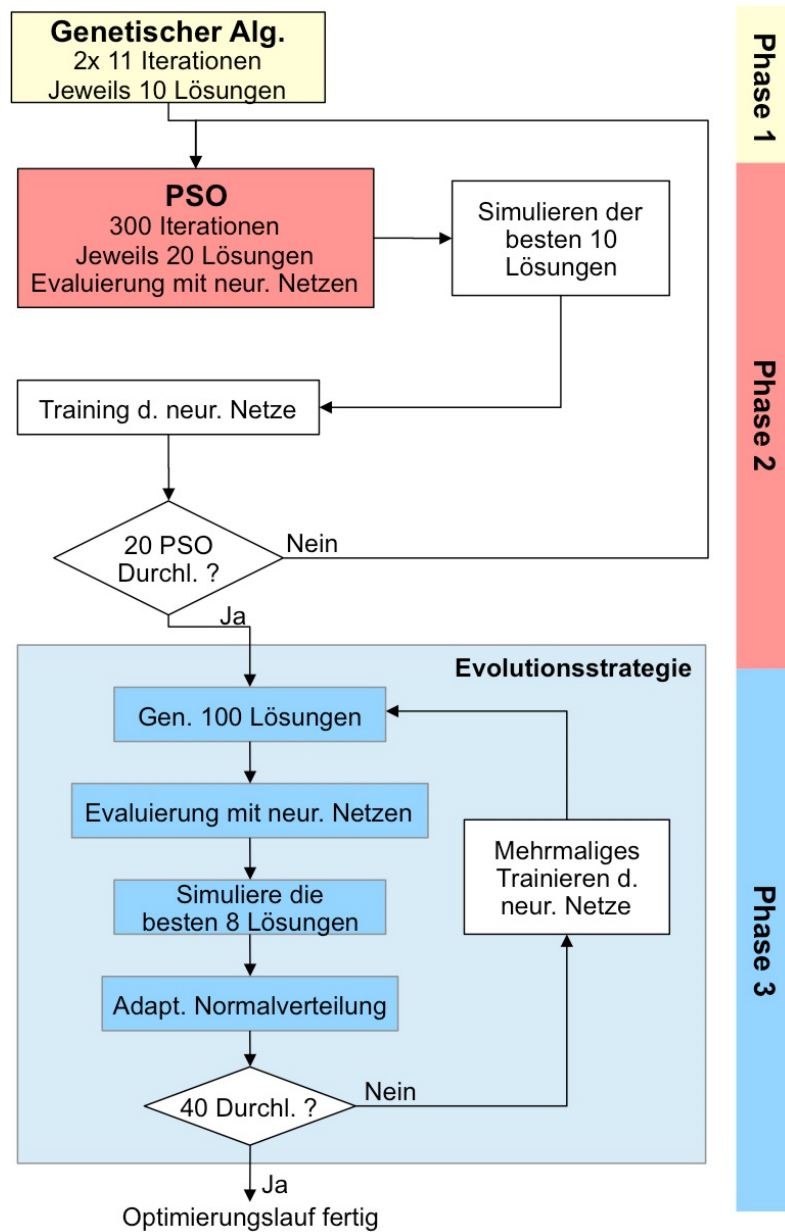


Abbildung 85: Flussdiagramm eines Optimierungsdurchlaufes

Die erste Phase verwendet einen Zufalls-Algorithmus und erzeugt einen Pool an Startlösungen für die weiteren Phasen. Über einen frei wählbaren Gewichtungsfaktor kann während der ersten Phase ein *Genetischer Algorithmus* (GA) überlagert werden. Wichtig ist, dass die Startlösungen eine große Divergenz aufweisen. Die zweite Phase besteht aus einer *Partikelschwarmoptimierung* (PSO) und stellt das zentrale heuristische Verfahren des Optimierungsansatzes dar. Dabei wird nach dem Vorbild des biologischen Schwarmverhaltens von Tieren eine Lösung für ein Optimierungsproblem gesucht. Für jeden Rechenschritt wird eine individuelle Population von Lösungen im Suchraum entsprechend des natürlichen Phänomens bewegt, um eine gute Lösung des Problems zu finden. Für die weitere Verbesserung bereits guter Lösungen wird in der dritten Phase eine

Evolution Strategie (ES) mit „*Active Covariance Matrix Adaption*“ (ACMAES) eingesetzt. Dabei werden Lösungen durch eine lokale Suche verbessert. Zusätzlich werden Informationen über erfolglose Mutationsschritte berücksichtigt.

Aufgrund der langen Berechnungszeit von ungefähr 30 min pro Simulation ist die Berechnung einer großen Anzahl an Lösungen nicht zielführend. Um die Berechnungszeit zu reduzieren, wurden während Phase 2 und 3 neuronale Netze eingesetzt um unbekannte Modellkonfigurationen zu approximieren. Durch die Diskretisierung des Lösungsraums auf ein reguläres Gitter wurde die Anzahl der Lösungskonfigurationen weiter limitiert. Dadurch wird das Berechnen von gleichen bzw. ähnlichen Lösungen verhindert.

Die eingesetzte Konfiguration des Optimierungsalgorithmus besteht aus insgesamt 600 Lösungen, die auf 10 Prozessoren parallel berechnet wurden. Dadurch ergibt sich eine Optimierungsdauer von zirka 36 Stunden.

Ein detaillierter Einblick in die Optimierungsmethodik und dessen Ablauf kann in [104, 105] gefunden werden.

8.2.1. Optimierungsrandbedingungen

Das Optimierungsziel stellt ein minimaler Kraftstoffverbrauch bei Einhaltung der gesetzlichen NO_x -Grenzwerte dar. Drei unterschiedliche NO_x -Grenzwerte, nämlich *TA Luft* (0.5 g/Nm³_{5%O₂}), *TA Luft 1/2* (0.25 g/Nm³_{5%O₂}) und *IMO Tier 3* (2.08 g/kWh) [74, 106], wurden betrachtet. Weiters wird ein kloppfreier Motorbetrieb als Randbedingung verlangt. Der Optimierungsraum besteht aus fünf Parametern, dessen Wertebereich und Diskretisierung in Tabelle 10 gegeben sind.

| Parameter | Min. Wert | Max. Wert | Diskretisierung | | |
|---------------------------------------|-----------|-----------|-----------------|---------|---------|
| | | | Phase 1 | Phase 2 | Phase 3 |
| Verdichtungsverhältnis [-] | 11.5 | 14.5 | 7 | 13 | 13 |
| Kraftstoffanteil ⁹ [kg/kg] | 0.0302 | 0.03505 | 10 | 28 | 28 |
| Saugrohrdruck [bar] | 3.5 | 6.5 | 13 | 25 | 25 |
| ZZP [KWnZOT] | -32 | -22 | 6 | 11 | 11 |
| EVS [KWnZOT] | 480 | 540 | 4 | 4 | 4 |

Tabelle 10: Wertebereich und Diskretisierung der Optimierungsparameter

⁹ Bei Kraftstoffen mit Inert-Anteilen wurde der reine Kohlenwasserstoffanteil betrachtet.

Tabelle 11 zeigt die Zusammensetzung der neun untersuchten Kraftstoffmischungen (KM). Die ersten fünf Mischungen bestehen aus Methan mit unterschiedlichen Propan-Beimischungen. Dadurch ergibt sich eine annähernd gleichmäßige Variation der Methanzahl zwischen 100 und 43 [15]. KM6 und 7 basieren auf KM3, beinhalten allerdings einen CO₂-Anteil von 30 bzw. 60 %. Bei den letzten zwei Mischungen wurde die CO₂-Beimischung von KM6 bzw. 7 durch N₂ ersetzt. Anhand der letzten vier Mischungen kann der Einfluss des Inert-Anteiles im Kraftstoff bewertet werden. Die übrigen Modellrandbedingungen decken sich mit Kapitel 8.1. Insgesamt ergaben sich 27 Optimierungsläufe, deren Ergebnisse im Folgenden diskutiert werden.

| Kraftstoffmischung | Methanzahl | Kraftstoffzusammensetzung | | | |
|--------------------|------------|----------------------------|--|---------------------------|----------------------------|
| | | CH ₄ [Vol-%] | C ₃ H ₈ [Vol-%] | N ₂ [Vol-%] | CO ₂ [Vol-%] |
| 1 | 100 | 100 | 0 | 0 | 0 |
| 2 | 75 | 95 | 5 | 0 | 0 |
| 3 | 65 | 90 | 10 | 0 | 0 |
| 4 | 53 | 80 | 20 | 0 | 0 |
| 5 | 43 | 60 | 40 | 0 | 0 |
| 6 | 96 | 63 | 7 | 30 | 0 |
| 7 | 126 | 36 | 4 | 60 | 0 |
| 8 | 77 | 63 | 7 | 0 | 30 |
| 9 | 99 | 36 | 4 | 0 | 60 |

Tabelle 11: Zusammensetzung der untersuchten Kraftstoffe

8.2.2. Ergebnisse der Optimierungsläufe

Abbildung 86 zeigt die Ergebnisse für den optimalen Motorbetrieb für die KM 1 bis 5. Die Ergebnisse sind jeweils für drei Emissionsgrenzwerte dargestellt.

Anhand des oberen linken Diagramms ist ersichtlich, dass der maximale Wirkungsgrad mit steigender Methanzahl wie erwartet zunimmt. Dadurch zeigen die roten und blauen Linien, dass für *TA Luft* und *IMO Tier 3* die klopfende Verbrennung der limitierende Faktor für eine Wirkungsgradsteigerung ist. Daneben hat die Schadstoffgesetzgebung ebenfalls einen Einfluss auf den maximalen Wirkungsgrad. Aufgrund des hohen NO_x-Grenzwertes bei *IMO Tier 3* erreicht die rote Linie die höchsten Wirkungsgrade. Der Unterschied zwischen *IMO Tier 3* und *TA Luft* bleibt allerdings für alle untersuchten Methanzahlen relativ konstant.

Im Gegensatz dazu bewirkt die Reduktion der Emissionen von *TA Luft* auf *TA Luft 1/2* eine deutliche Abnahme des Wirkungsgrades. Bemerkenswert ist, dass die Differenz zwischen beiden NO_x -Grenzwerten mit steigender Methanzahl zunimmt. Der Grund dafür liegt darin, dass bei *IMO Tier 3* und *TA Luft* jeweils die klopfende Verbrennung der maßgebliche limitierende Faktor ist. Bei *TA Luft 1/2* gewinnt die NO_x -Bildung an Bedeutung. Der gesamte Motorprozess ist somit durch Maßnahmen limitiert, die den Stickoxidausstoß reduzieren. Dazu zählt vor allem eine magere Verbrennung, die zu einer langsameren Verbrennung führt. Dies ist durch den Vergleich der drei Diagramme für reines MZ65 in Abbildung 87 ersichtlich (grüne Linien). Als Folge ergibt sich für *TA Luft 1/2* keine Wirkungsgradzunahme mehr ab einer Methanzahl von 65.

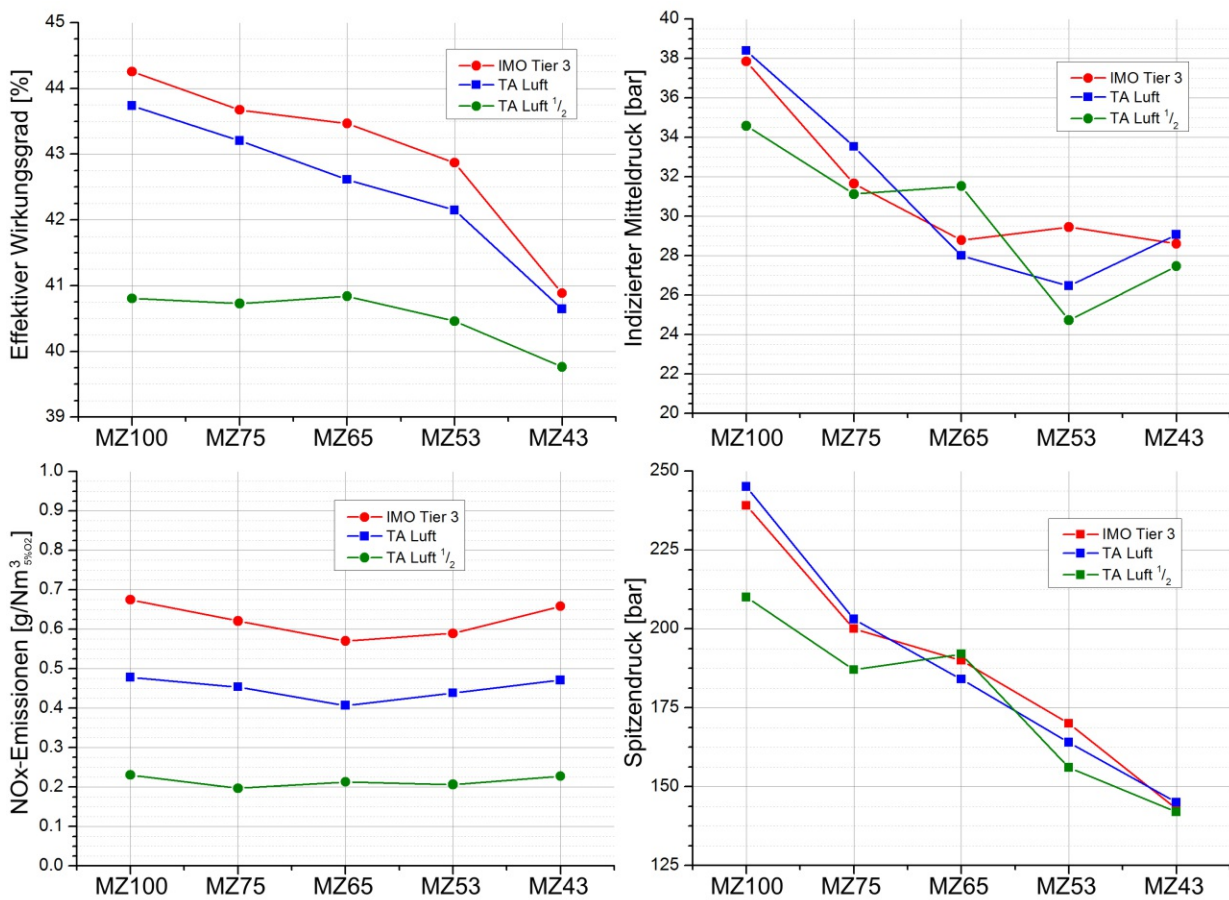


Abbildung 86: Optimales Betriebsverhalten für unterschiedliche Kraftstoffe und NO_x -Grenzwerte

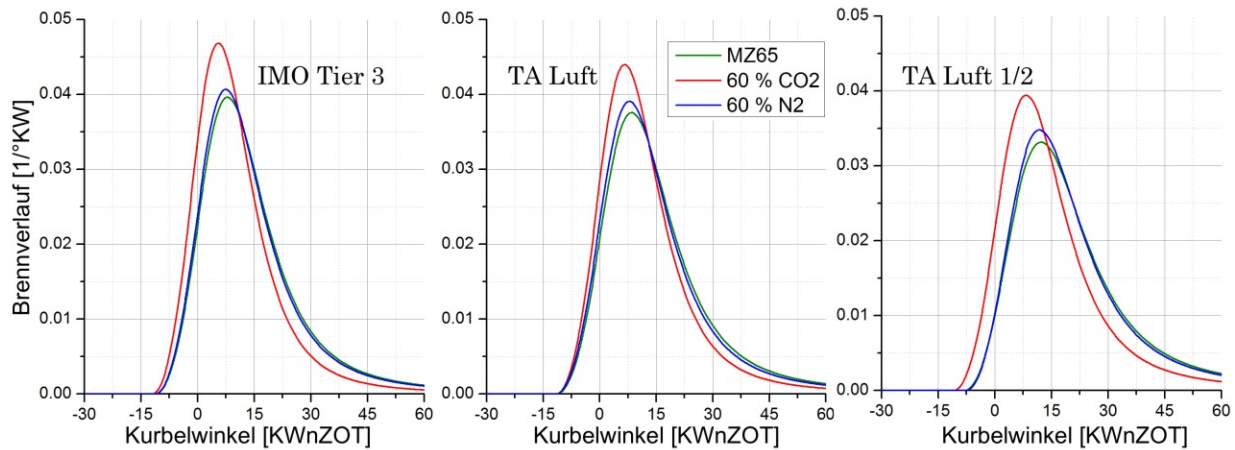


Abbildung 87: Heizverlauf für unterschiedliche Inert-Beimischungen und Emissionsgrenzwerte

In [Abbildung 86](#) ist weiters ersichtlich, dass der optimale Mitteldruck und der optimale Spitzendruck mit steigender Klopffestigkeit des Kraftstoffes zunehmen. Um dieses Verhalten genauer darzustellen, zeigt [Abbildung 87](#) die optimalen Betriebsparameter. Für alle Kraftstoffmischungen ist ein Saugrohrdruck am oberen Wertebereich von 6.5 bar optimal. Um eine klopfende Verbrennung zu verhindern, ist für die Kraftstoffe mit niedriger Methanzahl eine frühe Miller-Steuerzeit von 480 KWnZOT notwendig. Zusätzlich ist für MZ43 ein reduziertes Verdichtungsverhältnis erforderlich, wodurch sich ein niedriger Wirkungsgrad und Spitzendruck für diese Kraftstoffmischung ergeben.

Mit steigender Methanzahl nimmt die Klopfneigung des Kraftstoffes ab und längere Öffnungszeiten des Einlassventils können zugelassen werden. Bei MZ65 und *TA Luft 1/2* verschiebt sich beispielsweise die optimale Miller-Zeit auf 500 KWnZOT. Für die beiden anderen NO_x-Grenzwerte ist Miller 480 weiterhin optimal, da das Endgas durch den höheren Kraftstoffanteil empfindlicher für eine Selbstzündung ist. Ab MZ75 weisen alle drei Emissionsgesetzgebungen eine optimale Miller-Zeit von 500 KWnZOT auf und für MZ100 schlussendlich eine von 520 KWnZOT. Der hohe Kraftstoffanteil bei niedrigen Methanzahlen ist einerseits auf den niedrigeren Heizwert dieser Mischungen zurückzuführen [107]. Andererseits ist aufgrund der niedrigen Ladungstemperatur¹⁰ eine geringere Abmagerung notwendig, um die NO_x-Grenzwerte einzuhalten.

¹⁰ Die niedrigen Ladungstemperaturen ergeben sich durch das geringe Verdichtungsverhältnis und die aggressive Miller-Strategie.

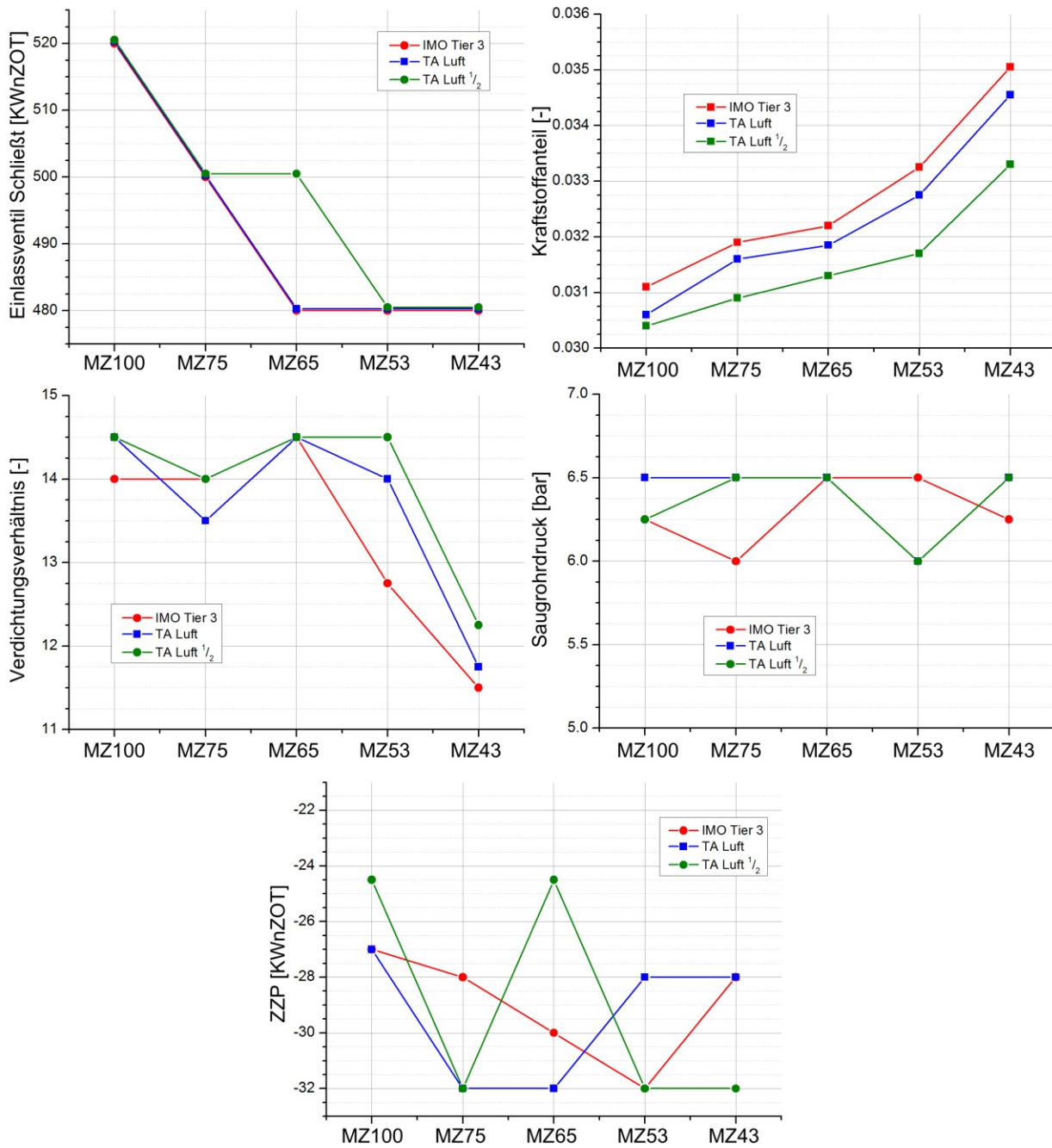


Abbildung 88: Optimale Betriebsparameter für unterschiedliche Kraftstoffe und Emissionsgrenzwerte

Anhand der Ergebnisse ist ersichtlich, dass der Optimierungsalgorithmus versucht, den Ladedruck und die Ventilöffnungszeit zu maximieren. Dadurch werden hohe Mitteldrücke erreicht und die anteiligen Reibungsverluste nehmen ab. Ähnliches wurde bereits in Kapitel 8.1 beobachtet. Gleichzeitig sind Maßnahmen erforderlich, die die klopfende Verbrennung verhindern. Ziel dabei ist es, die negativen Auswirkungen dieser Maßnahmen auf den Wirkungsgrad so gering wie möglich zu halten. Es zeigt sich, dass die Anpassung der Einlassventilzeit die günstigste Maßnahme ist. Wenn diese nicht ausreichend ist,

beispielsweise für MZ43, ist eine Reduktion des Verdichtungsverhältnisses der nächste Schritt.

Wie bereits erwähnt wurde, ist die primäre Maßnahme zur Erreichung von NO_x -Grenzwerten eine magere Verbrennung. Speziell für $\text{TA Luft } \frac{1}{2}$ führt dies zu einer langsamen und daher ungünstigen Verbrennung. Eine weitere Möglichkeit die Spitzentemperaturen im Zylinder zu reduzieren ist die Erhöhung der thermischen Masse durch Inert-Anteile im Kraftstoff. Biogas enthält beispielsweise hohe Kohlendioxidanteile. Aufgrund der hohen molaren Masse ist CO_2 besonders geeignet, um die thermische Masse zu erhöhen [107]. Deswegen zeigt Abbildung 89 die Auswirkungen unterschiedlicher CO_2 -Beimischungen zu KM3 (MZ65) und vergleicht sie mit N_2 -Beimischungen. Dadurch ist der positive Einfluss auf den Wirkungsgrad speziell für $\text{TA Luft } \frac{1}{2}$ ersichtlich.

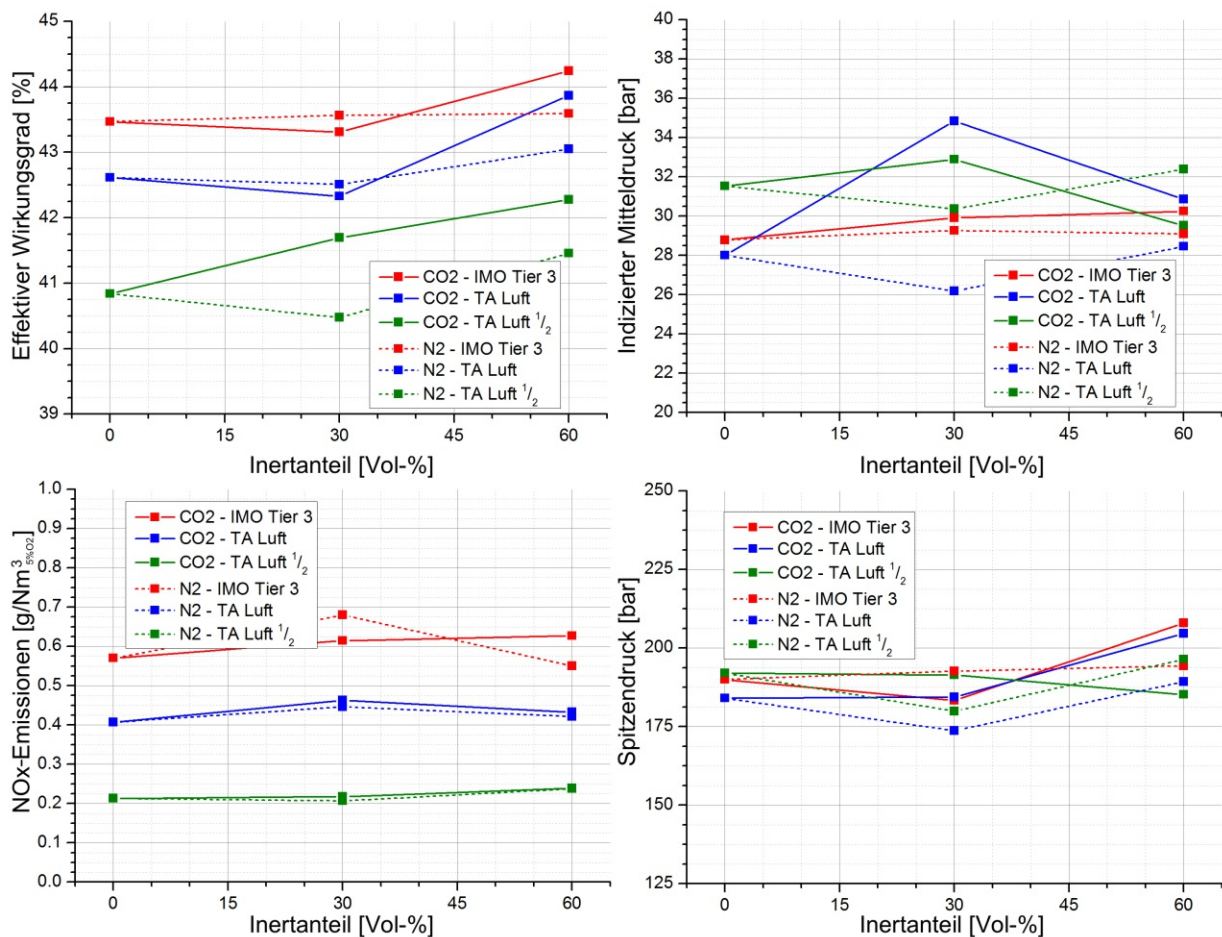


Abbildung 89: *Optimales Betriebsverhalten für unterschiedliche Inert-Anteile zu KM3 und NO_x -Grenzwerte*

In Abbildung 90 ist ersichtlich, dass bei einer CO_2 -Beimischung von 60 % der Kohlenwasserstoffanteil in der Zylinderladung aufgrund der erhöhten thermischen Masse deutlich höher ist als bei KM3. Dadurch ergibt sich eine schnellere und stabilere Verbrennung, siehe rote Linie in Abbildung 87, die zu einer Erhöhung des Wirkungsgrades

speziell bei *TA Luft* $\frac{1}{2}$ beiträgt. Für die anderen Emissionsstandards kann ebenfalls eine positive Auswirkung von hohen Inert-Anteilen beobachtet werden, allerdings ist der Einfluss geringer.

Weiters zeigt sich, dass durch die geringere molare Masse der Einfluss von N_2 ungefähr halb so groß ist wie bei CO_2 [107].

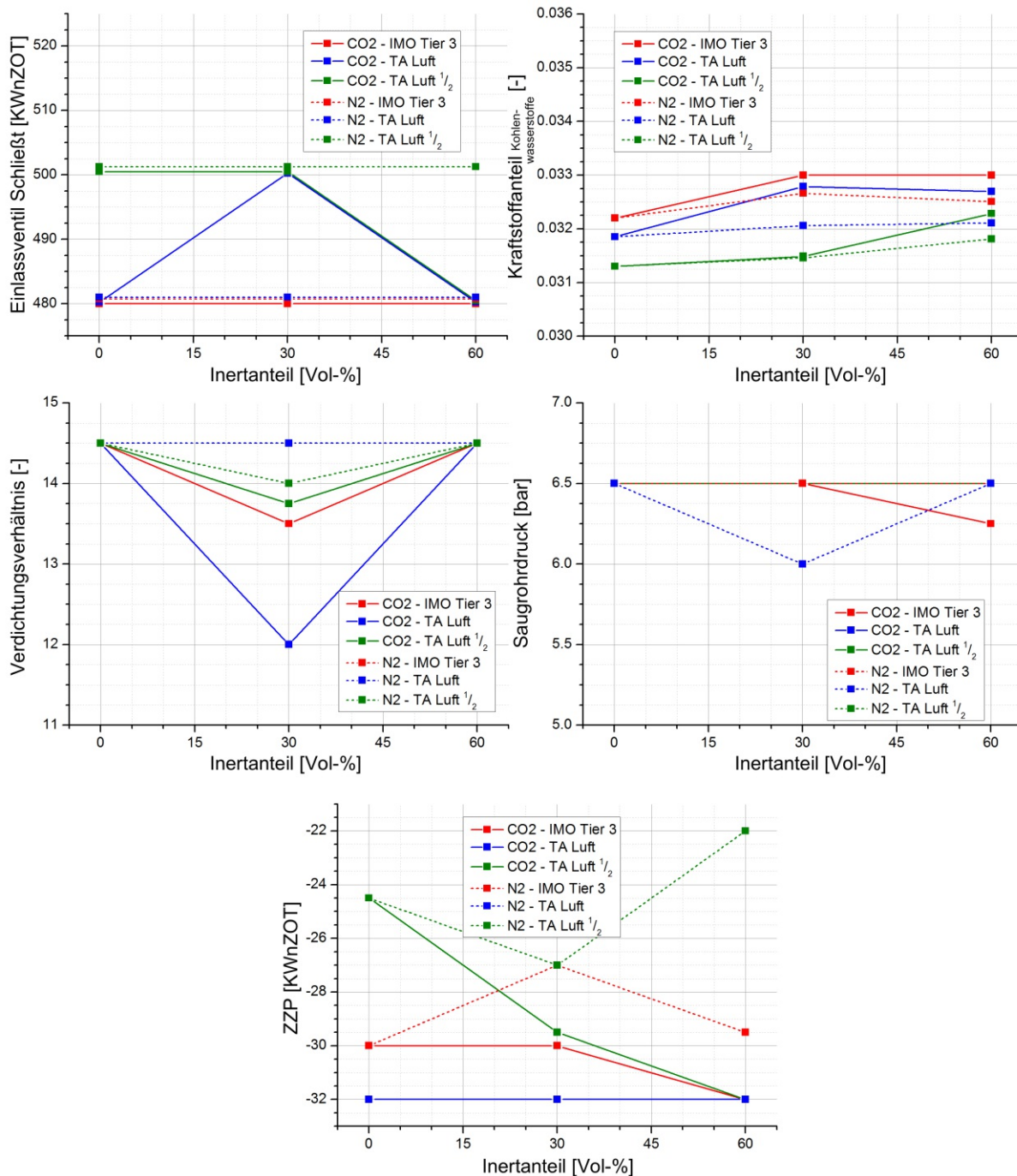


Abbildung 90: *Optimale Betriebsparameter für unterschiedliche Emissionsgrenzwerte und Inert-Beimischungen (zu KM3)*

9. Zusammenfassung

Zukünftig wird die Notwendigkeit einer effizienten und nachhaltigen Energieerzeugung weiter steigen. Zusätzlich wird der Schadstoffausstoß durch Gesetzgebungen wie die *IMO Tier 3*, *TA-Luft 1/2* oder *EU6* weiter gesenkt werden. Ein niedriger Ausstoß von Schadstoffen wie Stickoxid und Ruß führt bei klassischen Dieselmotoren zu Einbußen beim Wirkungsgrad und verursacht erhöhte Investitionskosten, wodurch Großgasmotoren eine steigende Attraktivität erfahren werden.

Brennverfahren mit hohem Luft/Kraftstoff-Verhältnis ermöglichen geringe Spitzentemperaturen und reduzieren dadurch Wandwärmeverluste und Stickoxidemissionen. Dem gegenüber steht eine geringere Verbrennungsstabilität, wodurch zyklische Schwankungen zunehmen und Fehlzündungen eintreten können. Um dem entgegen zu wirken, werden hochkomplexe Zündsysteme eingesetzt. Die Anzahl der Entwicklungsparameter steigt somit weiter, wodurch die bereits aufwendige Gasmotorenentwicklung zusätzlich erschwert wird. Durch klassische Entwicklungswerkzeuge wie den Motorprüfstand wird eine zielgerichtete und kostengünstige Entwicklungskette immer schwieriger. Numerische Methoden können den Entwicklungsprozess unterstützen und den Parameterraum für die experimentellen Untersuchungen deutlich einschränken. Dadurch können vorab Betriebspunkte identifiziert werden, die höchste Wirkungsgrade unter Einhaltung der Schadstoffgesetzgebung erreichen. Die numerischen Modelle müssen dafür die Thermodynamik des Verbrennungsprozesses und die kinetisch kontrollierten Prozesse der Selbstzündung und Schadstoffentstehung für unterschiedliche Kraftstoffe mit hoher Genauigkeit wiedergeben. Die vorliegende Arbeit beschreibt deshalb einen Simulationsansatz auf Basis der Motorprozessrechnung, der durch den Einsatz von Reaktionskinetik auch die Reaktionsprozesse mitberücksichtigt und gleichzeitig kurze Rechenzeiten aufweist.

Dafür wurde ein 1D-Ladungswechselmodell mit prädiktivem Verbrennungsmodell aufgesetzt und an den Einzylinder-Versuchsmotor angepasst. Um die Genauigkeit des prädiktiven Verbrennungsmodells zu steigern, wurden einerseits LES-Simulationen durchgeführt. Dadurch konnte die Flammenausbreitung in der Vorkammerzündkerze und im Zylinder detailliert untersucht werden. Andererseits wurden experimentelle Untersuchungen durchgeführt, um den Einfluss unterschiedlicher Betriebsparameter auf das Brennverfahren zu ermitteln.

Um die kinetisch kontrollierten Prozesse unter transienten Randbedingungen zu untersuchen, wurde ein stochastisches Reaktormodell eingesetzt. Damit wurden Reaktionsmechanismen für gasförmige Kraftstoffe unter motorischen Bedingungen validiert. Es zeigte sich, dass der Reaktionsmechanismus *NATURAL GAS III* aus Galway die Nieder- und Übergangstemperaturchemie einer Selbstzündung mit sehr guter

Genauigkeit beschreibt. Der Zeitpunkt der Selbstzündung in der unverbrannten Zone konnte in guter Übereinstimmung mit zyklusaufgelösten Indizierdaten berechnet werden. In Zusammenarbeit mit dem *Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und Technische Biowissenschaften* der *Technischen Universität Wien* wurde der Mechanismus von 293 auf 60 Spezies reduziert. Durch die Untersuchungen mit dem stochastischen Reaktormodell zeigte sich ebenfalls, dass der Reaktionsmechanismus für die Stickstoffoxidbildung der *UC San Diego* die Stickoxidbildung in der verbrannten Zone mit guter Genauigkeit wiedergibt. Von diesem *NO_x Add-on* wurde ein Reaktionsmechanismus für die Verwendung im 1D-Modell abgeleitet und auf den Einsatzbereich von Großgasmotoren reduziert.

Da die klopfende Verbrennung mit den schnell brennenden Zyklen korreliert, wurden experimentelle Daten eines Großgasmotors mit Vorkammerzündkerze im Hinblick auf die Verbrennungsstatistik untersucht. Größen der zyklischen Schwankungen wie die Schwankungsbreite der 0-10 % Brenndauer bestimmen dabei das Einsetzen der Selbstentzündung. Folglich wurde ein empirisches Zyklusschwankungsmodell basierend auf den turbulenten und chemischen Kenngrößen der turbulenten Verbrennung entwickelt. Das empirische Zyklusschwankungsmodell und die reduzierten Reaktionsmechanismen wurden in das prädiktive Ladungswechselmodell implementiert. Mit dem resultierenden prädiktiven Motormodell können dadurch die klopfende Verbrennung und die Stickoxidbildung für unterschiedliche Kraftstoffmischungen und Betriebspunkte mit hoher Genauigkeit berechnet werden.

Das detaillierte Motormodell wurde im letzten Teil dieser Arbeit eingesetzt, um den Wirkungsgrad für unterschiedliche Kraftstoffmischungen und Emissionsgrenzwerte zu optimieren. Motorbetriebsgrößen wie die Schließzeit der Einlassventile, der Zündzeitpunkt, der Ladedruck, das Luft/Kraftstoff-Verhältnis und das Kompressionsverhältnis bildeten den Parameterraum. Zur effizienten Suche im Parameterraum wurde *AVL BOOST* mit einem Optimierungsalgorithmus gekoppelt. Die optimalen Betriebsparameter wurden für unterschiedliche Kraftstoffe mit Methanzahl zwischen 43 und 100 ermittelt und führten zu einer deutlichen rechnerischen Kraftstoffeinsparung. Es zeigte sich, dass hohe Ladedrücke vorteilhaft für gute Wirkungsgrade sind. Frühe Schließzeiten der Einlassventile stellten sich als günstigste Möglichkeit heraus, um die klopfende Verbrennung für klopfkritische Kraftstoffe zu vermeiden. Der Einfluss unterschiedlicher Emissionsgrenzwerte konnte ebenfalls quantifiziert werden. Die strengen Grenzwerte der Verordnung *TA Luft ½* führen zu deutlichen Wirkungsgradeinbußen im Vergleich zu *TA Luft* und *IMO TIER 3*. Die positive Wirkung von hohen Inert-Anteilen im Kraftstoff konnte speziell für *TA Luft ½* nachgewiesen werden.

Der entwickelte numerische Ansatz besitzt ein großes Potenzial um die zukünftige Großgasmotorenentwicklung zu unterstützen um noch höhere Wirkungsgrade zu realisieren.

Als nächster Schritt sollte genau dieser Einsatz während der Entwicklung einer neuen Motorengeneration durchgeführt werden. Dabei kann die Methodik weiterentwickelt werden und so eine noch bessere Validierung der Modelle erreicht werden. Da eine Limitierung der HC-Emissionen durch zukünftige Gesetzgebungen wahrscheinlich ist, sollte das Modell auch in diese Richtung weiterentwickelt werden.

Es sollten auch Entwicklungsbereiche im Auge behalten werden, bei denen die Ladungswechselrechnung nicht einsetzbar ist. Dazu zählt vor allem die Optimierung des Brennraumes in Hinblick auf eine schnellere und stabilere Verbrennung. Die CFD Rechnung mit LES Ansatz hat gezeigt, dass hierfür ebenfalls vielversprechende Modelle vorhanden sind und trotz des hohen Rechenzeitbedarfs ein wichtiger Mehrwert vorhanden ist. Allerdings ist die Weiterentwicklung der LES-spezifischen Modelle zwingend erforderlich. Beispielsweise haben die Untersuchungen noch Schwachstellen in der Abbildung des Entzündungsvorganges und der wandnahen Verbrennung gezeigt. Könnten diese Schwierigkeiten beseitigt werden, ist ein noch breiterer Einsatz der Simulation in allen Bereichen der Motorenentwicklung zielführend.

10. Literaturverzeichnis

1. Samimi, A. and Zarinabadi, S., "Reduction of greenhouse gases emission and effect on environment." *Journal of American Science*, 2012. **8**(8): p. 1011-1015.
2. Stocker, T., Qin, D., Plattner, G.-K., Tignor, M., Allen, S.K., Boschung, J., Nauels, A., Xia, Y., Bex, V. and Midgley, P.M., "Climate change 2013: The physical science basis. 2014: Cambridge University Press Cambridge, UK, and New York.
3. Spicher, U. and Eichlseder, H., "Zukunft des Verbrennungsmotors," in *Grundlagen Verbrennungsmotoren*. 2014, Springer. p. 1031-1083.
4. Dudley, B., *BP statistical review of world energy*. 2015, BP technical report.
5. Boltz, W. "Preisentwicklung und Versorgungssicherheit bei Erdgas." in *ÖAMTC Expertenforum - Erdgas als Alternative*. 2013. Wien.
6. Steinbacher, V. "Energierohstoffe im 21. Jahrhundert - Reserven, Ressourcen und Verfügbarkeit fossiler Energierohstoffe." in *ÖAMTC Expertenforum - Erdgas als Alternative*. 2013. Wien.
7. "I. E. Agency, World Energy Outlook 2012, Paris: International Energy Agency, 2012."
8. Baufeld, T., Lustgarten, G., Murakami, S. and Stoewe, C. "Combustion Concepts for Future Gas Engines." in 12. Conference "The Working Process of the Internal Combustion Engine". 2009. Graz
9. Wimmer, A., "Thermodynamik des Verbrennungsmotors-Vorlesungsskript." Technische Universität Graz-Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik, 2007.
10. Kammerstätter, S., *Verbrennungsablauf und Schadstoffbildung in Erdgas-Großmotoren mit Vorkammerzündung*. 2012, Technische Universität München.
11. Eichlseder, H., Klüting, M. and Piock, W., "Grundlagen und Technologien des Ottomotors. 2008: Springer-Verlag.
12. Geringer, B. and Hofmann, P., *Alternative Antriebe*. 2015, Skriptum zur Vorlesung 315.725, Technische Universität Wien.
13. Zitzler, G., "Analyse und Vorausberechnung der Brennverläufe von Gasmotoren bei Einsatz verschiedener Gasarten. 2003: Biblion.
14. van Basshuysen, R., "Erdgas und erneuerbares Methan für den Fahrzeugantriebs-Wege zur klimaneutralen Mobilität. 2015: Springer Fachmedien Wiesbaden.
15. Christoph, K., Cartellieri, W. and Pfeifer, U., "Die Bewertung der Klopfestigkeit von Kraftgasen mittels der Methanzahl und deren praktische Anwendung bei Gasmotoren." *MTZ-Motortechnische Zeitschrift*, 1972. **33**(10).

16. Porpatham, E., Ramesh, A. and Nagalingam, B., "Investigation on the effect of concentration of methane in biogas when used as a fuel for a spark ignition engine." *fuel*, 2008. **87**(8): p. 1651-1659.
17. Murakami, S. and Baufeld, T. "Current status and future strategies of gas engine development." in 27th CIMAC World Congress on Combustion Engine, No. 413, 20130705903. 2013. Shanghai
18. Schneßl, E., Kogler, G. and Wimmer, A. "Large gas engine concepts for gases with extremely low calorific value." in 6. Dessau Gas Engine Conference. 2009. Dessau-Roßlau
19. Herdin, G., Herdin, R., Grewe, F. and Warkentin, P. "Wirkungsgradpotenziale bei der ungespülten Vorkammer." in 14. Conference "The Working Process of the Internal Combustion Engine". 2013. Graz
20. Chmela, F., Wimmer, A., Engelmayer, M. and Winter, H. "Virtuelle Brennverfahrensentwicklung bei Großmotoren." in Internationales Symposium für Verbrennungsdiagnostik: Indizierung - Visualisierung - Simulation. 2004. Baden-Baden.
21. Heywood, J.B. "Combustion and its modeling in spark-ignition engines." in International symposium COMODIA. 1994.
22. Peters, N., *Technische Verbrennung*. 2006, Skriptum des Institut für Technische Mechanik, RWTH Aachen.
23. Poinso, T. and Veynante, D., "Theoretical and numerical combustion." Third Edition ed. 2012.
24. Pope, S.B., "Turbulent flows. 2000: Cambridge university press.
25. Goryntsev, D., Sadiki, A. and Janicka, J., "Unsteady Effects on Mixing and Combustion Processes in a Realistic IC-Engine by using Large Eddy Simulation." Proc. of TSFP-7, Ottawa, Canada, 2011.
26. Hasse, C., Sohm, V. and Durst, B., "Numerical investigation of cyclic variations in gasoline engines using a hybrid URANS/LES modeling approach." *Computers & Fluids*, 2010. **39**(1): p. 25-48.
27. Fontanesi, S., Paltrinieri, S. and Cantore, G., *LES Analysis of Cyclic Variability in a GDI Engine*. 2014, SAE Technical Paper.
28. Fontanesi, S., Paltrinieri, S., d'Adamo, A. and Tiberi, A. "Les multi-cycle analysis of a high performance gdi engine." in SAE 2013 World Congress & Exhibition. 2013. SAE International.
29. Koch, J., Schmitt, M., Wright, Y.M., Steurs, K. and Boulouchos, K., "LES Multi-Cycle Analysis of the Combustion Process in a Small SI Engine." *SAE International Journal of Engines*, 2014. **7**(2014-01-1138): p. 269-285.
30. Laget, O., Reveille, B., Martinez, L., Truffin, K., Habchi, C. and Angelberger, C., *LES Calculations of a four cylinder engine*. 2011, SAE Technical Paper.

31. Robert, A., Richard, S., Colin, O., Martinez, L. and De Francqueville, L., "LES prediction and analysis of knocking combustion in a spark ignition engine." Proceedings of the Combustion Institute, 2015. **35**(3): p. 2941-2948.
32. Tatschl, R., Bogensperger, M., Pavlovic, Z., Priesching, P., Schuemie, H., Vitek, O. and Macek, J., *LES Simulation of Flame Propagation in a Direct-Injection SI-Engine to Identify the Causes of Cycle-to-Cycle Combustion Variations*. 2013, SAE Technical Paper.
33. Vermorel, O., Richard, S., Colin, O., Angelberger, C., Benkenida, A. and Veynante, D., "Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES." Combustion and Flame, 2009. **156**(8): p. 1525-1541.
34. Kim, J., Kim, G., Lee, H. and Min, K., *Numerical Analysis of Pollutant Formation in Direct-Injection Spark-Ignition Engines by Incorporating the G-Equation with a Flamelet Library*. 2014, SAE Technical Paper.
35. Grover Jr, R.O. and Cleary, D., *Correlating Measured Combustion Performance with CFD Predicted In-Cylinder Flows for a Spark-Ignition Direct-Injection (SIDI) Engine with Enhanced Charge Motion*. 2013, SAE Technical Paper.
36. Boulouchos, K., Zbiorczyk, A., Inhelder, J. and Frouzakis, C., "Optimale Auslegung umweltfreundlicher Gasmotoren." MTZ, 1997. **58**: p. 486-509.
37. Buhl, S., Hartmann, F., Salenbauch, S. and Hasse, C. "Large Eddy Simulation of engine combustion: How can highly resolved CFD simulations support the engine development process?" in Engine Combustion Processes: Current Problems and Modern Techniques (XIIth Congress). 2015. Ludwigsburg.
38. Douaud, A. and Eyzat, P., *Four-octane-number method for predicting the anti-knock behavior of fuels and engines*. 1978, SAE Technical Paper.
39. Livengood, J. and Wu, P. "Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines." in Symposium (International) on Combustion. 1955. Elsevier.
40. Colin, O., da Cruz, A.P. and Jay, S., "Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations." Proceedings of the Combustion Institute, 2005. **30**(2): p. 2649-2656.
41. Linse, D., Kleemann, A. and Hasse, C., "Probability density function approach coupled with detailed chemical kinetics for the prediction of knock in turbocharged direct injection spark ignition engines." Combustion and Flame, 2014. **161**(4): p. 997-1014.
42. Auer, M. and Wachtmeister, G., "Phenomenological models for pre-calculation of the combustion in gas engines." MTZ worldwide, 2009. **70**(6): p. 52-59.
43. Dimitroc, D., *Abschlussbericht: Verbrennungsmodell Gasmotor, Verbrennungsmodell für den Vorkammermotor*. 2007, Graz.
44. Schlick, H., Pirker, G., Chmela, F. and Wimmer, A. "Improving the predictive capability of a zero dimensional combustion model for open chamber gas engines

- based on tomographic combustion analysis." in *Engine Combustion Processes: Current Problems and Modern Techniques (9th Congress)*. 2009. Munich
45. Pizzirani, N., Lauer, T., Geringer, B. and Murakami, S., "A Numerical Method for Efficiency Optimization on Gas Engines." *MTZ industrial*, 2012. 1(2): p. 60-67.
 46. Matthews, R.D., Hall, M.J., Dai, W. and Davis, G.C., *Combustion modeling in SI engines with a peninsula-fractal combustion model*. 1996, SAE Technical Paper.
 47. Merker, G., Schwarz, C., Stiesch, G. and Otto, F., "Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung. Vol. 3. Auflage. 2006: Springer.
 48. Pizzirani, N., *Employment of Numerical Methods for Efficiency Optimization of a Large Gas Engine with Regard to NO_x-Formation and Knocking Combustion*. 2013, PHD-Thesis, Institute for Powertrains and Automotive Technology, Vienna University of Technology.
 49. Kozarac, D., Schuemie, H. and Ofner, H. "Modeling of Natural Gas Engine With The Emphasis on Prediction of Knock." in *European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2012)*. 2012. Hrvatska znanstvena bibliografija i MZOS-Svibor.
 50. Wimmer, A., Chmela, F., Kirsten, M., Pirker, G., Christiner, P., Trapp, C. and H, S. "LEC-GPN—a new Index for assessing the knock behavior of gaseous fuels for large engines." in Conference "Knocking in Gasoline Engines. 2013. Berlin
 51. Holly, W., *Reaktionskinetische Analyse der klopfenden Verbrennung an einem aufgeladenen Ottomotor mit Direkteinspritzung*. 2013, Diplomarbeit am Institut für Fahrzeugantriebe & Automobiltechnik, Technische Universität Wien.
 52. Gogan, A., Sundén, B., Lehtiniemi, H. and Mauss, F. "Stochastic model for the investigation of the influence of turbulent mixing on engine knock." in *SAE Technical Paper 2004-01-2999*, 2004, doi: 10.4271/2004-01-2999.
 53. Holly, W., Heiss, M., Bobicic, N., Lauer, T. and Pritze, S. "Investigation on knocking combustion with reaction kinetics for a turbocharged SIDI engine." in Conference "Knocking in Gasoline Engines. 2013. Berlin
 54. Heywood, J.B., "Internal combustion engine fundamentals. Vol. 930. 1988: Mcgraw-hill New York.
 55. Ozdor, N., Dulger, M. and Sher, E., *Cyclic variability in spark ignition engines a literature survey*. 1994, SAE Technical Paper.
 56. Vitek, O., Macek, J., Poetsch, C. and Tatschl, R., *Modeling cycle-to-cycle variations in 0-d/1-d simulation by means of combustion model parameter perturbations based on statistics of cycle-resolved data*. 2013, SAE Technical Paper.
 57. Bozza, F., De Bellis, V. and Siano, D., *A Knock Model for 1D Simulations Accounting for Cyclic Dispersion Phenomena*. 2014, SAE Technical Paper.
 58. Millo, F., Rolando, L., Pautasso, E. and Servetto, E., *A Methodology to Mimic Cycle to Cycle Variations and to Predict Knock Occurrence through Numerical Simulation*. 2014, SAE Technical Paper.

59. Wenig, M., *Simulation der ottomotorischen Zyklenschwankungen*. 2013, Dissertation am Institut für Verbrennungsmotoren und Kraftfahrwesen, Universität Stuttgart.
60. Lauer, T. and Geringer, B., "Verbrennung: Bewertung der Restgastoleranz bei homogenen Brennverfahren für hohe Abgasdruckfuhraten." *MTZ. Motortechnische Zeitschrift*, 2008. **69**(2): p. 154.
61. Driscoll, J.F., "Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities." *Progress in Energy and Combustion Science*, 2008. **34**(1): p. 91-134.
62. Warnatz, J., Maas, U. and Dibble, R., "Combustion: physical and chemical fundamentals, modeling and simulation, experiments, pollutant formation. 2006. 2006: Springer, Berlin.
63. AVL, *AST, FIRE Manual v2013.2, AVL List GmbH*. 2013.
64. Kobayashi, H., "The subgrid-scale models based on coherent structures for rotating homogeneous turbulence and turbulent channel flow." *Physics of Fluids (1994-present)*, 2005. **17**(4): p. 045104.
65. Kobayashi, H., Ham, F. and Wu, X., "Application of a local SGS model based on coherent structures to complex geometries." *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2008. **29**(3): p. 640-653.
66. Hanjalić, K., Popovac, M. and Hadžiabdić, M., "A robust near-wall elliptic-relaxation eddy-viscosity turbulence model for CFD." *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 2004. **25**(6): p. 1047-1051.
67. Damköhler, G., "Der Einfluß der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasgemischen." *Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie*, 1940. **46**(11): p. 601-626.
68. Willinger, R., *Numerische Methoden für thermische Energiesysteme*. 2011, Skriptum zur Vorlesung 302.046, Technische Universität Wien.
69. Colin, O. and Benkenida, A., "The 3-zones extended coherent flame model (ECFM3Z) for computing premixed/diffusion combustion." *Oil & Gas Science and Technology*, 2004. **59**(6): p. 593-609.
70. Meneveau, C. and Poinso, T., "Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion." *Combustion and Flame*, 1991. **86**(4): p. 311-332.
71. AVL, *Combustion Module, AVL FIRE*. 2013.
72. Soika, A., Dinkelacker, F. and Leipertz, A., "Pressure influence on the flame front curvature of turbulent premixed flames: comparison between experiment and theory." *Combustion and flame*, 2003. **132**(3): p. 451-462.
73. Colin, O. and Truffin, K., "A spark ignition model for large eddy simulation based on an FSD transport equation (ISSIM-LES)." *Proceedings of the Combustion Institute*, 2011. **33**(2): p. 3097-3104.

74. *First General Administrative Regulation Pertaining the Federal Immission Control Act (Technical Instructions on Air Quality Control – TA Luft)*. 2002, Federal Ministry for Environment, Nature Conservation and Nuclear Safety p. 252.
75. Goswami, M., Derks, S.C., Coumans, K., Slikker, W.J., de Andrade Oliveira, M.H., Bastiaans, R.J., Luijten, C.C., de Goey, L.P.H. and Konnov, A.A., "The effect of elevated pressures on the laminar burning velocity of methane+ air mixtures." *Combustion and Flame*, 2013. **160**(9): p. 1627-1635.
76. Göttgens, J., Mauss, F. and Peters, N. "Analytic approximations of burning velocities and flame thicknesses of lean hydrogen, methane, ethylene, ethane, acetylene, and propane flames." in *Symposium (International) on Combustion*. 1992. Elsevier.
77. Lipatnikov, A. and Chomiak, J., "Turbulent flame speed and thickness: phenomenology, evaluation, and application in multi-dimensional simulations." *Progress in energy and combustion science*, 2002. **28**(1): p. 1-74.
78. Liu, K., Burluka, A. and Sheppard, C., "Turbulent flame and mass burning rate in a spark ignition engine." *Fuel*, 2013. **107**: p. 202-208.
79. AVL, *AST, BOOST Theory v2013.2, AVL List GmbH*. 2013.
80. Magnussen, B.F. and Hjertager, B.H. "On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion." in *Symposium (International) on Combustion*. 1977. Elsevier.
81. Gülder, Ö.L. "Turbulent premixed flame propagation models for different combustion regimes." in *Symposium (International) on Combustion*. 1990. Elsevier.
82. Gülder, Ö.L., *Correlations of laminar combustion data for alternative SI engine fuels*. 1984, SAE Technical Paper.
83. Ranzi, E., Frassoldati, A., Grana, R., Cuoci, A., Faravelli, T., Kelley, A. and Law, C., "Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels." *Progress in Energy and Combustion Science*, 2012. **38**(4): p. 468-501.
84. Metcalfe, W.K., Burke, S.M., Ahmed, S.S. and Curran, H.J., "A hierarchical and comparative kinetic modeling study of C1– C2 hydrocarbon and oxygenated fuels." *International Journal of Chemical Kinetics*, 2013. **45**(10): p. 638-675.
85. Metghalchi, M. and Keck, J.C., "Burning velocities of mixtures of air with methanol, isoctane, and indolene at high pressure and temperature." *Combustion and flame*, 1982. **48**: p. 191-210.
86. Wurms, R., Budack, R., Grigo, M., Mendl, G., Heiduk, T. and Knirsch, S. "Der neue Audi 2.0l Motor mit innovativem Rightsizing - ein weiterer Meilenstein der TFSI-Technologie." in *Wiener Motorensymposium*. 2015.
87. Peters, N., "The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence." *Journal of Fluid mechanics*, 1999. **384**: p. 107-132.
88. Schießl, R. and Maas, U., "Analysis of endgas temperature fluctuations in an SI engine by laser-induced fluorescence." *Combustion and flame*, 2003. **133**(1): p. 19-27.

89. Bäuerle, B., *Untersuchung der zeitlichen Entwicklung von Klopfzentren im Endgas eines Zweitakt-Ottomotors mittels zweidimensionaler laserinduzierter Fluoreszenz von Formaldehyd*. 2001, Dissertation am Institut für Technische Verbrennung, Universität Stuttgart.
90. Tunér, M., "Stochastic reactor models for engine simulations. 2008: Division of Combustion Physics.
91. cmcl, *innovations: kinetics & srm engine suite – An application for simulating chemical reactors and developing kinetic mechanisms.*, in *User manual v8.2.0*. 2014.
92. Bardolf, R., *Reaktionsmechanismen zur Simulation der motorischen Verbrennung von Biogasen*. 2013, Diplomarbeit, Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und technische Biowissenschaften, Technischen Universität Wien.
93. Donato, N., Aul, C., Petersen, E., Zinner, C., Curran, H. and Bourque, G., "Ignition and oxidation of 50/50 butane isomer blends." *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 2010. **132**(5): p. 051502.
94. Healy, D., Donato, N., Aul, C., Petersen, E., Zinner, C., Bourque, G. and Curran, H., "n-Butane: Ignition delay measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulations." *Combustion and Flame*, 2010. **157**(8): p. 1526-1539.
95. Healy, D., Donato, N., Aul, C., Petersen, E., Zinner, C., Bourque, G. and Curran, H., "Isobutane ignition delay time measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulations." *Combustion and Flame*, 2010. **157**(8): p. 1540-1551.
96. Healy, D., Kalitan, D., Aul, C., Petersen, E., Bourque, G. and Curran, H., "Oxidation of C1– C5 alkane quaternary natural gas mixtures at high pressures." *Energy & Fuels*, 2010. **24**(3): p. 1521-1528.
97. Healy, D., Kopp, M., Polley, N., Petersen, E., Bourque, G. and Curran, H., "Methane/n-butane ignition delay measurements at high pressure and detailed chemical kinetic simulations." *Energy & Fuels*, 2010. **24**(3): p. 1617-1627.
98. Pilling, M.J., "Low-temperature combustion and autoignition. Vol. 35. 1997: Elsevier.
99. *Endbericht zu FFG-Projekt: 835806 "BioFlame-Numerische Optimierung der Biogas-Verbrennung in Schiffsmotoren"*. 2015, Österreichische Forschungsförderungsgesellschaft mbH. p. 23.
100. Betz, G. and Zellbeck, H., "Das Mahle Ki-Meter zur quantitativen Bestimmung der Klopfintensität." *Motorische Zeitschrift MTZ*, 1983. **44**: p. 7878-349.
101. "Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications", San Diego Mechanism web page, Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego (<http://combustion.ucsd.edu>)."
102. Riegler, U.G., *Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung in Ottomotoren unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen*. 1997, Dissertation am Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart.

103. Bacher, C., *Metaheuristic optimization of electro-hybrid powertrains using machine learning techniques*. 2013, Master's thesis, Institut of Algorithms and Complexity, Vienna University of Technology.
104. Krenek, T., Bacher, C., Raidl, G. and Lauer, T., "Numerical Optimisation of Electro Hybrid Powertrains." *MTZ worldwide*, 2015. **76**(3): p. 46-52.
105. Krenek, T., *Optimierung von elektro-hybriden Antriebskonzepten mittels heuristischer Optimierungsverfahren*. 2015, Dissertation am Institut für Fahrzeugantriebe & Automobiltechnik, Technische Universität Wien.
106. *International Maritime Organization: Annex VI of MARPOL 73/78 and NOx Technical Code*. 2008: London. .
107. *VDI Wärmeatlas - Verein Deutscher Ingenieure, VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen, 10*. 2005, Aufl.

11. Anhang

11.1. Polynomkoeffizienten für die laminare Flamme

Polynomkoeffizienten für die laminare Flamme gemäß Gl. (12) bis (14):

Kraftstoffmischungen für die Modellvalidierung (siehe Tabelle 8):

| Kraftstoff | C _{S1} | C _{S2} | C _{S3} | C _{S4} | C _{L1} | C _{L2} | C _{L3} | C _{L4} | T _{ad1} | T _{ad2} |
|------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|
| MZ65 | 4.428E-10 | 3.64 | 4.23 | -0.446 | 3.13E+7 | -3.158 | -2.962 | -0.539 | 207.9 | 1757 |
| MZ80 | 2.187E-10 | 3.74 | 4.32 | -0.436 | 9.08E+7 | -3.339 | -3.117 | -0.543 | 208.38 | 1746 |
| MZ123 | 1.667E-10 | 2.59 | 4.19 | -0.443 | 6.53E+7 | -2.205 | -2.895 | -0.533 | 378.61 | 1188 |

Kraftstoffmischungen für die Betriebspunktoptimierung (siehe Tabelle 11):

| KM | C _{S1} | C _{S2} | C _{S3} | C _{S4} | C _{L1} | C _{L2} | C _{L3} | C _{L4} | T _{ad1} | T _{ad2} |
|----|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|
| 1 | 1.776E-10 | 3.81 | 4.33 | -0.421 | 8.93E+7 | -3.44 | -3.093 | -0.562 | 199.37 | 1754.1 |
| 2 | 3.506E-10 | 3.76 | 4.26 | -0.441 | 4.93E+7 | -3.373 | -3.03 | -0.538 | 200.75 | 1760.8 |
| 3 | 5.890E-10 | 3.69 | 4.19 | -0.449 | 3.39E+7 | -3.29 | -2.986 | -0.526 | 200.41 | 1768.2 |
| 4 | 8.525E-10 | 3.57 | 4.15 | -0.449 | 1.22E+7 | -3.111 | -2.832 | -0.533 | 199.65 | 1780.8 |
| 5 | 2.366E-9 | 3.37 | 4.00 | -0.448 | 2.78E+6 | -2.924 | -2.62 | -0.528 | 198.0 | 1800.0 |
| 6 | 4.272E-10 | 3.38 | 4.18 | -0.439 | 3.47E+7 | -2.953 | -2.93 | -0.541 | 250.02 | 1616.9 |
| 7 | 2.607E-10 | 2.95 | 4.14 | -0.411 | 4.57E+7 | -2.634 | -2.877 | -0.568 | 298.57 | 1384.8 |
| 8 | 4.308E-10 | 3.47 | 4.21 | -0.448 | 3.14E+7 | -2.992 | -2.932 | -0.535 | 242.15 | 1656.8 |
| 9 | 2.611E-10 | 3.20 | 4.22 | -0.444 | 5.62E+7 | -2.80 | -2.972 | -0.539 | 287.8 | 1488.4 |

11.2. Validierung des Zyklusschwankungsmodell anhand von vier Betriebspunkten

Wiedergabe der zyklischen Schwankungen durch das Zyklusschwankungsmodell, Details siehe Kapitel 6.3.

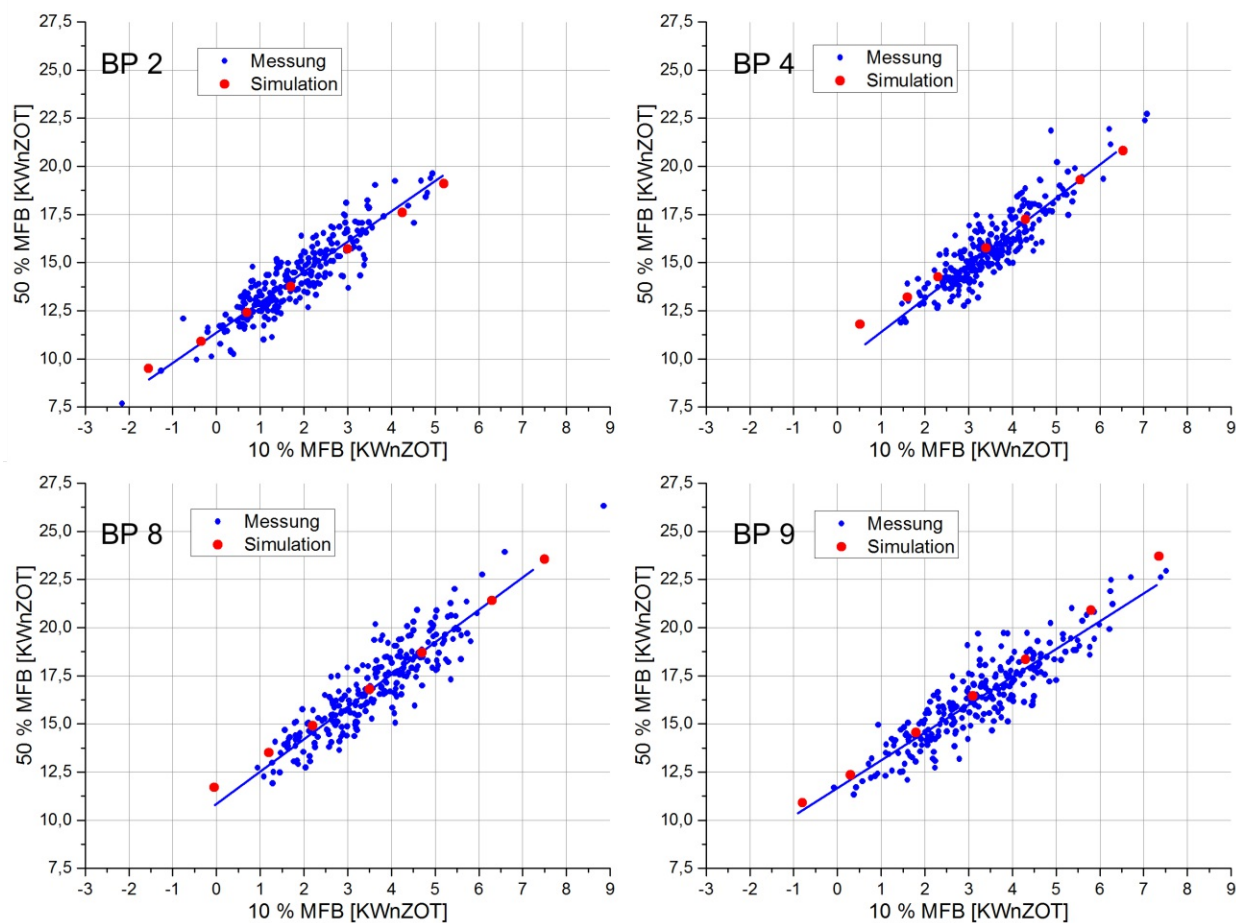


Abbildung 91: Validierung des Zyklusschwankungsmodells für vier Betriebspunkte

11.3. Reaktionsmechanismus für die Stickoxidbildung

Adaptierter Reaktionsmechanismus für die Stickoxidbildung in Großgasmotoren basierend auf [101], Details bezüglich Reduktion siehe Kapitel 7.3.2.

ELEMENTS

C H N O AR

END

SPECIES

| | | | | |
|-----|------|------|------|-----|
| NO | C3H8 | HCCO | C2H6 | CO |
| NO2 | N | NH | N2O | CH |
| H | H2 | O | O2 | OH |
| H2O | N2 | HO2 | H2O2 | CO2 |
| CH4 | AR | | | |
| END | | | | |

REACTIONS CAL/MOLE

$\text{H}+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{O}+\text{OH}$ 3.547E+15 -0.406 1.660E+04
 REV/ 1.027E+13 -0.015 -1.330E+02 /
 $\text{O}+\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{OH}$ 5.080E+04 2.670 6.292E+03
 REV/ 2.637E+04 2.651 4.880E+03 /
 $\text{OH}+\text{H}_2\rightleftharpoons\text{H}+\text{H}_2\text{O}$ 2.160E+08 1.510 3.430E+03
 REV/ 2.290E+09 1.404 1.832E+04 /
 $\text{O}+\text{H}_2\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{OH}$ 2.970E+06 2.020 1.340E+04
 REV/ 1.454E+05 2.107 -2.904E+03 /
 $\text{H}_2+\text{M}\rightleftharpoons\text{H}+\text{H}+\text{M}$ 4.577E+19 -1.400 1.044E+05
 REV/ 1.145E+20 -1.676 8.200E+02 /
 H2/2.5/ H2O/12/ CO/1.9/ CO2/3.8/
 $\text{O}_2+\text{M}\rightleftharpoons\text{O}+\text{O}+\text{M}$ 4.420E+17 -0.634 1.189E+05
 REV/ 6.165E+15 -0.500 0.000E+00 /
 H2/2.5/ H2O/12/ AR/.83/ CO/1.9/ CO2/3.8/ CH4/2/ C2H6/3/
 $\text{OH}+\text{M}\rightleftharpoons\text{O}+\text{H}+\text{M}$ 9.780E+17 -0.743 1.021E+05
 REV/ 4.714E+18 -1.000 0.000E+00 /
 H2/2.5/ H2O/12/ AR/.75/ CO/1.5/ CO2/2/ CH4/2/ C2H6/3/
 $\text{H}_2\text{O}+\text{M}\rightleftharpoons\text{H}+\text{OH}+\text{M}$ 1.907E+23 -1.830 1.185E+05
 REV/ 4.500E+22 -2.000 0.000E+00 /
 H2/.73/ H2O/12/ AR/.38/ CH4/2/ C2H6/3/
 $\text{H}+\text{O}_2(+\text{M})\rightleftharpoons\text{HO}_2(+\text{M})$ 1.475E+12 0.600 0.000E+00
 LOW / 3.4820E+16 -4.1100E-01 -1.1150E+03 /
 TROE / 5.0000E-01 1.0000E-30 1.0000E+30 1.0000E+10 / !Troee Fall-off reaction
 H2/1.3/ H2O/14/ AR/.67/ CO/1.9/ CO2/3.8/ CH4/2/ C2H6/3/
 $\text{HO}_2+\text{H}\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{O}_2$ 1.660E+13 0.000 8.230E+02
 REV/ 3.166E+12 0.348 5.551E+04 /
 $\text{HO}_2+\text{H}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{OH}$ 7.079E+13 0.000 2.950E+02
 REV/ 2.028E+10 0.720 3.684E+04 /
 $\text{HO}_2+\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{O}_2$ 3.250E+13 0.000 0.000E+00
 REV/ 3.217E+12 0.329 5.328E+04 /
 $\text{HO}_2+\text{OH}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{O}_2$ 2.890E+13 0.000 -4.970E+02
 REV/ 5.844E+13 0.242 6.908E+04 /
 $\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{HO}_2$ 1.136E+16 -0.347 4.973E+04
 REV/ 1.030E+14 0.000 1.104E+04 /
 DUP
 $\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}_2\rightleftharpoons\text{HO}_2+\text{HO}_2$ 2.141E+13 -0.347 3.728E+04
 REV/ 1.940E+11 0.000 -1.409E+03 /
 DUP
 $\text{H}_2\text{O}_2(+\text{M})\rightleftharpoons\text{OH}+\text{OH}(+\text{M})$ 2.951E+14 0.000 4.843E+04
 LOW / 1.2020E+17 0.0000E+00 4.5500E+04 /
 TROE / 5.0000E-01 1.0000E-30 1.0000E+30 1.0000E+10 / !Troee Fall-off reaction
 H2/2.5/ H2O/12/ AR/.64/ CO/1.9/ CO2/3.8/ CH4/2/ C2H6/3/
 $\text{H}_2\text{O}_2+\text{H}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{OH}$ 2.410E+13 0.000 3.970E+03
 REV/ 1.265E+08 1.310 7.141E+04 /
 $\text{H}_2\text{O}_2+\text{H}\rightleftharpoons\text{H}_2+\text{HO}_2$ 2.150E+10 1.000 6.000E+03
 REV/ 3.716E+07 1.695 2.200E+04 /
 $\text{H}_2\text{O}_2+\text{O}\rightleftharpoons\text{OH}+\text{HO}_2$ 9.550E+06 2.000 3.970E+03
 REV/ 8.568E+03 2.676 1.856E+04 /
 $\text{H}_2\text{O}_2+\text{OH}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{HO}_2$ 2.000E+12 0.000 4.272E+02
 REV/ 3.665E+10 0.589 3.132E+04 /
 DUP
 $\text{H}_2\text{O}_2+\text{OH}\rightleftharpoons\text{H}_2\text{O}+\text{HO}_2$ 1.700E+18 0.000 2.941E+04
 REV/ 3.115E+16 0.589 6.030E+04 /
 DUP

```

CO+O(+M)<=>CO2(+M) 1.800E+10 0.000 2.384E+03
LOW / 1.3500E+24 -2.7880E+00 4.1910E+03 / !Lindemann Fall-off reaction
H2/2/ O2/6/ H2O/6/ AR/.5/ CO/1.5/ CO2/3.5/ CH4/2/ C2H6/3/
CO+O2<=>CO2+O 1.050E+12 0.000 4.254E+04
REV/ 8.035E+15 -0.800 5.123E+04 /
CO+OH<=>CO2+H 1.784E+05 1.890 -1.158E+03
REV/ 4.717E+11 0.699 2.426E+04 /
CO+HO2<=>CO2+OH 1.570E+05 2.180 1.794E+04
REV/ 1.189E+08 1.710 7.991E+04 /
O+N2<=>NO+N          1.470e+13  0.300 75286.81
N+O2<=>NO+O          6.400e+09  1.000  6285.85
N+OH<=>NO+H          3.800e+13  0.000   0.00
NH+H<=>N+H2          1.000e+13  0.000   0.00
NH+O<=>NO+H          9.200e+13  0.000   0.00
NH+OH<=>N+H2O        5.000e+11  0.500  2000.48
NH+NO<=>N2O+H        3.200e+14 -0.450   0.00
NH+NO<=>N2+OH        2.200e+13 -0.230   0.00
N2O(+M)<=>N2+O(+M)    8.000e+11  0.000 62619.50
  LOW / 2.000e+14  0.000 56644.36 /
N2O+H<=>N2+OH        2.230e+14  0.000 16754.30
N2O+O<=>2 NO          2.900e+13  0.000 23159.66
N2O+OH<=>N2+HO2      2.000e+12  0.000 10000.00
NO2+M<=>NO+O+M       1.000e+16  0.000 65965.58
NO+HO2<=>NO2+OH      2.100e+12  0.000 -480.40
NO2+H<=>NO+OH        3.500e+14  0.000 1500.96
NO2+O<=>NO+O2        1.000e+13  0.000  599.90
END

```

Lebenslauf

Werner Emanuel Elias Holly, geboren am 20.04.1987 in Wien

Ausbildung:

2001-2006 Technologisches Gewerbemuseum in Wien
2007-2013 Bachelor- und Masterstudium für Maschinenbau an der TU Wien
seit 2013 Doktoratsstudium der technischen Wissenschaften an der TU Wien

Berufliche Tätigkeiten:

2007-2009 Sondermaschinenbaukonstrukteur bei Svoboda Umformtechnik GmbH
2009-2010 Mitglied des TUW-Racing Teams
2010-2011 Stud. Hilfskraft am Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik
2011-2012 Praktikum bei Porsche Engineering Service GmbH
2012-2015 Assistent am Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik
seit 2015 Performance Simulation Engineer bei Mercedes AMG High Performance Powertrains Ltd.

Themenspezifische Publikationen:

- Holly, W., Lauer, T., Schuemie, H., and Murakami, S., "Modelling the Knocking Combustion of a Large Gas Engine Considering Cyclic Variations and Detailed Reaction Kinetics," SAE Technical Paper, 2014-01-2690, 2014.
- Holly, W., Lauer, T., Schuemie, H., and Murakami, S., "Prediction of the Knocking Combustion and NO_x-Formation for Fuel Gases with Different Methane Numbers" International Journal of Engine Research 17.1 (2016): 35-43.
- Holly, W., Lauer T., Priesching P., Schneider J., and Tatschl R., "Investigation of the flame propagation in a large gas engine with LES" AVL Advanced Simulation Technologies International User Conference, Graz, 2015.
- Holly, W., Lauer, T., Pachler, R., Winter, F., Bacher, C., Schuemie H., and Murakami, S., "Numerical Optimisation Approach for a Large Gas Engine Considering Different Fuel Gas Qualities" 15. Conference "The Working Process of the Internal Combustion Engine", 2015, Graz.