

## Numerische Untersuchung der Verbrennung von Wasserstoff und Sauerstoff in einem Nullemissionsmotor

Johannes Haller, Thomas Link

Institut für Regenerative Energietechnik (in.RET), Hochschule Nordhausen

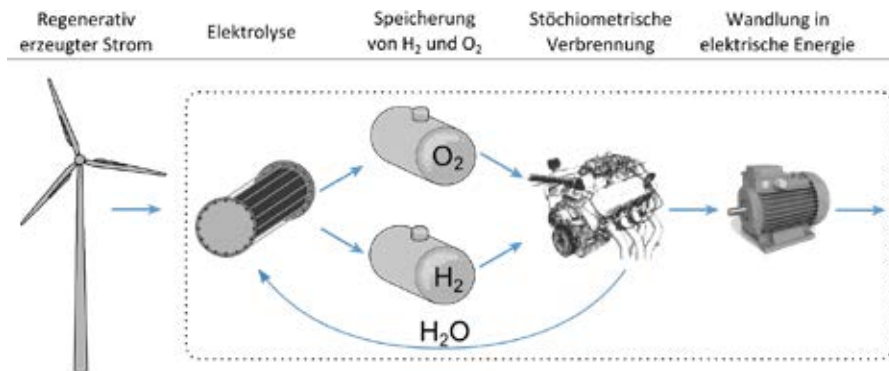
### Abstract

In dieser Arbeit wird ein Motorprozess für Blockheizkraftwerke vorgestellt, der eine effiziente, emissionsfreie Verbrennung von Wasserstoff mit reinem Sauerstoff als Teil einer stationären Stromspeicherlösung ermöglichen soll. Durch Nutzung von Abgasenergie in einem kombinierten Dampf- und Verbrennungsprozess kann theoretisch ein effektiver Wirkungsgrad von über 50% mit vergleichsweise kostengünstiger Technologie erreicht werden.

Der vorgeschlagene Zweitaktprozess wird in drei aufeinander aufbauenden Modellebenen simuliert, um eine experimentelle Prototypenphase vorzubereiten: zunächst als thermodynamisches Vergleichsmodell, anschließend als zeitaufgelöstes quasi-dimensionales Zweizonenmodell und schließlich als detailliertes numerisches Strömungssimulationsmodell.

### 1. Ein kostengünstiges Power-to-Gas-System zur Flexibilisierung des Stromnetzes

Mit Fortschreiten des Ausbaus Erneuerbarer Energien wird die Stromnachfrage in Deutschland in absehbarer Zukunft hauptsächlich aus fluktuierenden Quellen gedeckt werden, allen voran aus Windkraft- und Photovoltaikanlagen (PV) [1]. Um die Fluktuationen bei der Bereitstellung von Strom aus PV- und Windenergie sowohl kurz- als auch mittelfristig ausgleichen zu können, sind zukünftig Speicher- und Flexibilitätsoptionen für große Energiemengen und Zeiträume notwendig. Dies gilt umso mehr, als der notwendige Netzausbau zum räumlichen Ausgleich von Erzeugern und Verbrauchern weit hinter den Ausbauzielen zurückliegt. Die Energiespeicherung gilt daher neben dem Aufbau der Erneuerbaren Energien sowie des Stromnetzes als eine der Schlüsseltechnologien der Energiewende. Im Jahr 2019 lag der Anteil der Stromerzeugung aus erneuerbaren Quellen Stand Dezember 2019 bei 46% und darin der Anteil an Wind- und PV-Energie bei insgesamt fast 34% der Gesamtstromerzeugung [2]. Langzeitspeicher zur saisonalen Verschiebung dieser Energiemengen werden spätestens ab einem Anteil Erneuerbarer Energien von 60-80% am Strommix notwendig sein [3][4][5] bereits heute werden Redispatch- und Flexibilitätsoptionen zur Netzstabilisierung benötigt. Der hohe prognostizierte Speicherbedarf kann in Deutschland zukünftig voraussichtlich nur durch Power-to-Gas-Systeme basierend auf Wasserstoff oder Methan als Speichermedium gedeckt [6]. Für die Herstellung von Wasserstoff durch Elektrolyse sowie dessen Speicherung in Druckgasflaschen oder unterirdischen Kavernen liegen heute technische Lösungen vor, die Rückverstromung des Wasserstoffs stellt derzeit jedoch noch eine technische und wirtschaftliche Herausforderung dar. Zwar besitzen Brennstoffzellen mit bis zu 60% einen vergleichsweise hohen elektrischen Wirkungsgrad, jedoch liegen die spezifischen Investitionen derzeit noch um ein Vielfaches höher als beispielsweise bei Verbrennungsmotoren [7]. Daher stellen Motor-Blockheizkraftwerke (BHKW) mit bisher üblichen Wirkungsgraden um 45% im Leistungsbereich bis 5 MW derzeit und in naher Zukunft eine kostengünstige Technologie zur Rückumwandlung von Wasserstoff dar. Dies zeigt sich auch in der Verwendung von Motor-BHKWs zur Rückverstromung in den weltweit ersten Hybridkraftwerken in Werder/Kessin und Prenzlau [8][9][10]. Die dort jeweils parallel zu einem Windpark installierte Speicherlösung, bestehend aus einem Elektrolyseur, einer Verdichterstufe für Wasserstoff, einer Druckgasspeicherung und einer Rückverstromung über Motor-BHKWs hat das Potential, den eingespeisten Windstrom grundlastfähig zu machen. Dadurch können Schatten- und Reservekraftwerke sowie immer häufiger notwendige Redispatch-Maßnahmen zur Kompensation des schleppenden Netzausbaus eingespart werden bzw. die Abschaltdauern für Windkraftanlagen in Zeiten hoher Strombereitstellung und geringer Nachfrage reduziert werden.

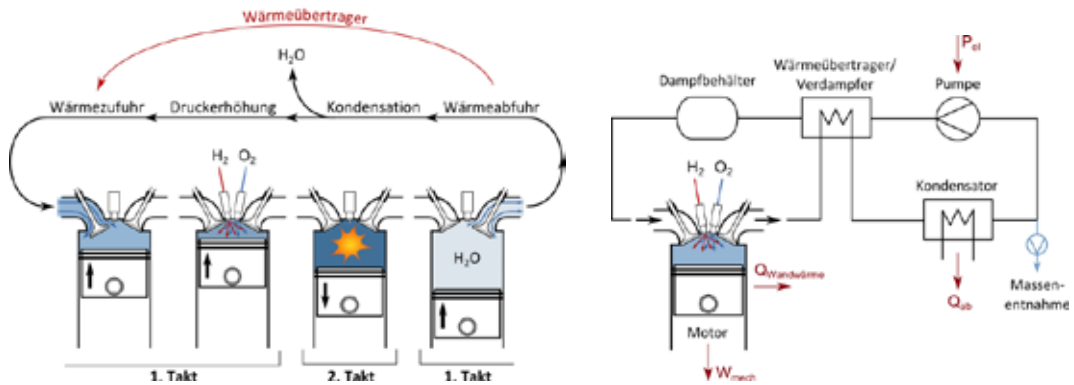


**Abbildung 1: Die motorische Verbrennung von Wasserstoff und Sauerstoff als Teil einer stationären Speicherlösung**

Vor diesem Hintergrund wurde ein Brennverfahren entworfen, welches die Verbrennung von Wasserstoff mit dem bei der Elektrolyse anfallenden Sauerstoff mit einem hohen effektiven Wirkungsgrad von über 50% ermöglichen soll. Das dahinterliegende Speicherkonzept ist in Abbildung 1 schematisch dargestellt. Aufgrund des verwendeten Zweitakt-Prinzips wird die Leistungsdichte des motorischen Brennverfahrens verglichen mit bisher realisierten Brennverfahren für Wasserstoff deutlich höher liegen. Die bei der motorischen Verbrennung von Wasserstoff mit Luft aufgrund hoher Verbrennungstemperaturen üblicherweise auftretenden Probleme mit Stickoxidbildung können bei dem hier dargestellten Nullemissionsmotor nicht auftreten, da als einzige chemische Elemente Wasserdampf, Sauerstoff und Wasserstoff an der Verbrennung beteiligt sind.

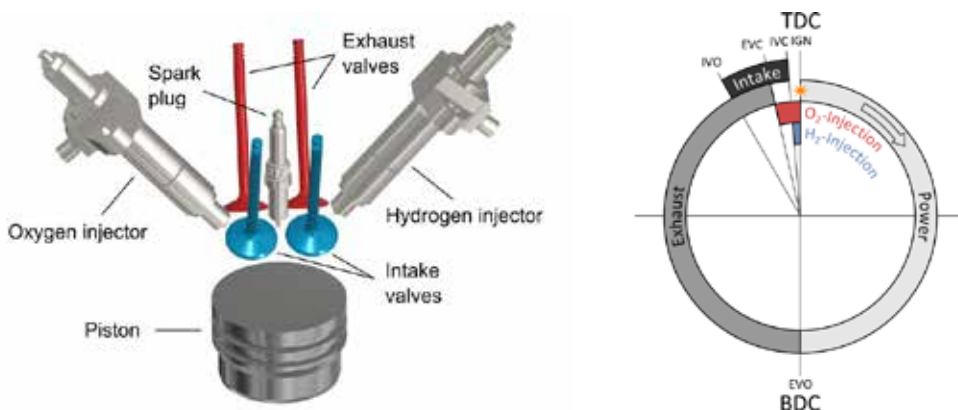
## 2. Konzept eines emissionsfreien Kreisprozesses für BHKW

Der entworfene Kreisprozess kombiniert die interne motorische Verbrennung von Wasserstoff (H<sub>2</sub>) und Sauerstoff (O<sub>2</sub>) mit einem externen Dampfkraftprozess. Durch den Einsatz von reinem Sauerstoff als Oxidationsmittel anstelle von Luft können Schadstoffemission prinzipiell vollständig vermieden werden. Wegen der sehr hohen Temperaturen bei der stöchiometrischen Verbrennung von Wasserstoff mit reinem Sauerstoff besteht die Notwendigkeit, das Brenngasgemisch zu verdünnen. Zu diesem Zweck wird dem Prozess vor Verbrennungsbeginn Wasserdampf beigemischt, welcher die Funktion des sonst in der Luft enthaltenen Stickstoffs als Ballastgas übernimmt und direkt aus dem Abgas gewonnen wird. Abbildung 2 zeigt links das Prinzip des Zyklus: Der Zylinder eines modifizierten Standard-Dieselmotors wird nahe des oberen Totpunktes mit überhitztem Dampf beschickt, er ist nun also zum Teil mit Ballastgas unter hohem Druck gefüllt. Auf diese Weise werden Ansaug- und Verdichtungshub überflüssig und die notwendige Verdichtungsarbeit wird im Vergleich zum Viertaktprozess deutlich auf die Leistungsaufnahme einer Pumpe und die Verdichtung von Wasserstoff und Sauerstoff reduziert. Anschließend werden Wasserstoff und Sauerstoff durch Hochdruck-Gasinjektoren in den Zylinder eingespritzt, so dass eine Ladungsschichtung mit einem zündfähigen Brenngasgemisch im Zentrum des Zylinders nahe der Zündkerze entsteht und Wandwärmeverluste reduziert werden. Das Gemisch wird am oberen Totpunkt des Kolbens durch eine Zündkerze entzündet, was zu einem Druck- und Temperaturanstieg im Zylinder führt; der Kolben wird durch den Verbrennungsdruck nach unten bewegt und überträgt die Kraft auf die Kurbelwelle. Das einzige Reaktionsprodukt ist Wasserdampf, der dann in ein externes System ausgeschoben wird. Der erste Takt dieses Zweitaktprozesses ersetzt somit sowohl Auslass- als auch Ansaugtakt, während der zweite Takt den Arbeitstakt bildet. Der Motorprozess zeigt daher Ähnlichkeiten mit einem klassischen Dampfexpansionsprozess wie er in Dampfmaschinen oder Dampfmotoren stattfindet, welcher mit einer internen Verbrennung kombiniert wird.



**Abbildung 2: Prinzip (links) und Anlagenschema (rechts) des kombinierten Prozesszyklus [11]**

Nachdem das Abgas (bestehend aus reinem Wasserdampf) aus dem Zylinder ausgeschoben ist, wird ihm in einem Wärmetauscher Wärme entzogen, anschließend wird der Dampf in einem Kondensator auskondensiert und schließlich durch eine Pumpe auf einen höheren Druck gebracht. Danach wird die vorher entnommene Wärme im Wärmetauscher wieder zugeführt und das Wasser verdampft und überhitzt. Der Dampf steht unter höherem Druck als das Abgas des Verbrennungstakts und kann nun wieder als Ballastgas für den nächsten Verbrennungstakt dienen. Die Masse, die dem Prozess während der Sauerstoff- und Wasserstoff-Injektion hinzugefügt wird, wird dem Prozess als flüssiges Wasser am Ende der Kondensation entnommen. Neben dem Verbrennungsmotor sind noch weitere Anlagenkomponenten zur Umsetzung des Prozesses notwendig, welche in Abbildung 2 rechts als Anlagenschema zu sehen ist. Eine mögliche Anordnung der motorischen Komponenten, bestehend aus Ventilen, Gasinjektoren und Zündkerze in der Brennkammer eines einzelnen Zylinders ist in Abbildung 3 links zu sehen. Auf der rechten Seite ist im Steuerdiagramm des 2-Takt-Brennverfahrens der Ablauf der Ventilbewegungen, Injektionszeiten und der Zündung in Bezug auf den Kurbelwinkel zwischen unterem Totpunkt (Bottom Dead Center – BDC) und oberem Totpunkt (Top Dead Center – TDC) zu sehen. Da aus thermodynamischen Erwägungen und zur Reduzierung der Wandwärmeverluste der Zündzeitpunkt früh gewählt werden sollte, muss der Dampfeinlass vor dem TDC während der Aufwärtsbewegung des Kolbens stattfinden. Durch die Kompression des Frischdampfes bei der weiteren Aufwärtsbewegung des Kolbens entsteht ein Leistungsverlust, der durch eine kurze Einblasdauer reduziert werden kann. Die Nocken der Ventilsteuerung werden so gestaltet, dass bei maximal zulässiger Ventilbeschleunigung ein möglichst kurzer Einblaszeitraum entsteht. Die Masse an eingeblasenem Wasserdampf wird über die Ventilfläche und den Einblasdruck bestimmt.



**Abbildung 3: Anordnung der motorischen Komponenten in der Brennkammer (links) [11] und Steuerdiagramm des 2-Takt-Brennverfahrens (rechts)**

Als Gemischbildungsstrategie wurde für den Prozess eine interne Gemischbildung mit Direkteinspritzung gewählt, um das Risiko für Rück- und Frühzündungen zu reduzieren, welche bei der Saugrohreinspritzung von Wasserstoff mit hoher Wahrscheinlichkeit auftreten können [12]. Dies ist vor allem für große Stationärmotoren mit großen Ladungsmengen sicherheitsrelevant.

### 3. Modellstufen zur numerischen Prozessuntersuchung

Der beschriebene Prozess wird in drei Stufen mit unterschiedlichem Detailgrad modelliert. Zunächst wurde der Prozess bilanziell als thermodynamisches Vergleichsmodell realisiert, um die Potentiale in Hinblick auf Wirkungsgrad und Leistungsdichte zu untersuchen. Im nächsten Schritt wird der Prozess zeitaufgelöst mit wenigen geometrischen Annahmen modelliert, um die Prozesssteuerung zu optimieren. Im letzten Schritt wird der im Zylinder stattfindende Teil des Prozesses mithilfe einer Strömungssimulationssoftware dreidimensional untersucht und Konstruktionsparameter optimiert. Diese drei Modellstufen decken wie in Abbildung 4 zu sehen die Konzept- und Konstruktionsphase der Motorenentwicklung ab [13] und sollen eine Prototypenphase mit Prüfstandtests vorbereiten.

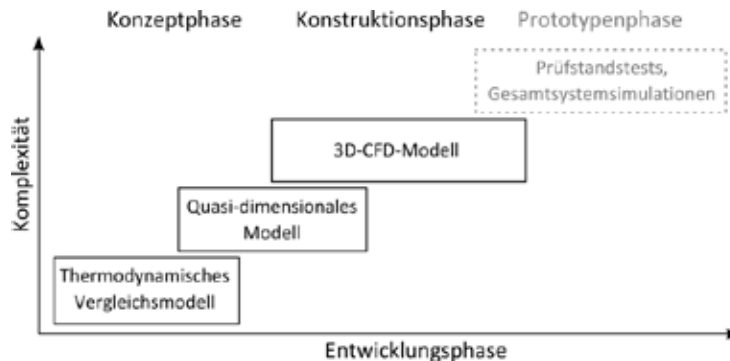


Abbildung 4: Einordnung der Modellstufen an die Phasen der Motorenentwicklung nach Pischinger [13]

#### 3.1 Thermodynamischer Vergleichsprozess

Im ersten Schritt wurde der Prozess bilanziell als thermodynamischer Vergleichsprozess unter Einbeziehung der wichtigsten Verluste modelliert und mithilfe von Messdaten vergleichbarer Motoren validiert. Ziel dieser Modellebene ist eine Abschätzung von Wirkungsgrad und Leistungsdichte des entworfenen Motorprozesses auf Grundlage von Massen- und Energieerhaltung.

Die Zustandsänderungen, die das Arbeitsmedium im zylindrischen Verbrennungsprozess und im externen Dampfprozess erfährt, wurden unter typischen Annahmen thermodynamisch berechnet. Abbildung 5 gibt einen Überblick über das Prinzip der modellierten Zustandsänderungen beider Prozessteile in Druck-Volumen- und Temperatur-Entropie-Diagrammen. Der modellierte thermodynamische Kreisprozess beginnt mit dem Mischprozess von überhitztem Dampf mit Sauerstoff und Wasserstoff im stöchiometrischen Verhältnis (1→2), was zu einem Druckanstieg bei konstantem absoluten Volumen führt. Anschließend wird die Verbrennungswärme im Verhältnis 4:1 durch Gleichraumverbrennung (2→3) und der Gleichdruckverbrennung (3→4) zugeführt. Diese Annahme trägt der hohen Flammgeschwindigkeit von Wasserstoff-Sauerstoff-Wasserdampfgemischen sowie einem nicht-idealen Brennverlauf Rechnung [11]. Nach vollständiger Verbrennung des Brenngasgemisches expandiert das heiße Abgas (4→5) und verursacht Wandwärmeverluste. Die modellierten Zustandsänderungen zwischen 2 und 5 finden im ersten Takt des Motors statt, im zweiten Takt öffnet sich das Auslassventil und der Abgasdampf wird auf den Druck des Kondensators unterhalb des Umgebungsdrucks gedrosselt (5→6). Anschließend wird das Abgas mit dem Aufwärtshub des Kolbens in den externen Kreislauf abgeführt. Die erforderliche Ladezyklusarbeit wird durch das Niedrighalten des Abgasdrucks deutlich reduziert.

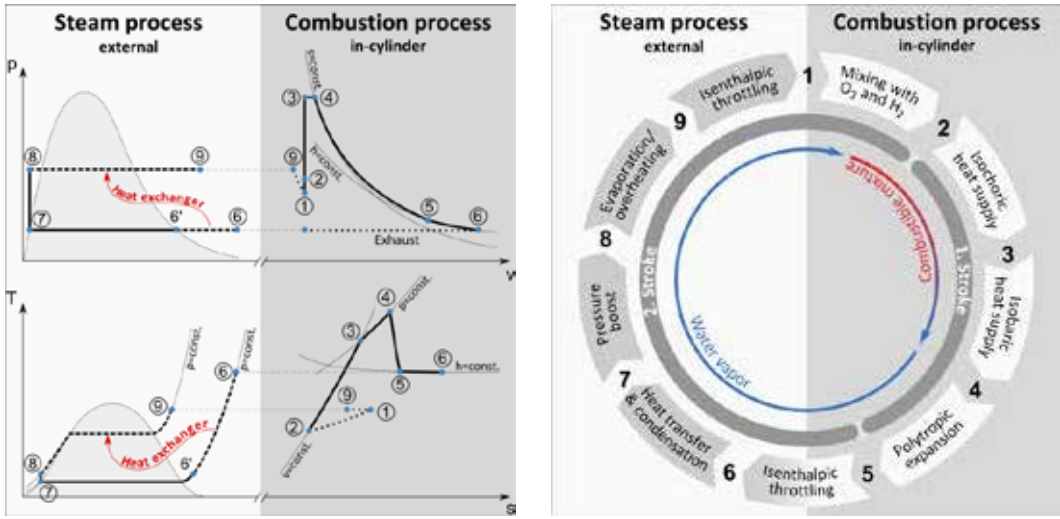


Abbildung 5: Thermodynamischer Vergleichsprozess: links als p-v-(oben) und T-s-Diagramm (unten), rechts als Abfolge der modellierten Zustandsänderungen [11]

Außerhalb des Motors wird bei konstantem Druck die sensible Wärme des Abgasdampfes durch einen Gegenstromwärmetauscher (6→6') abgeführt, und noch bei konstantem Druck wird die latente Wärme durch den Kondensator (6'→7) an die Umgebung abgeführt. Eine Hochtemperaturpumpe erhöht den Druck des nun flüssigen Wassers (7→8) von knapp unterhalb der Siedekurve auf das richtige Druckniveau an, so dass der Druck der anschließenden isobaren Verdampfung und Überhitzung (8→9) hoch genug ist, um nach der Füllung des Zylinders (9→1) den Zustandspunkt 1 zu erreichen. Diese Füllung des Zylinderspaltvolumens wird als isenthalpe Drosselung des Dampfes modelliert. Ein besseres Verständnis des Gesamtprozesses kann durch die Betrachtung der Energieflüsse über die Prozessgrenzen hinweg erreicht werden. In Abbildung 6 ist die Energiebilanz des Modells durch die zu- und abgeführten Energieflüsse und den Energieaustausch zwischen den beiden Teilprozessen des Modells dargestellt. Die Hauptverlustkomponenten in Verbrennungsmotoren sind Energieverluste durch Wandwärmeströme und mechanische Reibung. Die Wandwärmeverluste  $Q_{wall}$  wurden nach Annand modelliert und nach Demuyinck et al. [14] an die Verbrennung von Wasserstoff angepasst. Die mechanischen Reibungsverluste  $W_{fric}$  wurden über eine Berechnung des mittleren effektiven Reibungsdrucks nach Barnes-Moss [15] abhängig von der Drehzahl modelliert.

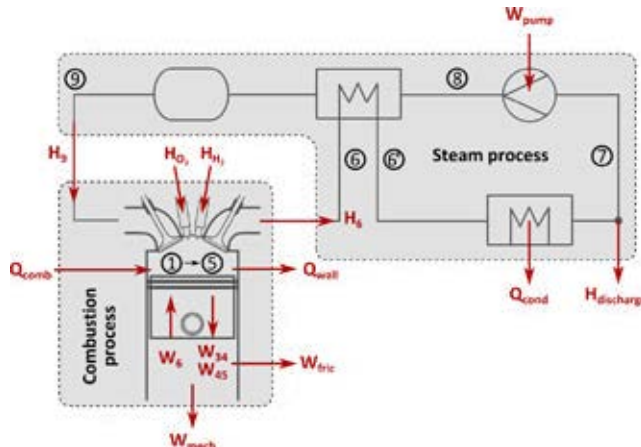


Abbildung 6: Energiebilanz pro Zyklus für beide Teilprozesse [11]

Die Berechnungen der ersten Modellstufe zeigen, dass der Prozess thermodynamisch geschlossen und somit als Kreisprozess wirksam ist. In Abbildung 7 ist links der modellierte thermodynamische Prozess als p-V- bzw. T-V-Diagramm abgebildet. Während moderne Dieselmotoren Drücke bis zu 200 bar [16] zulassen, wurde ein maximal zulässiger Verbrennungsdruck des Modells von 150 bar gewählt. Bei konventionellen Wasserstoff-Verbrennungsmotoren wird die maximale Verbrennungstemperatur vor allem durch die Bildung von thermischem NOx [12] begrenzt. In dem hier vorgeschlagenen Prozess ist die maximale Temperatur nur durch Materialgrenzen des Kolbens und des Zylinderkopfes begrenzt. Die so modellierte Spitzentemperatur ist deutlich höher als bei fossil befeuerten Motoren, herrscht aber nur für sehr kurze Dauer. Keramische Beschichtungen auf Kolben, Zylinderwänden und Ventillflächen könnten eine Möglichkeit sein, die Wärmebelastung der am stärksten beanspruchten Teile zu reduzieren.

Die Ergebnisse geben ein hohes Potential im Hinblick auf Wirkungsgrad und Leistungsdichte des Nullemissionsmotors wieder. Abbildung 7 zeigt rechts den indizierten und den effektiven Wirkungsgrad sowie die mechanische Leistungsdichte des modellierten Brennverfahrens in Abhängigkeit der Temperatur des Frischdampfes. Die verschiedenen Kurven stehen für Frischdampftemperaturen von 400°C bis 900°C in Schritten von 100°C von unten nach oben. Die maximal mögliche Frischdampf Temperatur wird durch die Temperaturbeständigkeit der Rohrleitungen und Wärmetauscher bestimmt. Mit der Annahme werkstofftechnischer und konstruktiver Grenzwerte moderner Dieselmotoren lässt sich so für einen 4-Liter-Motor unter Berücksichtigung von Wandwärme- und Reibungsverlusten ein indizierter Wirkungsgrad von 55,5 % und ein effektiver Wirkungsgrad von 51 % bei einem effektiven Mitteldruck von 20 bar erreichen [11].

Die Ergebnisse der ersten Modellstufe verdeutlichen folgende Vorteile des entworfenen Brennverfahrens gegenüber der in verschiedenen Forschungsprojekten bisher untersuchten Wasserstoffverbrennung mit Luft:

- Stickoxide, Kohlenwasserstoffe und Rußpartikel im Abgas werden vermieden
- Die Leistungsdichte des Zweitaktprozesses ist wesentlich höher als bei Viertaktprozessen
- Der Wirkungsgrad ist durch Einsparung eines Großteils der Ladungswechselarbeit und ein hohes mögliches Expansionsverhältnis deutlich höher

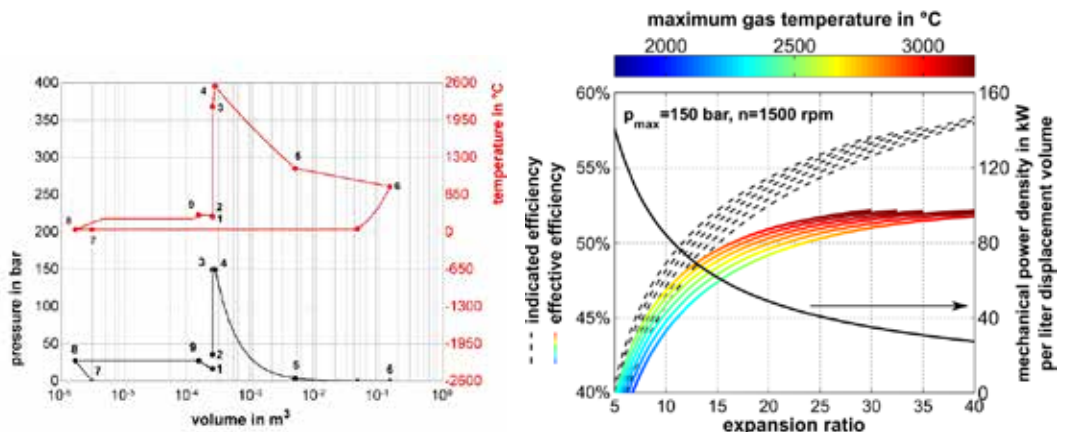


Abbildung 7: p-V und p-T-Diagramm (links) und berechnete indizierte und effektive Wirkungsgrade sowie mechanische Leistungsdichte (rechts) des modellierten Brennverfahrens [11]



### 3.2 Quasi-dimensionales Verbrennungsmodell

In einem derzeit entwickelten zweiten Schritt wird der Prozess zeitaufgelöst als quasi-dimensionales Modell abgebildet. Ziel dieses Modells ist es, den gesamten innerzylindrischen Prozess des 2-Takt-Zyklus mit hohem Detaillierungsgrad hinsichtlich der Wandwärmeverluste und des Verbrennungsfortschritts mit vertretbarem Rechenaufwand zu simulieren. Da die motorische Verbrennung von Wasserstoff-Sauerstoff-Dampf-Gemischen bisher nicht experimentell untersucht wurde, muss ein Bottom-up-Ansatz gewählt werden, um die gekoppelten Vorgänge von Thermodynamik, Gasdynamik, Turbulenz und chemischer Kinetik zu modellieren und den Druckverlauf im Zylinder berechnen zu können. Zu diesem Zweck wurde das auf die Arbeiten von Blizard und Keck [17] zurückgehende weit verbreitete fraktale *tubulent entrainment model* verwendet und angepasst. Mit diesem Ansatz ist eine plausible Modellierung der Verbrennung für jedes beliebige Gemisch auch ohne Messwerte möglich.

Dabei wird das Gas im Brennraum durch die Flammenoberfläche, angenommen als unendlich dünne Kugelfläche, in zwei Zonen für verbranntes und unverbranntes Gasgemisch wie in Abbildung 8 zu sehen eingeteilt (quasi-dimensional). Die Flamme breitet sich von der Zündkerze ausgehend in den Brennraum aus bis sie schließlich die Zylinderwände erreicht und erlischt. Die Zone innerhalb der kugelförmigen Flammenoberfläche enthält verbranntes Gas; die Zone jenseits der Flamme ist mit frischem Ladungsgemisch gefüllt. Beide Zonen werden als homogene Idealgase mit gleichmäßigen Eigenschaften modelliert, wobei davon ausgegangen wird, dass zwischen den beiden Zonen kein Wärmeübergang stattfindet. Während der Druck im gesamten Zylinder gleich ist, ist die Temperatur in jeder Zone eine Funktion der Masse, der Zusammensetzung, des Drucks, des Volumens und des Wärmeübergangs zu den Wänden und ist innerhalb der Zone gleichmäßig.

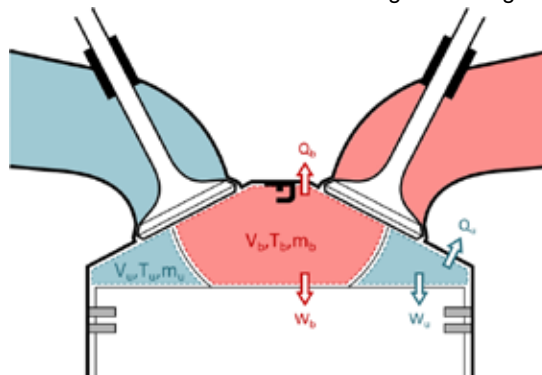
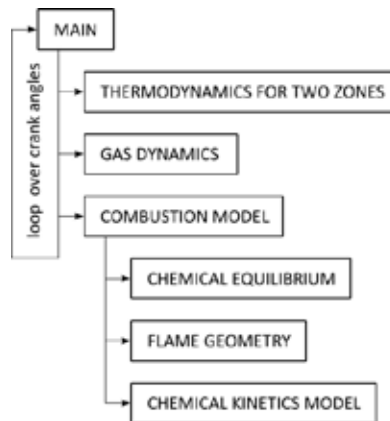


Abbildung 8: Brennräumeinteilung im quasi-dimensionalen Zweizonenmodell

Neben den Erhaltungsgleichungen für Energie und Masse werden in diesem Modell die Gasdynamik mit Reibungs- und Wärmeverlusten bei Ein- und Ausströmen des Dampfes durch die Ventile und bei Injektion von Wasserstoff und Sauerstoff sowie Wandwärmeverluste und die Interaktion zwischen chemischer Kinetik und Turbulenz unter Berücksichtigung der Flammenausbreitung modelliert.

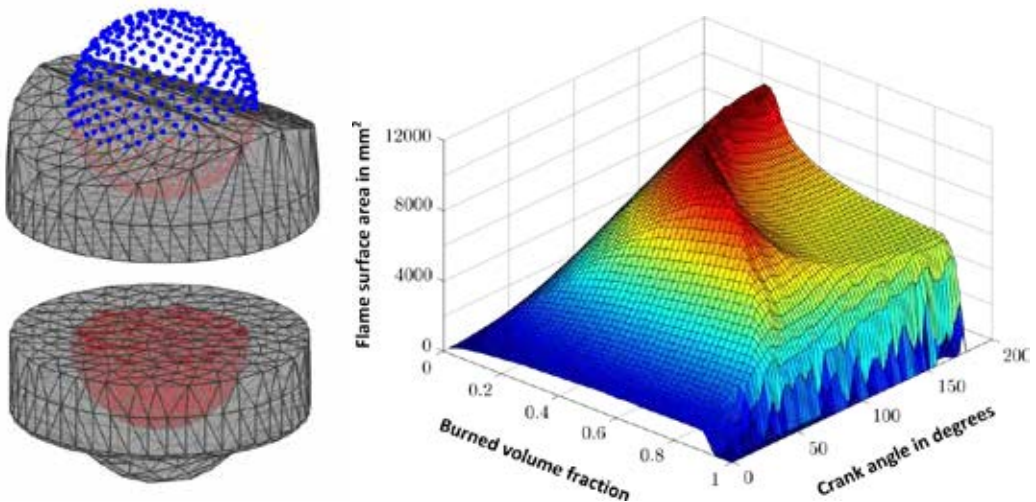
Das Modell wird als Gleichungssystem in einem nichtlinearen Gleichungslöser mit thermodynamischer Datenbank (Engineering Equation Solver) implementiert und die Gleichungen werden iterativ für kleine Kurbelwinkelschritte gelöst. Alle Gleichungen wurden allgemein formuliert, um für den entworfenen Verbrennungsprozess und für einen Validierungsverbrennungsprozess zu gelten, bei dem Wasserstoff mit Luft verbrannt wird und für den Messwerte vorliegen. Das Modell ist in mehrere Untermodelle unterteilt, die in Abbildung 9 dargestellt sind.



**Abbildung 9: Programmaufbau des quasi-dimensionalen Simulationsmodells**

Im Hauptprogramm werden alle Definitionen von Motorabmessungen, Gaseigenschaften und Randbedingungen vorgenommen. Das Teilmodell *thermodynamics* berechnet den thermodynamischen Zustand im Kurbelwinkelschritt, d.h. die Masse, das Volumen, die Temperatur und den Druck aus Energie- und Massenbilanzen für beide Zonen. Das *gas dynamics*-Teilmodell berechnet die durch die Ein- und Auslassventile in den Brennraum ein- und ausströmende Masse. Es basiert auf dem idealen Massenstrom für eine kompressible Strömung durch eine Blende und wird abhängig vom lokalen Strömungsmuster an die reale motorische Strömung angepasst. Im *combustion model* wird zunächst die Zusammensetzung des verbrannten Gases abhängig von Temperatur und Druck nach dem chemischen Gleichgewicht berechnet.

Anschließend werden die Oberfläche und der Radius der Flammenfront für den aktuellen Zeitschritt abhängig vom verbrannten Volumenanteil aus einer Matrix ausgelesen. Dazu wurde zuvor unter der Annahme einer kugelförmigen Ausbreitung der Flamme die Flammenoberfläche für jeden möglichen Kurbelwinkel und verbrannten Volumenanteil berechnet. Da eine analytische Beschreibung dieses Zusammenhangs nur für sehr einfach geformte Brennkammern möglich ist, wird hier ein numerische Ansatz gewählt. Diese Monte-Carlo-basierte Methode verwendet einen Point-in-Polygon-Test für eine große Anzahl von Zufallspunkten auf und innerhalb einer Kugel, die die Flammenoberfläche darstellt.



**Abbildung 10: Beispielhafte Darstellung des point-in-polygon-Tests für verschiedene Brennkammerformen (links) und die berechnete Matrix der Flammenoberfläche (rechts)**



Für jeden möglichen Kurbelwinkel wird eine beliebig geformte Brennkammer mit einem Triangulationsalgorithmus vernetzt und der Radius der Kugel variiert. In jeder Iteration wird für alle Punkte auf und innerhalb der Kugel geprüft, ob sie innerhalb der Brennraumgeometrie liegen. Beispielhaft ist dies in Abbildung 10 links für zwei unterschiedliche Brennkammerformen dargestellt. Die Flammenoberfläche wird dann durch einfache Multiplikation des Anteils der innerhalb der Oberfläche liegenden Punkte auf der Kugeloberfläche mit der gesamten Kugeloberfläche approximiert. Die Werte der Flammenoberfläche werden für die entsprechende Form der Brennkammer in einer Matrix wie in Abbildung 10 rechts abgespeichert und können vom Modell über eine Lookup-Tabelle für beliebige Kurbelwinkel und Volumenanteile abgerufen werden.

Schließlich wird auf Grundlage des chemischen Kinetikmodells CANTERA mithilfe eines detaillierten Reaktionsmechanismus die Flammgeschwindigkeit abhängig von Temperatur und Druck des unverbrannten Gases im jeweiligen Kurbelwinkelschritt berechnet.

Mithilfe des Modells lassen sich bisher alle physikalischen Vorgänge des entworfenen Prozesses bis zum Verbrennungsbeginn modellieren. Beispielhaft ist in Abbildung 11 der Verlauf der Ventilhube von Einlass- und Auslassventil und die Massenströme der mit Überschallgeschwindigkeit injizierten Gase über dem Kurbelwinkel zu sehen. Der Winkel 0 entspricht dem oberen Totpunkt (TDC) und markiert den Verbrennungsbeginn. Die Massenströme und Ventilhubkurven wurden so gewählt, dass sich unter Berücksichtigung von Reibungs- und Wärmeverlusten die im vorherigen Modellschritt berechneten optimalen Massenverhältnisse einstellen.

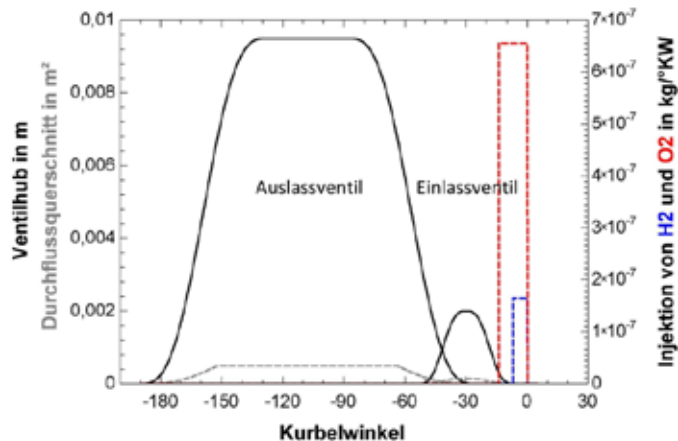


Abbildung 11: Ventilhub und injizierte Massenströme

Derzeit wird das gesamte Verbrennungsmodell mithilfe von Indiziermessdaten einer motorischen Wasserstoffverbrennung mit Luft validiert. Die Vorgänge vor Verbrennungsbeginn (Abgasauslass, Gemischansaugung, Verdichtung) lassen sich bereits mit hoher Genauigkeit abbilden. Der nach dem *turbulent entrainment model* berechnete Verbrennungsverlauf wird derzeit durch Anpassung der Modellkonstanten an die Messwerte angepasst. Nach Fertigstellung des validierten Modells lassen sich plausible Vorhersagen zu Druckverlauf, Wirkungsgrad und Leistung des Motorprozesses unter einfachen geometrischen Annahmen treffen.

### 3.3 Dreidimensionale Strömungssimulation (CFD)

Als dritte Ebene der Modellbildung wird die Verbrennung unter Einbeziehung geometrischer Einflussfaktoren dreidimensional mit einer Computational-Fluid-Dynamics-Methode (CFD) mithilfe der Software ANSYS CFX modelliert. Aus dem vorherigen Modellschritt sollen hier Erkenntnisse zur optimalen Prozesssteuerung einfließen und eine Optimierung von Konstruktionsparametern wie Injektordüsengeometrien und Injektionszeiten, Zündzeitpunkt und Brennraumgeometrie zu ermöglichen. Zudem lassen sich Betriebszustände identifizieren, die zu unerwünschten Verbrennungsphänomenen wie Motorklopfen führen.

Bisher wurden die auch für diese Modellebene notwendigen Validierungsberechnungen abgeschlossen. Ein wichtiger Schritt bei numerischen Strömungssimulationen stellt die sogenannte Netzkonvergenzstudie dar, welche die notwendige Auflösung der numerischen Gitter festlegt. Je feiner das Gitter aufgelöst wird, desto rechenintensiver wird die Lösung aller Erhaltungsgleichungen für jede der Zellen auf dem Gitter. Um die Gitterabhängigkeit zu untersuchen wurde der Brennraum eines lasermesstechnisch vermessenen Motors der TU Darmstadt wie in Abbildung 12 zu sehen unterschiedlich fein diskretisiert. Das Netz wird solange verfeinert, bis die Ergebnisse nicht mehr viel voneinander abweichen oder eine ausreichend genaue Übereinstimmung des simulierten mit dem gemessenen Strömungsfeld erreicht wird. Die Simulationsergebnisse in Abbildung 13 verdeutlichen, dass mit der mittleren Gittergröße das gemessene Strömungsfeld mit ausreichender Genauigkeit reproduziert werden kann. Sowohl die Strömungsgeschwindigkeiten, als auch die Lage der auffälligsten Wirbel werden so mit vertretbarem Rechenaufwand realitätsnah berechnet.

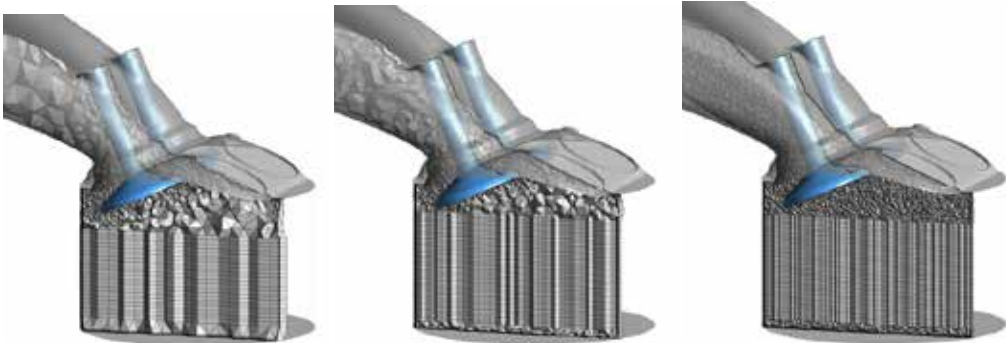
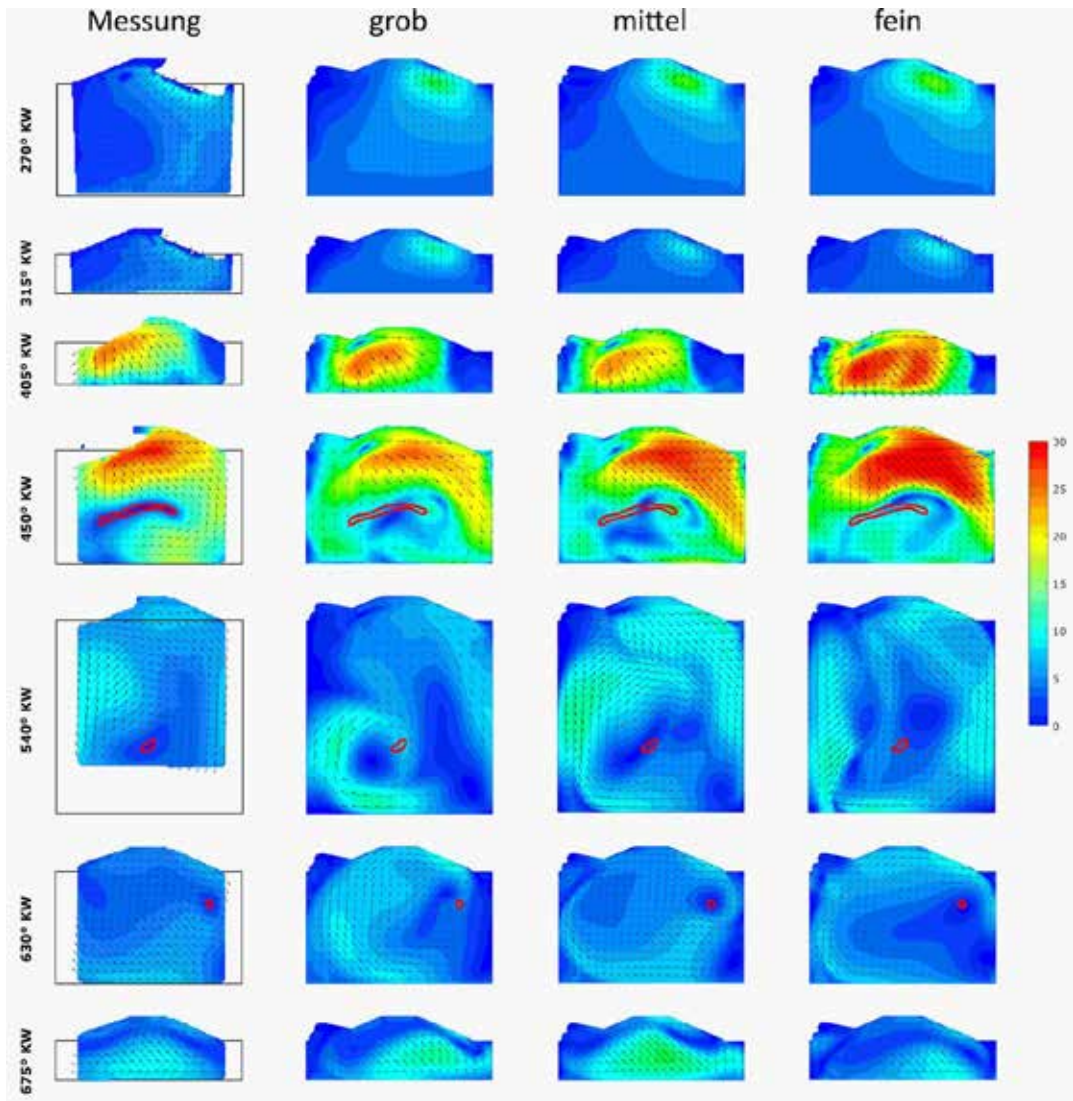
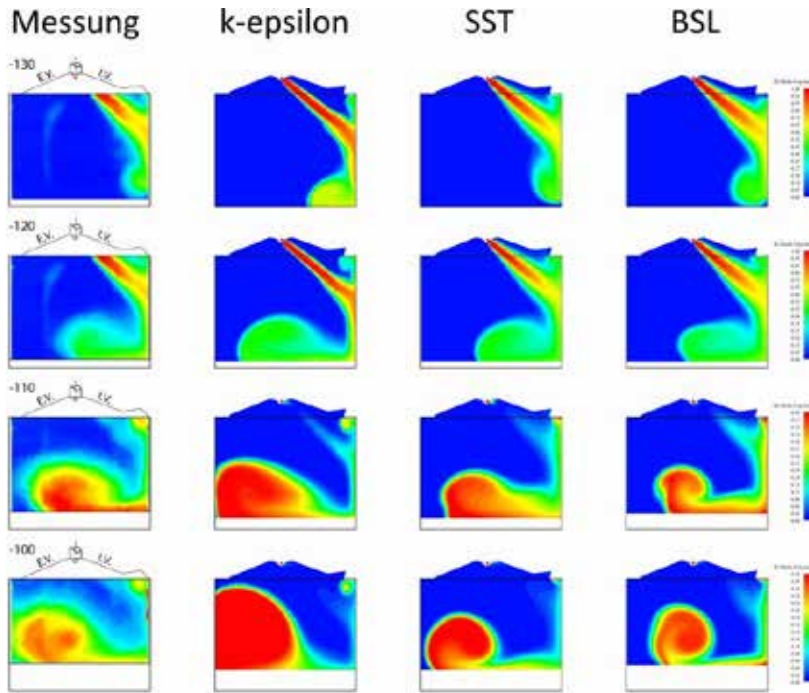


Abbildung 12: Netzkonvergenzstudie mit maximalen Elementgrößen von 8 mm, 4 mm und 2 mm



**Abbildung 13: Vergleich von simulierten und gemessenen Strömungsfeldern bei verschiedenen Kurbelwinkeln**

In einem weiteren Validierungsschritt wurden drei häufig verwendete Turbulenzmodelle untersucht und mit Lasermessdaten einer Wasserstoffinjektion in einem Motor der Sandia Labs (USA) verglichen. Die Simulationsergebnisse in Abbildung 14 zeigen, dass mit dem häufig verwendeten SST-Modell, eine Kombination des k-epsilon- und des k-omega-Modells, die tatsächliche Wasserstoffkonzentration während der Überschallinjektion gut getroffen werden kann.



**Abbildung 14: Vergleich von Simulationsergebnissen unter Verwendung verschiedener Turbulenzmodelle mit Messdaten zur Wasserstoffkonzentration**

Mithilfe dieser und weiterer Validierungsrechnungen können die Teilmodelle und Annahmen des CFD-Modells so gewählt werden, dass in Zukunft eine realitätsnahe Simulation des entworfenen Motorprozesses und damit eine Optimierung der Motorkonstruktion möglich sein wird.

#### 4. Fazit

Der Entworfenen Motorprozess zur Rückverstromung von gespeichertem Wasserstoff zeigt in den laufenden Untersuchungen bereits ein hohes Potential in Bezug auf Wirkungsgrad und Leistungsdichte und kann insofern zu einer kostengünstigen Flexibilitätsoption für das Stromnetz werden. Allerdings haben sich auch technische Herausforderungen gezeigt, insbesondere durch hohe Verbrennungstemperaturen, mögliche instabile Verbrennung, Schmierstoffdegradation, Ventildichtigkeit und Wasserstoffinjektion. In weiteren Untersuchungen werden die Prozessparameter und die geometrische Konstruktion optimiert. Die Modelle hierfür sind bereits vorbereitet und validiert.

**Danksagung: Die Autoren danken der Europäischen Union sowie der Thüringer Aufbaubank für die Unterstützung des Vorhabens ZEEPA.**



## 5. Literaturverzeichnis

- [1] J. Nitsch, et.al., “Langfristszenarien und Strategien für den Ausbau der erneuerbaren Energien in Deutschland bei Berücksichtigung der Entwicklung in Europa und global,” Schlussbericht im Auftrag des BMU, bearbeitet von DLR (Stuttgart), Fraunhofer IWES (Kassel) und IfNE (Teltow), 2012.
- [2] F.-I. für Solare Energiesysteme ISE Freiburg, “Energy Charts - aktuelle Grafiken zu Stromproduktion und Börsenstrompreisen in Deutschland,” [www.energy-charts.de](http://www.energy-charts.de), Dez. 2019.
- [3] M. Sterner and I. Stadler, *Energiespeicher - Bedarf, Technologien, Integration*. Springer, 2014.
- [4] ETG Task Force Energiespeicherung, “Energiespeicher für die Energiewende–Speicherungsbedarf und Auswirkungen auf das Übertragungsnetz für Szenarien bis 2050,” *VDE/ETG, Juni*, 2012.
- [5] T. Klaus, C. Vollmer, K. Werner, H. Lehmann, and K. Müschen, “Energieziel 2050: 100% Strom aus erneuerbaren Quellen,” *Umweltbundesamt*, 2010.
- [6] M. Sterner, M. Thema, F. Eckert, T. Lenck, and P. Götz, “Bedeutung und Notwendigkeit von Windgas für die Energiewende in Deutschland,” *Forschungsstelle für Energienetze und Energiespeicher (FENES) OTH Regensburg*, 2015.
- [7] J. Haller and T. Link, “Entwicklung eines effizienten emissionsfreien H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>-Verbrennungsmotors zur stationären Anwendung,” *Tagungsband des 23. Symposium zur Nutzung Regenerativer Energiequellen und Wasserstofftechnik, Stralsund*, 2016.
- [8] M. Weiße, D. Stolten, and T. Grube, “Projekt RH<sub>2</sub>-WKA Making Wind Energy a Steady Power Source,” *Proceedings of the World Hydrogen Energy Conference, Essen 2010*, 2010.
- [9] A. Mieke, T. Luschtinetz, M. Wenske, and F. Gamallo, “Wind-Hydrogen-Biomass - The Hybrid Power Plant of ENERTRAG AG,” *Proceedings of the World Hydrogen Energy Conference, Essen 2010*, 2010.
- [10] G. Gahleitner, “Hydrogen from renewable electricity: An international review of power-to-gas pilot plants for stationary applications,” *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 38, no. 5, pp. 2039–2061, 2013.
- [11] J. Haller and T. Link, “Thermodynamic concept for an efficient zero-emission combustion of hydrogen and oxygen in stationary internal combustion engines with high power density,” *International Journal of Hydrogen Energy*, 2017.
- [12] C. White, R. Steeper, and A. Lutz, “The hydrogen-fueled internal combustion engine: a technical review,” *International journal of hydrogen energy*, vol. 31, no. 10, pp. 1292–1305, 2006.
- [13] R. Pischinger, M. Klell, and T. Sams, *Thermodynamik der Verbrennungskraftmaschine*. Springer-Verlag, 2009.
- [14] J. Demuyck, M. De Paepe, H. Huisseune, R. Sierens, J. Vancoillie, and S. Verhelst, “On the applicability of empirical heat transfer models for hydrogen combustion engines,” *International Journal of Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 1, pp. 975–984, 2011.
- [15] J. Heywood, *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw-Hill New York, 1988, vol. 930.
- [16] P. Eilts, C. Stoeber-Schmidt, and R. Wolf, “Investigation of extreme mean effective and maximum cylinder pressures in a passenger car diesel engine,” *SAE Technical Paper, Tech. Rep.*, 2013.
- [17] N. C. Blizard and J. C. Keck, “Experimental and theoretical investigation of turbulent burning model for internal combustion engines,” *SAE Technical Paper, Tech. Rep.*, 1974.