

PROJEKTBECHREIBUNG: NUMERISCHE SIMULATION DER GEMISCHBILDUNG UND VERBRENNUNG IN EINEM STATIONÄREN H₂-O₂-VERBRENNUNGSMOTOR

J. Haller, T. Link

*Fachhochschule Nordhausen, Institut für Regenerative Energietechnik (in.RET),
Weinberghof 4, D-99734 Nordhausen, haller@fh-nordhausen.de*

Zusammenfassung: Für eine erfolgreiche Umsetzung der Energiewende werden in großem Maße elektrische Energiespeicher benötigt, um fluktuierende Einspeiseleistungen in das Stromnetz zu integrieren. Eine Möglichkeit der Speicherung besteht dabei in der elektrolytischen Umwandlung von elektrischer Energie in Wasserstoff und Sauerstoff und deren anschließende Verbrennung in einem Verbrennungsmotor zur Verstromung. Da die Entwicklung marktgängiger Brennstoffzellen für den stationären Betrieb als BHKW noch bevorsteht, bietet es sich an, auch auf diese etablierte Technologie zurückzugreifen.

Bisher konzentrierte sich die Forschung auf dem Gebiet mehrheitlich auf mobile Anwendungen von Wasserstoff-Verbrennungsmotoren und damit auf die Verbrennung von Wasserstoff mit Luft. Da die atmosphärische Luft Stickstoff und Kohlendioxid enthält, besteht ein Problem dieser Verbrennung vor allem in der Bildung von schädlichen Stickoxiden. Wird ein Wasserstoff-Motor stattdessen mit reinem Sauerstoff betrieben, entsteht bei stöchiometrischer Verbrennung als Reaktionsendprodukt lediglich Wasserdampf, der als Inertgas zur Steuerung der Verbrennung eingesetzt werden kann.

In der Arbeit wird ein Promotionsvorhaben vorgestellt, in welchem die Verbrennung und Gemischbildung in einem Wasserstoff-Sauerstoff-Verbrennungsmotor mit stöchiometrischem Gasgemisch mithilfe von numerischen CFD-Simulationen untersucht werden sollen. Ziel ist es, Leistungsparameter und optimale Geometrien und Steuerzeitpunkte für die Verbrennung in einem solchen Motor zu bestimmen und die Wirksamkeit des Prozesses an einem 1-Zylindermodell nachzuweisen. Die Untersuchungen der turbulenten Verbrennung sollen mit der Software ANSYS CFX durchgeführt und durch Berechnung von dokumentierten Testfällen validiert werden. Das Vorhaben soll eine mögliche praktische Umsetzung des Motors vorbereiten und konstruktive wie regelungstechnische Vorgaben und Optimierungsansätze liefern.

Abstract: For a successful transition of the energy system to renewable energies, there will be a great demand for energy storage to be able to integrate fluctuating power supplies to the grid. One option for long-term energy storage is the production of hydrogen and oxygen from water electrolysis and its combustion in an internal combustion engine to reconvert stored energy to electrical power. Compared to fuel cells, this established technology is ready for the market and relatively easy to handle.

Previously, research on this field was mainly done by the automotive industry, regarding combustion of hydrogen with air. Because of the large amount of nitrogen in atmospheric air, one problem of this combustion is the formation of nitrogen oxides. This can be avoided by combusting hydrogen with pure oxygen that is already produced during electrolysis. Thus, the only reaction product of the stoichiometric combustion is water vapor, which can be used to control combustion temperatures.

In this paper, a PhD project is presented, which will investigate the combustion and mixture formation in a hydrogen-oxygen internal combustion engine by means of computational fluid dynamics. The aim is to determine performance parameters and optimum geometries and control times for such an engine and to verify the effectivity of the process in a one-cylinder model. The turbulent combustion will be modeled using the ANSYS CFX software and calculations will be validated using literature test data. The project's aim is to provide design and control specifications for a practical realization of the engine.

Schlüsselwörter: *Wasserstoffverbrennung, Wasserstoffmotor, BHKW, CFD, Verbrennungssimulation, Direkteinspritzung*

1. Einführung

Nach dem mittleren Szenario der Leitstudie des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit aus dem Jahr 2011 wird der Anteil an Strom aus erneuerbaren Quellen an der Strombereitstellung im Jahr 2050 bei 85% liegen und mehrheitlich aus PV- und Windenergie stammen [1]. Während die Stromerzeugung aus PV gut mit dem Tageslastgang korreliert, zeigen sich bei Windstrom große Fluktuationen auf täglicher und wöchentlicher Basis [2]. Der notwendige Speicherbedarf zur Pufferung dieser Fluktuationen wurde in einer Studie des Fraunhofer IWES für verschiedene Szenarien bis zum Jahr 2050 ermittelt. In Abbildung 1 ist die prognostizierte Entwicklung des Speicherbedarfs in Deutschland bei idealem Netzausbau für zwei Szenarien der Leitstudie und einer Studie des Umweltbundesamtes dargestellt. Die Studie kommt zu dem Schluss, dass Stromüberschüsse „in beträchtlicher Größenordnung trotz idealem Netzausbau zu erwarten“ sind [2]. Für eine kurzfristige Speicherung über Stunden und Tage ist die zur Verfügung stehende Kapazität relativ gering, da das Potential von Pumpspeicherwerken in Deutschland ausgeschöpft ist, die Technologie für Druckluftspeicher noch mit hohen Kosten verbunden ist und das Potential der Batteriespeicher in Fahrzeugen nur bei einer großen Flotte an Elektrofahrzeugen relevant wird. Als einzige Möglichkeiten der langfristigen Speicherung größerer Strommengen über Wochen und Monate sieht die Studie die ebenfalls mit Problemen verbundene Erschließung der skandinavischen Wasserkraft und die Speicherung als chemische Energieträger wie Wasserstoff oder Methan [2].

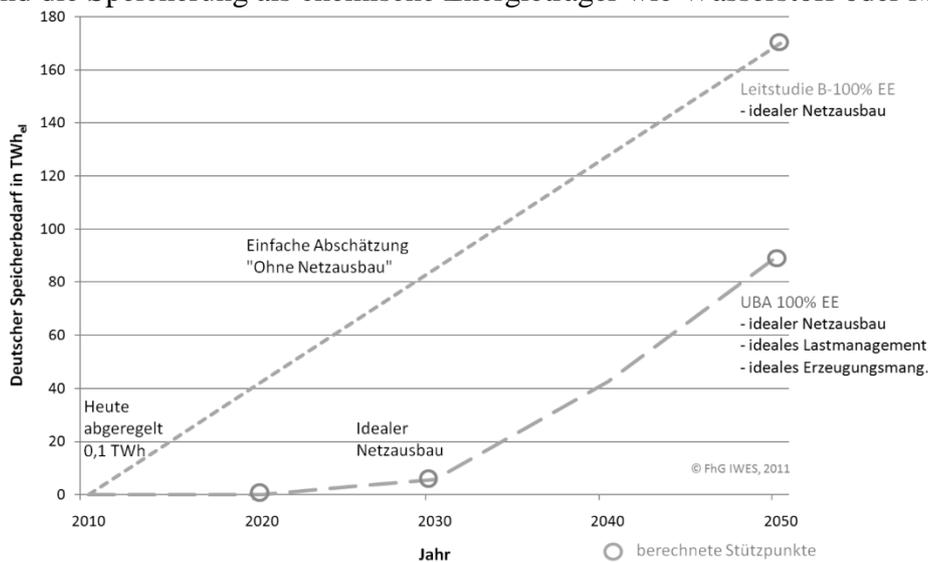


Abbildung 1: Notwendiger Bedarf an Stromspeichern nach verschiedenen Szenarien [2]

1.1 Wasserstoff als Stromspeicher

Elektrische Energie kann über die elektrolytische Spaltung von Wasser chemisch als Wasserstoff gespeichert werden. Kommerzielle Hochdruck-Elektrolyseure größerer Leistung erreichen dabei einen Wirkungsgrad von über 71% bezogen auf den Heizwert des Wasserstoffs [3]. Durch Kompression und Speicherverluste verringert sich der Umwandlungswirkungsgrad weiter. Für die Rückverstromung der gespeicherten chemischen Energie stellen aufgrund ihres hohen elektrischen Wirkungsgrades von bis zu 60% Hochtemperaturbrennstoffzellen die theoretisch beste Alternative dar [4]. Trotz langjähriger intensiven Forschungsbemühungen sind Brennstoffzellen jedoch für viele Anwendungen in Bezug auf Lebensdauer und Kosten noch nicht konkurrenzfähig [5][6]. Als mittelfristige Lösung zur Rückverstromung bietet sich daher der Einsatz von Wasserstoff in

Verbrennungsmotoren als BHKW an, da diese Technologie etabliert und kostengünstig ist und bei der Nutzung der Abwärme ähnlich hohe Gesamtwirkungsgrade erzielt werden können.

2. Emissionsfreier H₂-O₂-Stationärmotor

In einem Promotionsprojekt über drei Jahre soll ein emissionsfreier Stationärmotor mit stöchiometrischer Verbrennung von H₂ und O₂ zur Rückverstromung der als Wasserstoff gespeicherten Energie konzipiert werden. Für stationäre Anwendungen als BHKW kann die Verbrennung von Wasserstoff mit reinem Sauerstoff betrieben werden, da dieser durch die Elektrolyse ohnehin anfällt. Durch eine stöchiometrische Mischung von Wasserstoff und Sauerstoff wird die Leistungsdichte eines Motors im Vergleich zur Verbrennung mit Luft erhöht und durch die Abwesenheit von Kohlenstoff und Stickstoff werden faktisch keine Schadstoffe emittiert. Die hohen Flammgeschwindigkeiten von Wasserstoff bei der Oxidation mit reinem Sauerstoff bieten thermodynamische Vorteile gegenüber anderen Brennstoffen, da die idealisierte Gleichraumverbrennung im Otto-Prozess besser realisiert werden kann. Gleichzeitig werden bei der Verbrennung jedoch sehr hohe Temperaturen von über 3000°C erreicht, die materialtechnisch nicht zu beherrschen sind und zu unkontrolliertem Selbstzünden führen können.

Ein Konzept zur Reduktion der Verbrennungstemperaturen besteht in der Kühlung der Flamme durch Wasserdampf, der als Verbrennungsprodukt teilweise im Zylinder belassen wird. Ein Vergleich der Ballastgase Luft und Wasserdampf in Abbildung 2 zeigt, dass das notwendige Gasvolumen bei Wasserdampf um 15% geringer ist, wodurch sich Ladungswechsel- und Wärmeverluste im Vergleich zur Verbrennung mit Luft verkleinern. Berechnungen unter der Annahme eines vollkommenen Motors zeigen jedoch, dass die Verbrennungstemperaturen dadurch zwar anfänglich reduziert werden können, nach mehreren Durchläufen des Kreisprozesses die Temperaturen jedoch stetig ansteigen. Dies geschieht, da das im Zylinder verbleibende Abgas die anfängliche Gemischtemperatur und somit das gesamte Temperaturniveau des Kreisprozesses erhöht. Um das zu verhindern, muss das im Zylinder verbleibende Ballastgas gekühlt werden.

1m ³ H ₂	0,5m ³ O ₂	4,26 m ³ Ballastgas mit Cp = 5,16 kJ/K
1m ³ H ₂	0,5m ³ O ₂	3,64 m ³ Wasserdampf mit Cp = 5,16 kJ/K

Abbildung 2: Vergleich der Ballastgaseigenschaft von Luft und Wasserdampf

Eine Möglichkeit der Kühlung besteht in einer weiteren Expansion des Abgases, wodurch gleichzeitig ein Teil der Abgasenthalpie als mechanische Arbeit genutzt und der Gesamtwirkungsgrad des Prozesses erhöht werden kann. Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung eines solchen zweistufigen Prozesses aus ottomotorischer Verbrennung und Dampfkraftprozess innerhalb eines Zylinders. In Anlehnung an einen kombinierten Gas-und-Dampfprozess (GuD) wird die Abgaswärme des Verbrennungsprozesses zur Verdampfung und Überhitzung in einem Dampfprozess genutzt und so ein höherer Wirkungsgrad erreicht, als in den Einzelprozessen möglich. Im Unterschied zum GuD-Prozess soll hierbei jedoch für beide Teilprozesse dasselbe Arbeitsfluid eingesetzt werden.

2.1 Ottomotorische Verbrennung und Dampfexpansion

Die geplanten Kreisprozesse sind in Abbildung 3 schematisch als p-v-Diagramme dargestellt. Links ist der innerzylindrische Verbrennungsprozess als realer Otto-Prozess mit folgenden Teilschritten zu sehen: 1→1' Teilweises Ausschieben von Abgas, 1'→2 Kompression und Direktinjektion von H₂ und O₂, 2→3 Gleichraumverbrennung, 3→4 Anteil Gleichdruckverbrennung im realen Otto-Prozess 4→5 Expansion, 5→6 Ausschieben des Abgases. Nach dem Ausschieben aus dem Zylinder wird das Abgas außerhalb des Zylinders dem rechts in der Abbildung zu sehenden Dampfprozess zugeführt. Dem Wasserdampf wird zunächst in einem Wärmetauscher Wärme entzogen (6→6'). Anschließend wird der Dampf kondensiert (6'→7) und das Wasser durch eine Pumpe auf ein höheres Druckniveau gebracht (7→8). Auf diesem Druckniveau wird die zuvor entzogene Wärme wieder zugeführt und das Wasser verdampft und überhitzt (8→9). Der Dampf wird nun wieder in den Zylinder eingebracht und auf Umgebungsdruck und relativ niedrige Temperaturen entspannt (9→1).

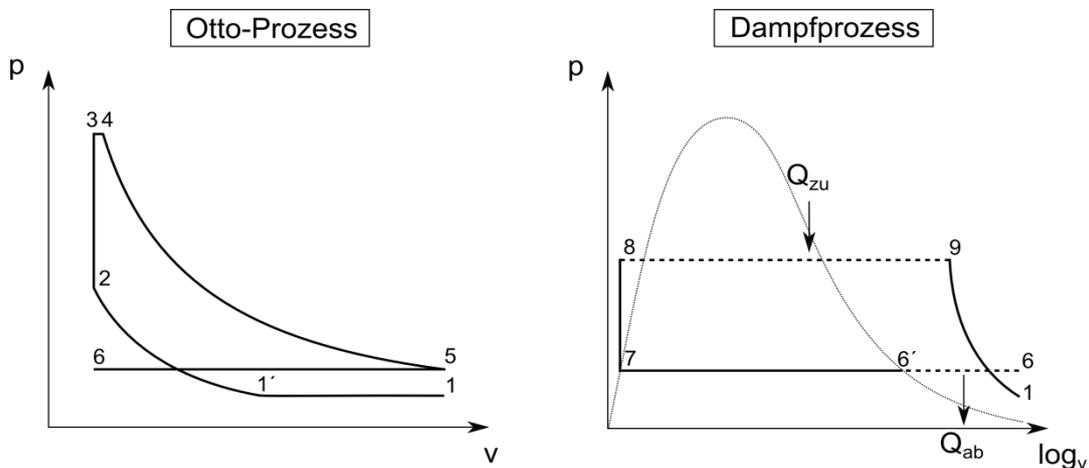


Abbildung 3: Zweistufiger Prozess aus ottomotorischer Verbrennung (links) und Dampfprozess (rechts)

Dadurch ergeben sich für den Verbrennungsmotor die folgenden vier Takte:

1. Teilweises Ausschieben von Abgas + Kompression + Direkteinblasung von H₂ und O₂
2. Verbrennung + Gasexpansion
3. Ausschieben des Abgases
4. Dampfexpansion

3. Stand der Forschung

Bisherige Untersuchungen zur innermotorischen Verbrennung von Wasserstoff konzentrieren sich im Wesentlichen auf mobile Anwendungen und damit auf die Verbrennung mit Luft. Der Stand der gegenwärtigen Forschung wird dabei durch die Ergebnisse einer Reihe von Projekten des 6. Rahmenprogramms der Europäischen Kommission markiert. Zu nennen sind hier vorrangig das

Projekt HyICE¹ [7], daneben dessen Nachfolge-Projekt H₂BVplus² [8], sowie die Flottenuntersuchung HyFLEET:CUTE³ [9].

Im Rahmen des HyICE-Projekts beteiligten sich sowohl die Fahrzeughersteller BMW, MAN, Ford und Volvo, als auch die Technische Universität Graz und die Universität der Bundeswehr München um zwei unterschiedliche Entwicklungslinien der Gemischbildung zu untersuchen: Einerseits die außerzylindrische Gemischbildung von Verbrennungsluft mit kryogenem Wasserstoff, andererseits die innerzylindrische Gemischbildung durch direktes Eindüsen von gasförmigem Wasserstoff. In den Hauptarbeiten des Projekts [10] und [11] wird die innerzylindrische Gemischbildung und Verbrennung mithilfe der numerischen Strömungssimulationssoftware ANSYS CFX in einem 1-Zylinder-Modell dreidimensional modelliert. Zur Verifikation der theoretischen Untersuchungsergebnisse dienten u.a. optische Lichtschnitt-Aufnahmen eines thermodynamischen Einzylinder-Transparentmotors. Mit beiden Verfahren war es möglich, die spezifische Leistung und den Wirkungsgrad von Wasserstoffmotoren zu steigern. Die erreichten Wirkungsgrade liegen zwischen 42% bei kryogener Einspritzung und 44% bei Direkteinblasung des gasförmigen Wasserstoffs. Den genannten Arbeiten gingen mehrere Dissertationen an Universitäten in München, Graz und Gent auf dem Gebiet der Wasserstoff-Verbrennungsmotoren voran, die sich zunächst mit der detaillierten Untersuchung der Verbrennungseigenschaften von Wasserstoff beschäftigten [12]. In den darauffolgenden Arbeiten lag der Fokus auf Berechnungen zur Gemischbildung und Verbrennung mithilfe des CFD-Solvers FLUENT [13]. Zur Validierung der Simulation einzelner Prozesse und des kompletten Arbeitstaktes dienten experimentelle Untersuchungen von Einspritz-Strategien [14] und der äußeren Gemischbildung für verschiedene Injektions- und Zündzeitpunkte sowie Einspritzdüsen-Geometrien [15].

4. Projektvorhaben

Im Rahmen des Promotionsprojektes soll der vorgeschlagene Prozess hinsichtlich der Verbrennung näher untersucht werden. Das Ziel ist dabei zunächst der Nachweis der Wirksamkeit des entwickelten motorischen Verfahrens mithilfe von thermodynamischen und eindimensionalen Simulationen. Im Anschluss soll der innermotorische Prozess in einem 1-Zylindermodell mithilfe der Strömungssimulations-Software CFX der Firma ANSYS simuliert werden, um die vorausberechnete Wirksamkeit des Verfahrens auch unter Zulassung einer größeren Komplexität nachzuweisen und aus der Berechnung konkrete Konstruktionsparameter abzuleiten. Die Randbedingungen für die Simulationen werden mithilfe von eindimensionalen Berechnungen bestimmt. Zur Validierung der gewählten Teilmodelle und Randbedingungen für die dreidimensionale Strömungssimulation soll ein dokumentierter Testfall einer innermotorischen Wasserstoffverbrennung simuliert werden.

Die CFD-Software CFX bietet sich hierfür an, da die durchzuführenden Forschungsarbeiten unmittelbar an die Ergebnisse des HyICE-Projektes anknüpfen können. Die dort entwickelten numerischen Berechnungsmodelle für die Verbrennung von Wasserstoff mit Luft wurden in ANSYS CFX integriert und können für die Verbrennung mit Sauerstoff angepasst werden. Die Simulationen sollen sich vor allem auf die Gemischbildung und Verbrennung in den Takten 1 und 2 konzentrieren.

¹ HyICE – Optimization of Hydrogen Powered Internal Combustion Engines

² H₂BVplus – hocheffizientes, sauberes Brennverfahren für H₂-Dieselmotoren

³ HyFLEET:CUTE – Clean Urban Transport for Europe

Anhand der CFD-Simulationen sollen kostengünstig und ohne hohen anlagentechnischen Aufwand konkrete Konstruktionsparameter bestimmt werden, um eine mögliche Prototypenphase des Motorkonzepts vorzubereiten.

4.1 Arbeitsprogramm

Erstellung eines thermodynamischen Motormodells. In einem ersten Schritt wurde unter der Annahme eines perfekten Motors ein thermodynamisches Modell des Gesamtprozesses in MATLAB erstellt, welches die Zustandsänderungen des als Idealgas mit temperaturabhängiger Wärmekapazität angenommenen Gasgemischs abbildet. Abbildung 4 zeigt die simulierten Zustandsänderungen in einem p-v-Diagramm für ein typisches Kompressionsverhältnis von 9 und einen verbleibenden Inertgasanteil im Zylinder von 60%. Mithilfe dieses Modells können die Parameter Inertgasanteil, Hub- und Kompressionsvolumen so angepasst werden, dass der theoretische Wirkungsgrad des Gesamtprozesses maximal wird.

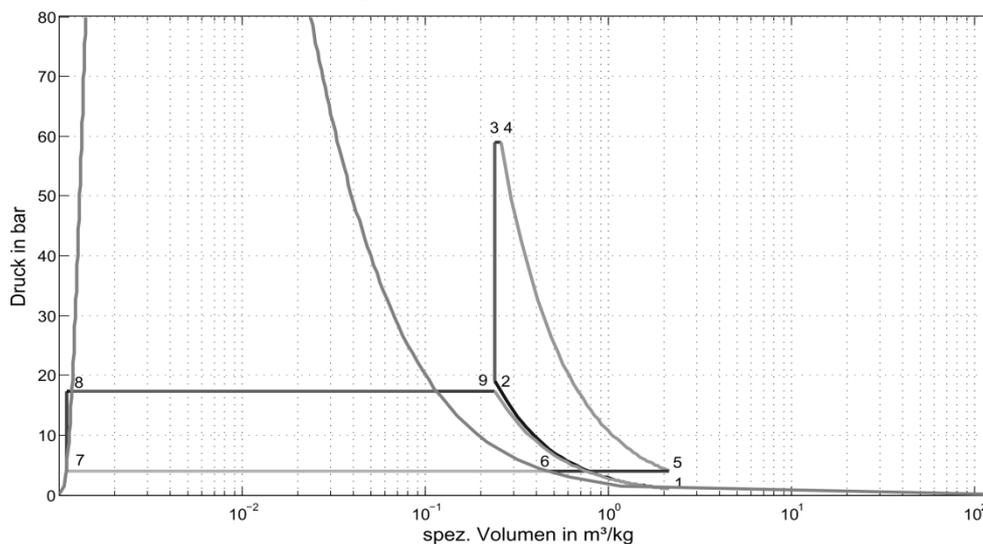


Abbildung 4: Thermodynamische Simulation der Zustandsänderungen der Verbrennungsgase während des Gesamtprozesses

Eindimensionale Strömungssimulation mit GTPower. Zur Bestimmung von Randbedingungen für spätere dreidimensionale Strömungssimulationen soll die Verbrennung zunächst mithilfe der kommerziellen eindimensionalen Simulationssoftware GTPower abgebildet werden. Hierbei soll der Antriebsstrang eines realen Ottomotors mit den zuvor bestimmten Größen für Hub- und Kompressionsvolumen simuliert werden. Die Simulationen müssen in Abstimmung mit dem Hersteller an den Betrieb mit Wasserstoff angepasst werden.

Erstellung eines CFD-Modells mit ANSYS CFX und Validierung anhand von Messdaten zu Gemischbildung und Verbrennung. Die Vielzahl an Annahmen bezüglich der Teilmodelle einer CFD-Verbrennungssimulation sollen durch Berechnung von dokumentierten Testfällen der Arbeiten des HyICE-Projekts mithilfe der Strömungssimulationssoftware ANSYS CFX validiert werden. Abbildung 5 zeigt beispielhaft links das in [11] verwendete numerische Gitter und rechts einen Vergleich von Simulationsergebnissen der Wasserstoffkonzentration für verschiedene Turbulenzmodelle mit experimentellen Messdaten. Das Zylindervolumen soll auf einem Gitter diskretisiert werden, welches mit dem Softwaretool PistonGrid während der Simulation an das veränderte Zylindervolumen angepasst wird. Das CFD-Modell soll anhand der Messdaten zur innermotorischen Verbrennung mit Luft soweit angepasst werden, dass die Simulationsergebnisse

möglichst gut mit den laserspektroskopischen Messergebnissen zu Temperaturen und Speziesmassenverteilungen übereinstimmen.

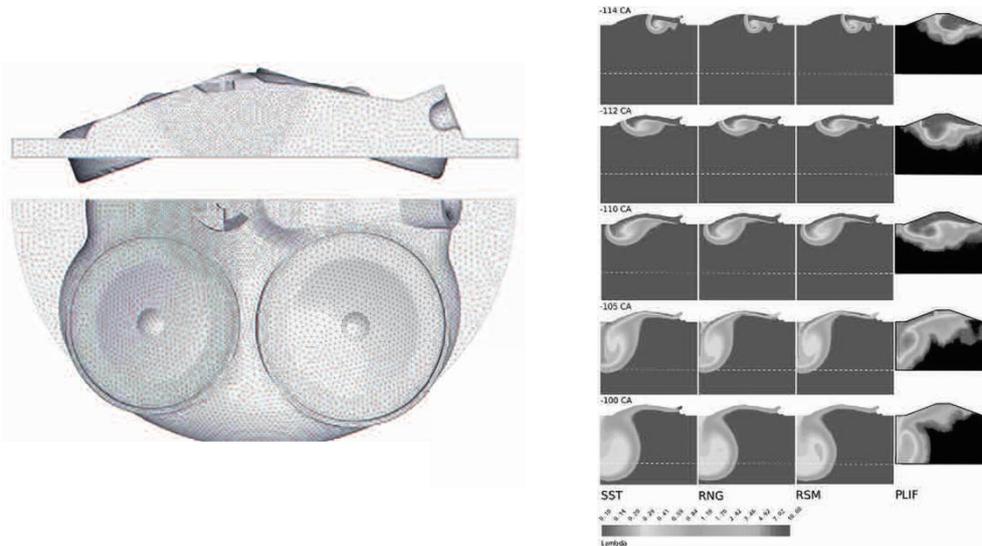


Abbildung 5: Gitter des Zylindervolumens im oberen Totpunkt (links) und Vergleich verschiedener Turbulenzmodelle mit Messdaten (rechts) [11]

CFD-Simulation der Gemischbildung und Verbrennung im Motor auf einem bewegten Gitter.

Im Anschluss an die Modellanpassung anhand von Messdaten kann die Gemischbildung von Wasserstoff und Sauerstoff für verschiedene Düsengeometrien und Eindüsstrategien untersucht werden. Der anschließende Verbrennungstakt wird unter Verwendung eines globalen Reaktionsmechanismus berechnet und die abgegebene mechanische Arbeit ermittelt. Aus der Berechnung von Kompressions- und Arbeitstakt lässt sich ein Wirkungsgrad des Motors angeben.

Variation der Eindüszeitpunkt, Zündzeitpunkt, Steuerzeiten und Düsengeometrien. Aus einer Analyse der Simulationsergebnisse lassen sich Optimierungsansätze im Bezug auf die Zeitpunkte der Ventilöffnungen, der Einbringung von Wasserstoff und Sauerstoff und der Zündung untersuchen. Zur Optimierung der Gemischbildung sollen verschiedene Düsengeometrien mit unterschiedlicher Lochanzahl und Düsenposition untersucht werden.

5. Zusammenfassung

In Anlehnung an bisherige Untersuchungen zur innermotorischen Verbrennung von Wasserstoff mit Luft, soll in dem beschriebenen Projektvorhaben die Gemischbildung und Verbrennung von Wasserstoff mit Sauerstoff mithilfe von Strömungssimulationssoftware abgebildet werden. Probleme durch zu hohe Temperaturen bei dieser Verbrennung sollen durch die Beimischung von Wasserdampf und einen kombinierten Verbrennungs- und Dampfprozess behoben werden. Im Fokus des Projekt soll die 3D-CFD-Simulation von Kompressions- und Arbeitstakt in einem 1-Zylinder-Modell mithilfe der Strömungssimulationssoftware ANSYS CFX liegen. Die zahlreichen Modellannahmen der turbulenten Strömung sollen anhand von dokumentierten Messdaten zur innerzylindrischen Verbrennung von Wasserstoff und Luft validiert werden. Ziel des Projekts ist der Nachweis der Wirksamkeit des Prozesses und die Ableitung von konstruktiven und steuerungstechnischen Vorgaben für einen emissionsfreien H_2 - O_2 -Stationärmotor.

Literatur

- [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 der Leitstudie im Auftrag des Bundesministeriums für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, 2012
- [2] M. Sterner et al.: „Energiewirtschaftliche und ökologische Bewertung eines Windgas-Angebotes“, Fraunhofer-Institut für Windenergie und Energiesystemtechnik (IWES), 2011
- [3] R. De Maeyer: „HySTAT™ On Site Hydrogen“, Präsentation der Elektrolyse-Produkte der Firma Hydrogenics, 2010
- [4] A. León: „Hydrogen Technology: Mobile and Portable Applications“, Springer, 2008
- [5] H. Wendt: „Brennstoffzellen“, *BWK- Das Energie Fachmagazin*, Band 60, 2008
- [6] H. Wendt: „Stationäre Brennstoffzellen“, *BWK- Das Energie Fachmagazin*, Band 58, 2006
- [7] Internetauftritt der Europäischen Kommission,
http://ec.europa.eu/research/transport/projects/items/_hyice____optimising_hydrogen_powered_engines_en.htm, letzter Zugriff am 18.09.2013
- [8] Pressemitteilung der Technischen Universität Graz zum H₂BVplus-Projekt,
www.presse.tugraz.at/pressemitteilungen/2009/12.03.2009.htm, Letzter Zugriff am 18.09.2013
- [9] Internetauftritt des Projektes HyFLEET:CUTE, www.global-hydrogen-bus-platform.com, Letzter Zugriff am 18.09.2013
- [10] S. Ellgas: „Simulation of a hydrogen internal combustion engine with cryogenic mixture formation“, Culliver Verlag, 2008
- [11] U. Gerke: „Numerical analysis of mixture formation and combustion in a hydrogen direct-injection internal combustion engine“, Culliver Verlag, 2007
- [12] C. Poruba: „Turbulente Flammausbreitung in Wasserstoff-Luft-Gemischen“, Dissertation, TU München, 2003
- [13] K. Kovak: „Optimierung der Gemischbildung an einem DI-Wasserstoffmotor“, Dissertation, TU Graz, 2005
- [14] T. Wallner: „Entwicklung von Brennverfahrenskonzepten für einen PKW-Motor mit Wasserstoffbetrieb“, Dissertation, TU Graz, 2004
- [15] S.Verhelst: “A Study of the Combustion in Hydrogen-Fuelled Internal Combustion Engines”, Dissertation, Ghent University, 2005