

Wissenschaftliche Reihe
Fahrzeugtechnik Universität Stuttgart

RESEARCH

Lukas Urban

Modellierung der klopfenden Verbrennung methanbasierter Kraftstoffe



Springer Vieweg

Wissenschaftliche Reihe Fahrzeugtechnik Universität Stuttgart

Reihe herausgegeben von

Michael Bargende, Stuttgart, Deutschland

Hans-Christian Reuss, Stuttgart, Deutschland

Jochen Wiedemann, Stuttgart, Deutschland

Das Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart (IFS) an der Universität Stuttgart erforscht, entwickelt, appliziert und erprobt, in enger Zusammenarbeit mit der Industrie, Elemente bzw. Technologien aus dem Bereich moderner Fahrzeugkonzepte. Das Institut gliedert sich in die drei Bereiche Kraftfahrwesen, Fahrzeugantriebe und Kraftfahrzeug-Mechatronik. Aufgabe dieser Bereiche ist die Ausarbeitung des Themengebietes im Prüfstandsbetrieb, in Theorie und Simulation. Schwerpunkte des Kraftfahrwesens sind hierbei die Aerodynamik, Akustik (NVH), Fahrdynamik und Fahrermodellierung, Leichtbau, Sicherheit, Kraftübertragung sowie Energie und Thermomanagement – auch in Verbindung mit hybriden und batterieelektrischen Fahrzeugkonzepten. Der Bereich Fahrzeugantriebe widmet sich den Themen Brennverfahrensentwicklung einschließlich Regelungs- und Steuerungskonzeptionen bei zugleich minimierten Emissionen, komplexe Abgasnachbehandlung, Aufladesysteme und -strategien, Hybridsysteme und Betriebsstrategien sowie mechanisch-akustischen Fragestellungen. Themen der Kraftfahrzeug-Mechatronik sind die Antriebsstrangregelung/Hybride, Elektromobilität, Bordnetz und Energiemanagement, Funktions- und Softwareentwicklung sowie Test und Diagnose. Die Erfüllung dieser Aufgaben wird prüfstandsseitig neben vielem anderen unterstützt durch 19 Motorenprüfstände, zwei Rollenprüfstände, einen 1:1-Fahrsimulator, einen Antriebsstrangprüfstand, einen Thermowindkanal sowie einen 1:1-Aeroakustikwindkanal. Die wissenschaftliche Reihe „Fahrzeugtechnik Universität Stuttgart“ präsentiert über die am Institut entstandenen Promotionen die hervorragenden Arbeitsergebnisse der Forschungstätigkeiten am IFS.

Reihe herausgegeben von

Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende
Lehrstuhl Fahrzeugantriebe
Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart
Universität Stuttgart
Stuttgart, Deutschland

Prof. Dr.-Ing. Hans-Christian Reuss
Lehrstuhl Kraftfahrzeugmechatronik
Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart
Universität Stuttgart
Stuttgart, Deutschland

Prof. Dr.-Ing. Jochen Wiedemann
Lehrstuhl Kraftfahrwesen
Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart
Universität Stuttgart
Stuttgart, Deutschland

Weitere Bände in der Reihe <http://www.springer.com/series/13535>

Lukas Urban

Modellierung der klopfenden Verbrennung methanbasierter Kraftstoffe

Lukas Urban
IFS, Fakultät 7 Lehrstuhl
für Fahrzeugantriebe
Universität Stuttgart
Stuttgart, Deutschland

Zugl.: Dissertation Universität Stuttgart, 2020

D93

ISSN 2567-0042 ISSN 2567-0352 (electronic)
Wissenschaftliche Reihe Fahrzeugtechnik Universität Stuttgart
ISBN 978-3-658-32917-4 ISBN 978-3-658-32918-1 (eBook)
<https://doi.org/10.1007/978-3-658-32918-1>

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

© Der/die Herausgeber bzw. der/die Autor(en), exklusiv lizenziert durch Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH, ein Teil von Springer Nature 2021

Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung, die nicht ausdrücklich vom Urheberrechtsgesetz zugelassen ist, bedarf der vorherigen Zustimmung der Verlage. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Bearbeitungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von allgemein beschreibenden Bezeichnungen, Marken, Unternehmensnamen etc. in diesem Werk bedeutet nicht, dass diese frei durch jedermann benutzt werden dürfen. Die Berechtigung zur Benutzung unterliegt, auch ohne gesonderten Hinweis hierzu, den Regeln des Markenrechts. Die Rechte des jeweiligen Zeicheninhabers sind zu beachten.

Der Verlag, die Autoren und die Herausgeber gehen davon aus, dass die Angaben und Informationen in diesem Werk zum Zeitpunkt der Veröffentlichung vollständig und korrekt sind. Weder der Verlag, noch die Autoren oder die Herausgeber übernehmen, ausdrücklich oder implizit, Gewähr für den Inhalt des Werkes, etwaige Fehler oder Äußerungen. Der Verlag bleibt im Hinblick auf geografische Zuordnungen und Gebietsbezeichnungen in veröffentlichten Karten und Institutionsadressen neutral.

Springer Vieweg ist ein Imprint der eingetragenen Gesellschaft Springer Fachmedien Wiesbaden GmbH und ist ein Teil von Springer Nature.

Die Anschrift der Gesellschaft ist: Abraham-Lincoln-Str. 46, 65189 Wiesbaden, Germany

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Forschungsinstitut für Kraftfahrwesen und Fahrzeugmotoren (FKFS) unter der Leitung von Herrn Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende.

Mein besonderer Dank gebührt den Herren Prof. Dr.-Ing. Michael Bargende und Dr. Michael Grill für Ihre stete Unterstützung und die hervorragende wissenschaftliche und persönliche Betreuung während der Durchführung dieser Arbeit.

Herrn Prof. Dr.-Ing. Frank Atzler danke ich herzlich für das entgegengebrachte Interesse an dieser Arbeit und die Übernahme des Korreferats.

Für die Finanzierung und Förderung des Forschungsvorhabens „Direct4Gas“, das dieser Arbeit zu Grunde liegt, möchte ich mich beim Bundesministerium für Wirtschaft und Technik (BMWi) bedanken.

Bei meinen Kollegen am Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart (IFS) und am FKFS möchte ich mich dafür bedanken, dass Sie durch zahlreiche Anregungen und Diskussionen und die tolle Arbeitsatmosphäre einen wertvollen Beitrag zum Gelingen dieser Arbeit geleistet haben. Hervorheben möchte ich an dieser Stelle meine langjährigen studentischen Hilfskräfte, insbesondere Sebastian Hann, Miguel Angel Pacavita Muñoz und Eduardo Andrés Silva Piñeros, für deren Unterstützung ich sehr dankbar bin.

Ganz herzlich möchte ich zudem meiner Familie danken, die mich nicht nur während der Promotion immer unterstützt hat und ohne die diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Grafenau

Lukas Urban

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	V
Abbildungsverzeichnis	IX
Tabellenverzeichnis	XIII
Abkürzungsverzeichnis	XV
Symbolverzeichnis	XIX
Abstract	XXIII
Kurzfassung	XXVII
1 Einleitung und Zielsetzung	1
2 Grundlagen	3
2.1 Erdgas als Kraftstoff	3
2.1.1 Grundlegendes	3
2.1.2 Methanzahl	5
2.2 Grundlagen der Reaktionskinetik	7
2.3 Verbrennung von Kohlenwasserstoffen	10
2.3.1 Hochtemperaturchemie	11
2.3.2 Niedertemperaturchemie	13
2.4 Zündprozesse	15
2.5 Motorisches Klopfen	18
3 Modellierung der Erdgasverbrennung	21
3.1 Stand der Technik	21
3.2 Thermodynamische Grundlagen der Arbeitsprozessrechnung	23
3.3 Quasidimensionales Entrainmentmodell	25
3.4 Die laminare Flammengeschwindigkeit	26
3.4.1 Modellierung in Cantera	27
3.4.2 Geeignete Reaktionsmechanismen	29
3.4.3 Druck-, Temperatur- und Kraftstoffeinfluss	36
3.4.4 Einfluss von AGR-Rate und Luft-Kraftstoff-Verhältnis ...	40
3.4.5 Gleichungsansatz für die Arbeitsprozessrechnung	41

3.5	Validierung	43
3.5.1	Variation Wasserstoffanteil	44
3.5.2	Schwerpunktlagenvariation	45
3.5.3	Drehzahlvariation	47
3.5.4	Variation Luft-Kraftstoff-Verhältnis	48
3.6	Anwendung in der Klopfmodellierung	49
4	Modellierung der Selbstzündung	51
4.1	Stand der Technik	51
4.2	Reaktionskinetische Untersuchung der Selbstzündung	56
4.2.1	Der Cantera-Reaktor	57
4.2.2	Geeignete Reaktionsmechanismen	59
4.2.3	Ergebnisse	61
4.3	Modellierungsansatz	70
4.3.1	Approximation des Zündverzugs	70
4.3.2	Livengood-Wu-Integral	82
4.4	Übertragung auf die Motorprozessrechnung	85
5	Anwendung auf Messdaten	87
5.1	Versuchsaufbau und Vorgehen	87
5.2	Klopferkennung	90
5.3	Druckverlaufsanalyse	93
5.4	Randbedingungen für die Simulation	94
5.5	Betrachtung von Einzelzyklen	95
5.6	Vorhersage Klopfgrenze	102
5.6.1	Auswertung LW-Integral	102
5.6.2	Kraftstoffeinfluss	105
5.6.3	Drehzahleinfluss	110
5.6.4	Einfluss Luft-Kraftstoff-Verhältnis	112
5.6.5	Einfluss Ansauglufttemperatur	113
5.7	Bewertung der Ergebnisse	114
6	Zusammenfassung und Ausblick	121
	Literaturverzeichnis	125
	Anhang	139

Abbildungsverzeichnis

1.1	Qualitativer Vergleich der Antrieboptionen Diesel, batterieelektrisch, Wasserstoff und e-Gas (Compressed Biogas/CBG, Gas aus Power-to-Gas-Verfahren/PtG) [16].....	1
2.1	AVL-Methanzahl für ein ternäres Gemisch in Abhängigkeit der Molanteile an Methan, Ethan und Butan [10]	6
2.2	Falloff-Kurven des unimolekularen Ethan-Zerfalls [104]	10
2.3	Reaktionspfaddiagramm der C_1 und C_2 Kohlenwasserstoffoxidation [104]	12
2.4	Niedertemperatur-Reaktionspfaddiagramm für Methan bei $T = 1345$ K und $p = 1$ atm aus [95]	14
2.5	Schematische Zündgrenzen für Kohlenwasserstoffe [104]	16
2.6	Darstellung der Selbstzündungsmodi Thermische Explosion (I), Deflagration (II) und Detonation (III) [26]	17
2.7	Druckverläufe einer regulären und klopfenden Verbrennung mit Druckschwingungen unterschiedlicher Ausprägung [47]	19
3.1	System Brennraum	23
3.2	Entrainment Modell	25
3.3	Experimentelle Bestimmung der laminaren Brenngeschwindigkeit mit der Düsenmethode [19]	29
3.4	Schlierenaufnahme der Flammenfront einer Wasserstoff-Flamme [45]	30
3.5	s_L für Ethan (Abbildung links, Rechenergebnisse aus [38], Messdaten aus [18], [52] und [98]) und Wasserstoff (Abbildung rechts, Rechenergebnisse aus [38], Messdaten aus [21], [63], [94] und [112]), $T = 298$ K, $p = 1$ bar	32
3.6	s_L für Propan (Rechenergebnisse aus [38], Messdaten aus [18], [52] und [98]), $T = 298$ K, $p = 1$ bar	34
3.7	s_L für n-Butan (Rechenergebnisse aus [38], Messdaten aus [18] und [14]), $T = 298$ K, $p = 1$ bar	35
3.8	Vergleich ausgewählter Reaktionsmechanismen, Rechenergebnisse aus [38]	36

3.9	Ethaneinfluss auf die lam. Flammengeschwindigkeit, Rechenergebnisse aus [38]	37
3.10	Propaneinfluss auf die lam. Flammengeschwindigkeit, Rechenergebnisse aus [38]	38
3.11	Butaneinfluss auf die lam. Flammengeschwindigkeit, Rechenergebnisse aus [38]	38
3.12	Wasserstoffeinfluss auf die lam. Flammengeschwindigkeit, Rechenergebnisse aus [38]	39
3.13	Einfluss von AGR-Rate und Luft-Kraftstoff-Verhältnis für Methan, Rechenergebnisse aus [38]	41
3.14	Abweichung der Ewald-Korrelation für motorische Druck- und Temperaturbereiche, Rechenergebnisse aus [38]	43
3.15	Wasserstoffeinfluss (2000 U/min, $\lambda = 1$)	45
3.16	Schwerpunktlagenvariation (Netzgas, 2000 U/min, $\lambda = 1$)	46
3.17	Drehzahlvariation (Methan, $\lambda = 1$)	47
3.18	Vorhersagefähigkeit bei Abmagerung (Netzgas, 2000 U/min)	48
3.19	Vorhersagefähigkeit bei Anreicherung (Netzgas, 2000 U/min)	49
4.1	Graphische Veranschaulichung des LW-Integrals	54
4.2	Temperaturverlauf im Reaktor	58
4.3	Validierung Cantera Simulation	61
4.4	Druckeinfluss auf den Zündverzug von Methan	63
4.5	Einfluss Luft-Kraftstoff-Verhältnis auf den Zündverzug von Methan	64
4.6	Zündverzug von Methan/Ethan-Gemischen	66
4.7	Zündverzug von Methan/Propan-Gemischen	67
4.8	Zündverzug von Methan/Butan-Gemischen	68
4.9	Zündverzug von Methan/Wasserstoff-Gemischen	69
4.10	Temperaturregimes	71
4.11	Approximation Methan - Druckeinfluss	73
4.12	Approximation Methan - Restgas- und λ -Einfluss	73
4.13	Approximation Binärgase	77
4.14	Modellierungsansatz für Mehrkomponentengemische	79
4.15	Approximation Mehrkomponentengemische 10 bar	80
4.16	Approximation Mehrkomponentengemische 100 bar	81
4.17	Approximation Mehrkomponentengemische	82
4.18	Cantera-Reaktor zur Validierung LW-Integral	83

4.19	Vorhersagefähigkeit LW-Integral	84
5.1	Bestimmung der U50%-Lage an der 5%-Klopfgrenze	89
5.2	Vorgehensweise Siemens VDO-Algorithmus [82]	91
5.3	Heizverlaufskriterium nach Scharlipp [82]	92
5.4	Filterung des Drucksignals für die Modellierung.....	94
5.5	Vereinfachtes 1D-Ladungswechselmodell des Versuchsmotors	95
5.6	Iterative Bestimmung des Temperaturaufschlags ΔT_{HS}	97
5.7	„hot spot“-Temperaturmodell	97
5.8	Einzelzyklenanalyse Binärgase MZ 88,14	99
5.9	Einzelzyklenanalyse Binärgase MZ 81,86	100
5.10	Einzelzyklenanalyse Binärgase MZ 65,62	100
5.11	Einzelzyklenanalyse Realgase	101
5.12	Einzelzyklenanalyse Methan	102
5.13	Verteilung der Klopfintensitäten	103
5.14	Verlauf der Sankaran-Zahl während eines Arbeitsspiels.....	104
5.15	Einfluss von Druck- und Temperaturgradient aufs Klopfen.....	105
5.16	Vorhersage der Klopfgrenze für Methan/Ethan-Gemische	106
5.17	Vorhersage der Klopfgrenze für Methan/Propan-Gemische	107
5.18	Vorhersage der Klopfgrenze für Methan/Butan-Gemische	108
5.19	Vorhersage der Klopfgrenze für Methan/Wasserstoff-Gemische	109
5.20	Vorhersage der Klopfgrenze für Realgase	110
5.21	Vorhersage der Klopfgrenze für eine Drehzahl-Variation	111
5.22	Vorhersage der Klopfgrenze für eine λ -Variation	112
5.23	Vorhersage der Klopfgrenze für eine T_2 -Variation	113
5.24	Einfluss eines T_{lv} -Offsets auf die Klopfgrenze.....	115
5.25	Anteil verschiedener Temperaturniveaus an der I_K -Wert Bildung	115
5.26	Vergleich von Druck- und Temperatureinfluss auf den Zündverzug von Methan	117
5.27	klopfende/nichtklopfende Einzelzyklen	117
5.28	Sekundärgaseinfluss auf die Klopfgrenze	119
6.1	Beispielhafte Vorhersage von Klopfgrenze und indiziertem Hochdruckwirkungsgrad je nach Verdichtungsverhältnis	124

Tabellenverzeichnis

2.1	Typische Eigenschaften in Deutschland verteilter Erdgase [99]	4
3.1	Verwendete Reaktionsmechanismen.....	31
3.2	Betriebspunktübersicht zu Abbildung 3.16	46
4.1	Übersicht geeigneter Reaktionsmechanismen	59
4.2	Arrhenius-Parameter für Methan	72
4.3	Parameter für Ethan-Zumischungen	74
4.4	Parameter für Wasserstoff-Zumischungen	75
4.5	Parameter für Propan-Zumischungen	75
4.6	Parameter für Butan-Zumischungen	76
4.7	Untersuchte Mehrkomponentengemische	80
5.1	Motor- und Versuchsspezifikationen.....	88
5.2	Realgasmatrix	90
5.3	Binärgasmatrix	90
5.4	Klopfgrenze (U50% κ) für Ethan-Vergleichsgemische	106
5.5	Klopfgrenze (U50% κ) für Propan-Vergleichsgemische.....	107
5.6	Klopfgrenze (U50% κ) für Butan-Vergleichsgemische	108
5.7	Klopfgrenze (U50% κ) für Wasserstoff-Vergleichsgemische.....	109
5.8	Klopfgrenze (U50% κ) für Realgase	110
5.9	Klopfgrenze (U50% κ) für eine Drehzahl-Variation.....	111
5.10	Klopfgrenze (U50% κ) für eine λ -Variation.....	112
5.11	Klopfgrenze (U50% κ) für eine T_2 -Variation	113
A1	Parameterdaten für die Ewald-Gleichung (Methan) [38]	139
A2	Spline Stützstellen S_1 und S_2 für die Berechnung von T^0 (Methan) [38]	140
A3	Spline Stützstellen S_3 und S_4 für die Berechnung von T_B (Methan) [38]	140

Abkürzungsverzeichnis

0D	Nulldimensional
1D	Eindimensional
3D	Dreidimensional
AGR	Abgasrückführung
APR	Arbeitsprozessrechnung
ASP	Arbeitsspiel
AVL	Anstalt für Verbrennungskraftmaschinen List
BD	Brenndauer
BmWi	Bundesministerium für Wirtschaft und Energie
BNG	Bio Natural Gas, Biogas
BP	Betriebspunkt
C	Kohlenstoff
C_2H_2	Ethin (Acetylen)
C_2H_4	Ethen
C_2H_5	Ethyl
C_2H_6	Ethan
C_3H_8	Propan
CA	Crank Angle (Kurbelwinkel)
CFD	Computational Fluid Dynamics, numerische Strömungsmechanik
CFR	Cooperative Fuel Research
CH_2	Methylen
CH_2O	Formaldehyd
CH_2OH	Hydroxymethyl
CH_3	Methyl
CH_3O_2	Methyldioxidanyl
CH_3O_2H	Methylhydroperoxid
CH_3OH	Methanol

CH ₄	Methan
CNG	Compressed Natural Gas, komprimiertes Erdgas
CO	Kohlenstoffmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
COV	Kovarianz
DIN	Deutsches Institut für Normung e. V.
DVA	Druckverlaufsanalyse
DVGW	Deutscher Verein des Gas- und Wasserfaches
EASP	Einzelarbeitsspiel
FE	Finite Elemente (Methode)
FKFS	Forschungsinstitut für Kraftfahrwesen und Fahrzeugmotoren Stuttgart
FVV	Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen e. V.
Gl	Gleichung
GRI	Gas Research Institute, University of California, Berkeley
H	High, bezieht sich auf den gravimetrischen Heizwert von Erdgas >46 MJ/kg
H	Wasserstoff
H ₂ O	Wasser
H ₂ O ₂	Wasserstoffperoxid
HC	Hydrocarbons (Kohlenwasserstoffe)
HCO	Formyl
HO ₂	Hydroperoxyl
HS	hot spot, Stelle erhöhter Temperatur im Endgas
iC ₄ H ₁₀	iso-Butan
IFS	Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart
KH	Klopfhäufigkeit
KI	Klopfintensität
KW	Kurbelwinkel

L	Low, bezieht sich auf den gravimetrischen Heizwert von Erdgas >39 MJ/kg
LIF	Laserinduzierte Fluoreszenz
LLNL	Lawrence Livermore National Laboratory
LNG	Liquefied Natural Gas, Flüssigerdgas
LPG	Liquefied Petroleum Gas, Flüssiggas aus Propan und Butan
LW	Livengood-Wu (Integral)
M	Molekül (Stoßpartner)
N ₂	Stickstoff
nC ₃ H ₇ O ₂	Alkylperoxid
nC ₄ H ₁₀	n-Butan
NTC	Negative Temperature Coefficient
NUI	National University of Ireland
O ₂	Sauerstoff
OH	Hydroxyl
OT	Oberer Totpunkt
PKW	Personenkraftwagen
RCM	Rapid Compression Machine
ROZ	Research-Oktanzahl
sC ₄ H ₉	Butyl
SNG	Synthetic Natural Gas, Synthetisches Erdgas
SWP	Schwerpunkt
SZ	Selbstzündung
USC	University of Southern California
UT	Unterer Totpunkt
VDO	Vereinigte DEUTA–OTA, Marke der Continental AG

WOT	Wide open throttle, Saugvollast
ZOT	Zünd-OT, oberer Totpunkt zwischen Kompression und Arbeitstakt
ZZP	Zündzeitpunkt

Symbolverzeichnis

Lateinische Buchstaben

A	Frequenzfaktor (Ewald-Gleichung)	-
A	Präexponentieller Faktor der Arrhenius Gleichung	-
A_w	Fläche des Wall-Objects im Cantera-Reaktor	m^2
B_i	Abstimmungsparameter der Ewald-Gleichung	-
c	Stoffmengenkonzentration	mol/m^3
C_k	Koeffizient für die turbulente kinetische Energie bei Rechenstart	-
c_v	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen	$J/kg/K$
E_i	Abstimmungsparameter der Ewald-Gleichung	-
e_1	Korrekturfaktor der Zündverzugsapproximation für Mehrkomponentengemische	-
E_A	Aktivierungsenergie	J/mol
F	Abstimmungsparameter der Ewald-Gleichung	-
G	Abstimmungsparameter der Ewald-Gleichung	-
H_u	unterer Heizwert	J/kg
I_K	Zündintegral	-
J	Dichte einer Erhaltungsgröße	-
j	Diffusionsstromdichte	$mol/m^2/s$
k	Geschwindigkeitskonstante	$1/s$ (1.Ord.)
A_F	Flammenoberfläche	m^2
l_T	Taylorlänge	m
M	Molare Masse	kg/mol
m	Abstimmungsparameter der Ewald-Gleichung	-
\dot{m}	Massenstrom	kg/s
m	Masse	kg
MZ	Methanzahl	-