



Abschlussbericht zum Verbundvorhaben

AmmoniakMotor

Entwicklung von Simulationswerkzeugen für zukünftige maritime Ammoniak-Verbrennungsmotoren

Vorhaben: Erstellung eines prädiktiven und effizienten Reaktionsmodells für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen und Ammoniak.

Förderkennzeichen: 03SX549B

Projektträger: Projektträger Jülich

Laufzeit des Vorhabens: 01.06.2021 – 31.12.2023

Berichtszeitraum: 01.06.2021 – 31.12.2023

Zuwendungsempfänger: LOGE Deutschland GmbH

Autor: Dr.-Ing. Lars Seidel

Lars.Seidel@logesoft.com

Gefördert vom Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages.

Die Verantwortung für den Inhalt dieser Veröffentlichung liegt beim Autor.



Inhaltsverzeichnis

1.	Kurze Darstellung	3
1.1	Aufgabenstellung.....	3
1.2	Voraussetzungen unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde	4
1.3	Planung und Ablauf des Vorhabens.....	4
1.4	Wissenschaftlicher und technischer Stand an den angeknüpft wurde	7
1.5	Zusammenarbeit mit anderen Stellen	7
2.	Eingehende Darstellung	9
2.1	Verwendung der Zuwendung und des erzielten Ergebnisses im Einzelnen	9
2.2	Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises.....	37
2.3	Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit	37
2.4	Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplan	38
2.5	Während der Durchführung des Vorhabens dem ZE bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen	38
2.6	Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse nach Nr. 11	39
3.	Literaturverzeichnis.....	40

1. Kurze Darstellung

1.1 Aufgabenstellung

Das geplante Verbundprojekt soll einen Beitrag für die zukünftige emissionsfreie Schifffahrt mit großen Antriebsleistungen über lange Distanzen leisten. Ein Power-to-X Kraftstoff der Zukunft wird Ammoniak sein. Das Konsortium aus zwei KMUs und einer Universität will grundlegendes Wissen zur motorischen Verbrennung von Ammoniak gemeinsam erarbeiten. Ziel war es, mit dem gewonnenen Know-how an der Entwicklung und dem Einsatz maritimer Motoren in den nächsten Jahrzehnten mitzuwirken. Zum damaligen Zeitpunkt lagen sehr wenige Kenntnisse und Erfahrungen zur innermotorischen Verbrennung von Ammoniak vor. Die Partner sahen es zum Zeitpunkt der Antragsstellung als sehr wichtig an, neue Simulationswerkzeuge zu entwickeln, die für die Auslegung von ammoniakbetriebenen Verbrennungsmotoren erforderlich sind. In dem Forschungsprojekt sollten durch eine enge Verzahnung von Verbrennungssimulation und motortechnischer Erprobung ein besonders schneller Wissenszuwachs erreicht werden. Im Ergebnis des Forschungsvorhabens sollten die beteiligten Projektpartner wichtige Beratungs- und Dienstleistungen in der maritimen Industrie und darüber hinaus anbieten können. Dies zielt auf Motorenentwickler, Motorenzulieferer sowie Werften und Schiffseigner ab. Der Einsatz von Ammoniak als Kraftstoff wird sowohl im Neubau als auch im Retrofit völlig neu bewertet und bearbeitet werden müssen. Der Wunsch nach dem schnellen Aufbau der dafür notwendigen Kompetenzen vereint die Projektpartner, denn die weltweiten Entwicklungen auf diesem Gebiet nehmen / nahmen rasant zu. Für den Erhalt Ihrer zukünftigen Wettbewerbsfähigkeit wollten die beteiligten Unternehmen einen Wissensvorsprung auf diesem speziellen Gebiet erzielen. Mit diesem Wissen können die beteiligten Unternehmen den Transformationsprozess der maritimen Wirtschaft hin zu einem emissionsfreien Transport auf den Weltmeeren positiv beeinflussen.

Der Beitrag der LOGE Deutschland GmbH kann wie folgt zusammengefasst werden:

- Entwicklung einer detaillierten Ammoniak-Kohlenwasserstoff-Reaktionskinetik und Reduktion der Reaktionskinetik.
- Erweiterung des tabulierten Chemie Ansatz für Ammoniak / Kohlenwasserstoff Gemische.
- Trainieren des Turbulenzmodells des stochastischen Motormodell gegen Messungen im reinen Dieselbetrieb.
- Optimierung des reduzierten Mechanismus unter gleichzeitiger Berücksichtigung thermodynamisch kontrollierter Experimente (Zündverzug, Flammgeschwindigkeit, Emissionsbildung) und der Motorexperimente mit vorgemischtem Ammoniak. Ziel der Optimierung ist es die einzelnen Reaktionsraten innerhalb ihrer bekannten oder geschätzten Unsicherheit so zu optimieren das der Fehler über alle Experimente so klein wie möglich wird.



- Implementierung des stochastischen Verbrennungsmodell in der Software GT-Power um alle den Prüfstand abbilden zu können. Dieses Modell wurde der FVTR zur Verfügung gestellt.

1.2 Voraussetzungen unter denen das Vorhaben durchgeführt wurde

Das Forschungsprojekt AmmoniakMotor wurde vom 01.06.2021 bis 31.12.2023 vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie gefördert. Wobei es sich bei dem letzten halben Jahr um eine kostenneutrale Verlängerung handelte.

Das Vorhaben wurde von den Partnern LOGE Deutschland GmbH, FVTR GmbH und dem Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen der Universität Rockstock (LKV) durchgeführt. Um eine enge Zusammenarbeit zu gewährleisten, fanden alle 2 Wochen Online Konferenzen statt, es gab Projekttreffen und der Projektfortschritt wurde in halbjährlichen Zwischenberichten dokumentiert.

Die Leitung des Verbundprojektes wurde von Dr. Martin Theile von der FVTR GmbH übernommen. Die Leitung des Teilprojektes bei der LOGE Deutschland GmbH von Dr. Lars Seidel.

1.3 Planung und Ablauf des Vorhabens

Die ursprüngliche Planung der verschiedenen Arbeitspakete ist der Abbildung 1 zu entnehmen. Während des Ablaufs des Projektes kam es zu einer kostenneutralen Verlängerung. Diese war notwendig da es durch die Coronakrise zu Verzögerungen beim Projektpartner LKV kam und Messungen erst verspätet durchgeführt werden konnten. Dadurch wurden vor allen die AP 5.3 und 5.4 etwas später als geplant bearbeitet.

Zu Beginn des Projektes wurden Referenzdatensätze für Experimente, Stoffdaten und Modelle für Ammoniak geschaffen (AP 1.1). Diese wurden in den weiteren Arbeitsschritten (AP 2.2, 5.2, 5.4) für die Entwicklung und Reduktionen der Kohlenwasserstoff / Ammoniakchemie sowie der Motormodellierung genutzt.

Um die komplexe Zusammensetzung von Dieselmotorkraftstoff abbilden zu können wurde basierend auf Kraftstoffdaten für Diesel mit dem Partner LKV ein 3 Komponentensurrogat entwickelt (AP 2.1).

Anschließend wurde die Reaktionschemie für die Kohlenwasserstoffe (zur Beschreibung der Verbrennung des Dieselmotorkraftstoffs) mit einer Ammoniakchemie kombiniert (AP 2.2). Die Implementierung von Ammoniak in den tabulierten Chemieansatz (AP 2.3) ermöglichte dann die weiteren Untersuchungen und Entwicklungen.



Um kurze Rechenzeiten für Motorberechnungen bzw. die Zeit für die Tabulierung der Reaktionschemie zu verkürzen wurde der Reaktionsmechanismus reduziert (AP 5.2). Gleichzeitig wurde das stochastische Reaktormodell für vorgemischtes Ammoniak mit Zündung durch Dieseleinspritzung in GT-Power als externes Zylindermodul implementiert (AP 5.3). Dazu wurde ein GT-Power Modell für den Versuchsmotor und die thermodynamischen Randbedingungen durch die FVTR zur Verfügung gestellt.

Die am Prüfstand des LKV gewonnenen Messwerte für verschiedene Betriebspunkte und Ammoniaksstitutionsraten wurden genutzt um die numerischen Modelle (Randbedingungen der Motorsimulation sowie Reaktionskinetik) im Rahmen der bekannten Unsicherheit zu optimieren, um eine bessere Vorhersage der Verbrennung und Emissionen zu erreichen.

Damit stand zum Ende des Projektes ein Modell des Versuchsmotors für die Vorhersage der Verbrennung von vorgemischtem Ammoniak, das durch Direkteinspritzung von Diesel gezündet wird, zur Verfügung.

AP	Bezeichnung	beteiligte Partner		Projektjahr 1												Projektjahr 2											
		Personenmonate	FVTR LKV LOGE	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12	M13	M14	M15	M16	M17	M18	M19	M20	M21	M22	M23	M24
				06/21	07/21	08/21	09/21	10/21	11/21	12/21	01/22	02/22	03/22	04/22	05/22	06/22	07/22	08/22	09/22	10/22	11/22	12/22	01/23	02/23	03/23	04/23	05/23
1	Überprüfung und Abgleich der Einzelanforderungen		1,00																								
1.1	Bildung von Referenzdatensätzen/-modellen bzgl. Ammoniakbrennverfahren																										
1.2	Konkretisierung, Sicherheitskonzept, Lieferung & Handhabung Ammoniak																										
2	Entwicklung von Ammoniak Chemie-Reaktionskinetiken		0,50																								
2.1	Design eines Diesel Referenzkraftstoff (Daten von LKV)																										
2.2	Kombination von Ammoniak- und Kohlenwasserstoffkinetiken, Validierung und Optimierung		0,50	1,00	1,00	1,00	0,75																				
2.3	Implementierung von Ammoniakchemie für tabulierten Chemie-Ansatz		4,00																								
3	Aufbau von Simulationsmodellen für den NH₃ Forschungsmotor																										
3.1	Anpassung Druckverlaufsanalyse-Tool auf Ammoniak																										
3.2	Abbildung des Versuchsträgers als 0D/1D Modell																										
3.3	Erstellung einer detaillierten Versuchsplanung																										
4	Konzeption, Aufbau, Inbetriebnahme des Versuchsmotorprüfstands und erste Messkampagne																										
4.1	Konzeption & Aufbau einer Ammoniak-Sicherheitstechnik, NH ₃ -Kraftstofflager																										
4.2	Aufbau einer Ammoniakversorgung im Prüfstand																										
4.3	Adaption des Versuchsträger hinsichtlich Ammoniakdosierung																										
4.4	Anpassung des Motorsteuergerätes																										
4.5	Anpassung der Abgasmesstechnik																										
4.6	Durchführung erster Messkampagnen und Überwachung Betriebsstoffe																										
5	Abgleich von numerischen und experimentellen Ergebnissen																										
5.1	Thermodynamische Bewertung von experimentellen Daten																										
5.2	Reduktion des Reaktionsmechanismus		2,50																								
5.3	Implementierung Mechanismus / Tabulierte Chemie in GT Power via SRM		2,50																								
5.4	Optimierung der numerischen Modelle gegen Motorexperimente		4,25																								
5.5	Durchführung weiterer Messkampagnen																										
6	Nutzung der evaluierten numerischen Werkzeuge für erste Untersuchungen an Großmotoren																										
6.1	Analyse Ammoniakbrennverfahren bei Variation motorischer Randbedingungen		1,00																								
6.2	Ausarbeitung von Handlungsempfehlungen bzgl. Entwicklung von Ammoniakbrennverfahren		1,00																								
7	Koordination, Zusammenfassung & Systematisierung der Ergebnisse																										
7.1	Projektkoordination, Kommunikation, Organisation/Durchführung von Projekttreffen		1,00																								
7.2	Durchführung eines projektbegleitenden Ammoniak-Workshops		1,00																								
7.3	Dokumentation der Ergebnisse, Veröffentlichungen		1,00																								
7.4	Systematisierung der exp. Erkenntnisse, Übertragbarkeit auf größere Motoren																										
7.5	Befragung des Versuchsleiters																										
	Gesamtsumme Personaleinsatz	0	0	24	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00		

Abbildung 1: Arbeitsplan der LOGE Deutschland GmbH

1.4 Wissenschaftlicher und technischer Stand an den angeknüpft wurde

Zum Zeitpunkt der Antragstellung Ende 2020 ließ sich der aktuelle Stand der Wissenschaft wie folgt zusammenfassen:

- Die Ammoniakoxidation (in Luft) war grundsätzlich verstanden.
- Es gab erste gute Modelle für die Oxidation von reinem NH_3 aber gerade in den Bereichen der motorisch relevanten hohen Drücke gab es noch große Unsicherheiten durch fehlende Experimente.
- Es gab kaum Publikationen die detaillierte Reaktionsmodelle für die Simulation der innermotorischen Verbrennung von Ammoniak nutzten. Dieselkraftstoff wurde, wenn überhaupt, nur sehr vereinfacht durch n-Heptan abgebildet.
- Interaktion von NH_3 mit Kohlenwasserstoffen ist nur in wenigen Experimenten untersucht worden. Gezielte Untersuchungen hinsichtlich der Interaktion von NH_3 mit realem Diesel oder typischen Ersatzkraftstoffen (n-Heptane, n-Dodekan, größere Aromaten) fehlten völlig. Erste numerische Untersuchungen wiesen auf eine mögliche Interaktion bei der Selbstzündung im mittleren Temperaturbereich (800 bis 1000K) hin.
- Hinsichtlich der Emissionsbildung gab es noch große Unsicherheiten.

1.4.1 Angabe bekannter Konstruktion, Verfahren und Schutzrechte die für die Durchführung des Vorhabens benutzt wurden

Für die Durchführung des Vorhabens wurde vor allem auf eigene Software der Firma LOGE sowie öffentlich zugängliche wissenschaftliche Publikationen zurückgegriffen.

1.4.2 Angabe der verwendeten Fachliteratur sowie der benutzten Informations- und Dokumentationsdienste

Während der Durchführung des Projektes wurde auf eine Vielzahl von publizierter Fachliteratur / Publikationen zurückgegriffen. Auf dedizierte Informationsdienste oder Dokumentationsdienste wurde nicht zurückgegriffen. Für die Suche selbst wurden einschlägige Suchmaschinen verwendet.

In die Entwicklung sind die Publikationen eingegangen die am Ende dieses Berichtes aufgelistet sind sowie solche die in den Veröffentlichungen aufgelistet sind die im Rahmen des Forschungsprojektes entstanden sind (siehe Kapitel 2.6).

1.5 Zusammenarbeit mit anderen Stellen

Das Vorhaben wurde als Verbundprojekt durchgeführt. Die einzelnen Partner haben ihre Forschung und Entwicklung eigenständig durchgeführt. Zwischen den



Schwerpunkthemen der einzelnen Partner gab es viele Schnittstellen an denen Daten und Knowhow ausgetauscht wurde.

Der Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen der Universität Rostock nahm einen Motorenprüfstand für Ammoniak / Diesel Gemische in Betrieb und lieferte wertvolle Messdaten für einen weiten Bereich von Betriebspunkten.

Die FVTR GmbH leistete einen wichtigen Beitrag für die Untersuchung bestehender Verbrennungsmodelle, der detaillierten Analyse der thermodynamischen Randbedingungen sowie das zur Verfügung stellen eines Modells für den Motorprüfstand in der kommerziellen Software GT-Power. Darüber hinaus wurde das von der LOGE entwickelte Verbrennungsmodell ausgiebig getestet.

Die LOGE nutzte zum einen in der wissenschaftlichen Literatur publizierte Modelle, eigene Modell sowie die vom LKV und der FVTR zur Verfügung gestellten Daten für die Entwicklung eines Verbrennungsmodell basierend auf detaillierter Chemie. Das Modell wurde weiterhin reduziert und in den Ansatz für tabulierte Chemie überführt.

2. Eingehende Darstellung

2.1 Verwendung der Zuwendung und des erzielten Ergebnisses im Einzelnen

AP 1.1 Bildung von Referenzdatensätzen/-modellen bzgl. Ammoniakbrennverfahren

In diesem Arbeitspaket wurde die interne Datenbank um Daten aus Standardexperimenten für Diesel, Dieselreferenzkraftstoffe sowie Ammoniak erweitert. Diese Experimente wurden in den folgenden Arbeitspaketen für die Validierung und Entwicklung der Modelle genutzt.

Weiterhin wurde analysiert mit welchem grundsätzlichen Brennverfahren in einem Retrofitkontext zu rechnen ist. Grundsätzlich sind die folgenden Brennverfahren denkbar: 1.) Das vorgemischte Ammoniak verbrennt durch Selbstzündung – diese ist das typische Diesel Brennverfahren. 2.) Das Dieselmisch entzündet sich und ausgehend von diesem gezündeten Bereich bildet sich eine Flammenfontäne, die dann das (vorgemischte) Ammoniak verbrennt. Dieses Brennverfahren ist auch unter der Bezeichnung „Dieselverbrennung auf homogenem Grundgemisch“ für große Schiffmotoren, die mit Diesel / Erdgas Gemischen betrieben werden, bekannt.

Um eine Abschätzung treffen zu können wurde mit einem publizierten Mechanismus [1] eine numerische Studie durchgeführt. Diese Studie wurde durch die für das Projekt angeschaffte Rechen-technik ermöglicht. Dazu wurde eine kommerzielle CFD Software genutzt und ein einfacher Beispielfall für einen Dieselmotor berechnet. Der Dieselmotorkraftstoff wurde durch n-Heptan dargestellt und Teile der Dieselmotormenge durch vorgemischtes Ammoniak ersetzt. Darüber hinaus wurde untersucht, wie sich die Einspritzzeiten auf Emissionen (NO, NO₂, N₂O, H₂, CO, CO₂ usw.) und auf Ammoniakumsatz und -schlupf auswirken. Da in dem gewählten Modell eine sehr detaillierte Stickstoffchemie vorhanden ist, konnten dem Projektpartner LKV Abschätzungen der zu erwartenden Konzentrationen im Abgas zur Verfügung gestellt werden. Damit hatte das LKV einen ersten Anhaltspunkt für die Auslegung der Messtechnik. Abbildung 2 zeigt exemplarisch den modellierten Einfluss des Einspritzbeginns auf die NO Emissionen. In diesem Fall wurden 36% des Heizwertes des n-Heptans durch Ammoniak substituiert.

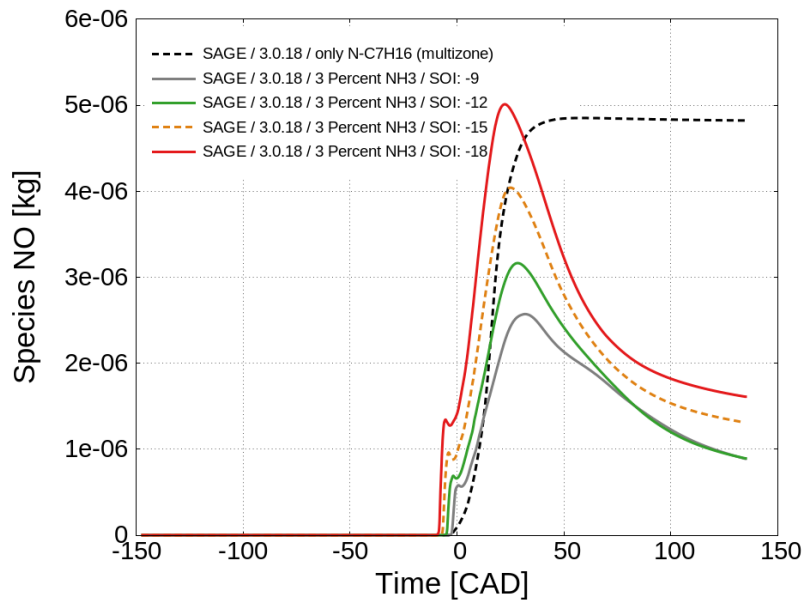


Abbildung 2: Modellstudie zum Einfluss der Einspritzzeiten auf die NO Bildung

In dieser kleinen Modellstudie hat sich gezeigt, dass ein typisches Dieselmotorenverfahren auch mit hohen NH_3 Substitutionsraten möglich ist. Vorausgesetzt der eingesetzte Dieselmotorenkraftstoff kann sich ausreichend gut im Brennraum ausbreiten. In der Vorstudie zeigte sich das Ammoniakslupf und Lachgasemissionen eine Herausforderung darstellen können.

Im Dezember 2021 wurde eine wissenschaftliche Studie veröffentlicht [1] in der die Substitution von Diesel durch Ammoniak Experimentell und numerisch untersucht wurde. Obwohl in dieser Studie [1] ein sehr einfaches Verbrennungsmodell [2], [3] und eine sehr einfache Kinetik genutzt wurden und es sich um andere Motordimensionen handelt wurden ähnliche Trends wie in der eigenen simulativen Untersuchungen aufgezeigt.

Eine abschließende Aussage darüber mit welchem Brennverfahren zu rechnen sei konnte in diesem AP nicht getroffen werden.

AP 2 Entwicklung von Ammoniak-Chemie-Reaktionskinetiken

AP 2.1 Design eines Diesel Referenzkraftstoffes (Daten von LKV)

In Absprache mit dem Partner LKV war davon auszugehen das alle Experimente mit einem EN 590 Diesel durchgeführt werden. Weiterhin kann davon ausgegangen werden das in der Binnenschifffahrt Diesel nach der Norm EN 590 eingesetzt werden wird. Da es nicht möglich ist die vielen hundert Komponenten in einem Reaktionsmechanismus abzubilden, wurde ein 3 Komponenten Ersatzkraftstoff für die Dieselkomponente formuliert. Die Komponenten sind 1-Methylnaphtalene, n-Dekane, Methyldecanoat. Dabei bildet das 1-Methylnaphtalene den Aromatenanteil, und damit auch deren Rußneigung ab; das n-Dekane bildet die n-Alkane ab und das Methyldecanoat den Anteil an Biodiesel. Der Vorteil dieser 3 Komponenten ist, dass es ausreichend Experimente gibt, um eine Gasphasenchemie zu entwickeln und zu validieren.

In der nachfolgenden Tabelle sind die typischen Kraftstoffkennzahlen für EN 590 Diesel und für den im Verlauf des Projektes genutzten Referenzkraftstoff dargestellt. Dieser wurde so gewählt das der FAME Anteil und die berechnete Cetanzahl genau getroffen werden: Gemisch (in v/v flüssig) wie folgt: 6.7% Methyldecanoat, 17.2% 1-Methylnaphthalene, 76.1% n-Dekan. Das 3-Komponenten Ersatzgemisch bildet den unteren Heizwert, die Cetanzahl, den FAME Anteil sowie das Verhältnis von C / H / O Atomen in Massenprozent sehr gut ab.

Kriterium	Kommerzieller EN 590	Referenzkraftstoff
Dichte bei 20°C [kg/m ³]	835,7	786,1
Unterer Heizwert [MJ/kg]	42,71	42,53
Unterer Heizwert [MJ/l]	38,08	33,5
Mittleres Molekulargewicht [g/Mol]	192	140
C/H/O Verhältnis (atomar)	13,7/22,3/0,09	10,26/19,32/0,12
Massen% C / H / O	85,94 / 13,33 / 0,74	85,35 / 13,37 / 1,28
Cetanzahl	52,9	52,9
FAME % (v/v)	6,7	6,7

AP 2.2 Kombination von Ammoniak- und Kohlenwasserstoffkinetiken, Validierung und Optimierung

Kombination der Reaktionskinetiken

Es wurden verschiedene publizierte Ammoniak Reaktionskinetiken (aus der Arbeitsgruppe von Peter Glaborg [4] und darauffolgende Arbeiten der Arbeitsgruppe um Peter Glaborg; Stagni et al. [5], Shrestha et al. [6] und darauffolgende Arbeiten sowie Otomo et al. [2]) untersucht und gegen Experimente verglichen. Dabei wurde

eine Vielzahl von unterschiedlichen Experimenten berücksichtigt, um das Modell zu finden das am besten geeignet ist verschiedene Kenngrößen wie Flammgeschwindigkeit, Zündverzugszeiten sowie die Emissionsbildung vorherzusagen. Es wurde sich für das Modell von Shrestha et al. [6] entschieden. Das Modell für die Kohlenwasserstoffe (n-Dekan, Methyldecanoate, 1-Methylnaphtalene) wurde aus den Modellen aus ([7], [8]) adaptiert. Dabei bildet das Methyldecanoate den Biodieselanteil ab und der Aromatenanteil kann über das 1-Methylnaphtalene abgebildet werden. Das kombinierte Reaktionsmodell hat eine Größe von 1334 Spezies und 14213 Reaktionen.

Validierung

Das Modell wurde gegen Zündverzugszeitexperimente (Experimente im Stoßwellenrohr und in Rapid Compression Machine (RCM)) und Speziesbildung und -verbrauch (vorgemischte Flammen und Rührreaktoren) für die einzelnen Komponenten (Ammoniak, n-Dekan, Methyldecanoat und 1-Methylnaphtalene verglichen). Dabei wurden Abweichungen festgestellt. Für die Dieselkomponenten n-Dekan und 1-Methyldecanoat wurde eine signifikante Abweichung gegen gemessene Zündverzugszeiten festgestellt. Auch für Ammoniak wurden Abweichungen festgestellt.

Optimierung der Reaktionsraten für einzelne Komponenten

Für die Komponenten n-Dekan und 1-Methyldecanoate wurden die Reaktionsraten in einem mehrstufigen Prozess optimiert: Erst wurden die Bereiche (Temperatur / Druck / Brennstoff-Luft Verhältnis) mit der größten Abweichung zwischen Modell und Experiment analysiert. Für diese wurde eine Sensitivitätsanalyse erstellt, um die empfindlichsten Reaktionen zu finden. Für diese wurde dann die Reaktionsraten nach dem neusten Stand der Wissenschaft angepasst. Anschließend wurden die Reaktionsraten innerhalb ihrer bekannten Ungenauigkeit optimiert, um eine möglichst gute Übereinstimmung mit den Experimenten zu erreichen. Ein Vergleich zwischen den vorhergesagten Zündverzugszeiten für n-Dekan mit dem optimierten Modell und Experimenten findet sich in Abbildung 3.

Die Reaktionsraten für die Ammoniakchemie wurden optimiert. Um die Unsicherheit der Reaktionsraten abzuschätzen, wurde auf verschiedene Quellen zurückgegriffen: Zum einen die im Modell von Shrestha et al. [6] dokumentierten Unsicherheiten für einzelne Reaktionen, auf darauffolgende Publikationen von Shrestha et al. [9] [10] und auf Reaktionsraten anderer Autoren ([2], [5], [11]). Darüber hinaus konnten einzelne Reaktionen mit Herrn Shrestha diskutiert werden. Das Ziel der Optimierung war es einen Satz von Reaktionsraten zu finden der über einen weiten Bereich von Experimenten eine gute Vorhersage leistet und sich nicht nur auf ausgewählte Experimente zu konzentriert. Es wurden über 170 experimentelle Datensätze berücksichtigt. Durch diesen Ansatz wurde erreicht das das Ammoniak Modell für einen möglichst großen Bereich von Randbedingungen gute und robuste Vorhersagen liefert und damit den in der motorischen Verbrennung großen Bereich in Druck, Temperatur und Gemische abdeckt.

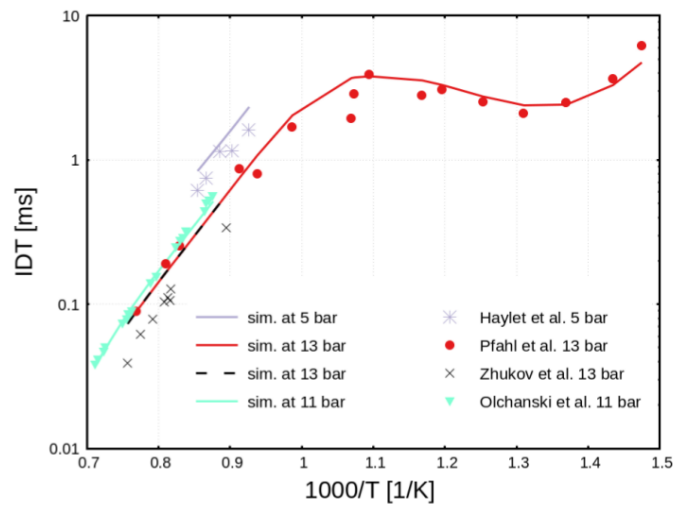


Abbildung 3: Zündverzugszeiten von stöchiometrischen n-Dekan / Luft Gemischen. Linie Modellvorhersage nach Optimierung; Punkte Messungen von [12], [13], [14]

Exemplarisch ist ein Vergleich zwischen dem optimierten Reaktionsmechanismus und Experimenten in Abbildungen 3 (Zündverzugszeiten von n-Dekan), 4 (Bildungen von Emissionen in einer Vormischflamme) und 5 (Zündverzugszeiten von Ammoniak) gezeigt. Ein besonderes Augenmerk wurde hier auch auf Experimente in Rapid Compression Machines (RCM) gelegt da der einzige Datensatz für Diesel / Ammoniak Gemische zum damaligen Zeitpunkt nur aus solchen Versuchen stammte (siehe auch Kapitel 5.4). Weiterhin wurde das Modell gegen die RCM-Experimente von He et al. [15] für Ammoniak/Sauerstoff/Helium Gemische verglichen und es konnte gezeigt werden das die gemessenen Zündverzugszeiten innerhalb einer Unsicherheit von +/- 5K und +/-5000Pa in den Anfangsbedingungen vorhergesagt werden können. Dieser Unsicherheitsbereich ist kleiner als die Abschätzung der Anfangsbedingungen, die man für die motorische Verbrennung erreichen wird und nach Diskussionen mit anderen Experimentalisten auch für Rapid Compression Machines realistisch.

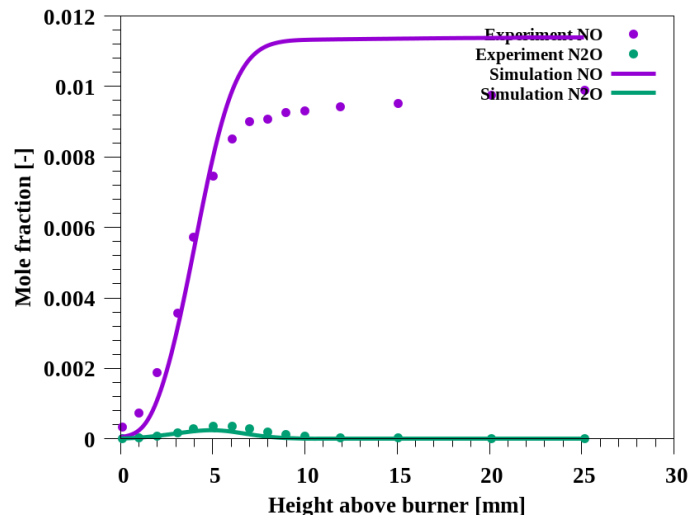


Abbildung 4: Vergleich von modellierten (optimiertes Modell) NO und N2O Emissionen mit Messungen von Bian et al. [16] für eine brennerstabilisierte Ammoniak / Sauerstoff Flamme.

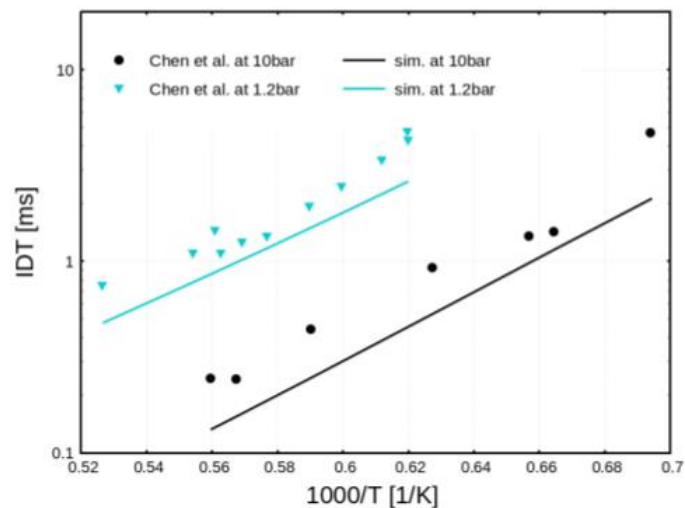


Abbildung 5: Vergleich von modellierten (optimiertes Modell) Zündverzugszeiten mit Experimenten von Chen et al. [17] für stöchiometrische Ammoniak / Luft Gemische

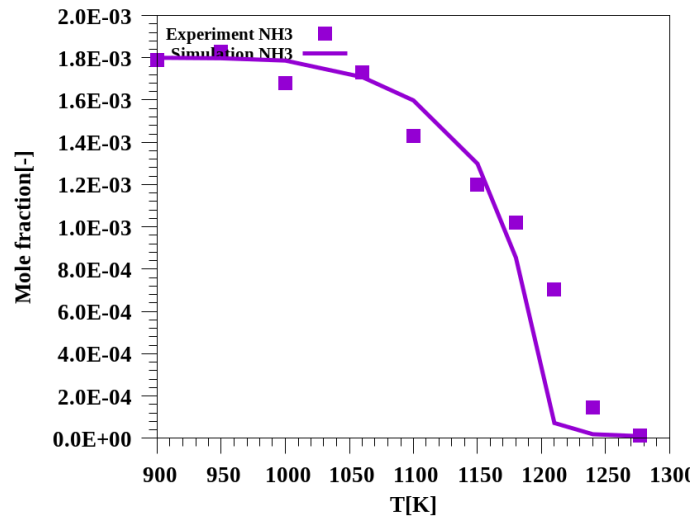


Abbildung 6: Vergleich des modellierten (optimiertes Modell) Ammoniakumsatzes mit Experimenten von Zhang et al. [18]) für ein mageres Gemisch in einen Rührreaktor.

Optimierung für Gemische

Die Modellvorhersage wurde gegen gemessene Zündverzugszeiten von n-Decane / 1-Methylnaphthalene Gemischen verglichen. Diese beiden Kraftstoffe stellen die beiden Hauptkomponenten des Dieseleratzkraftstoff (siehe AP 1.1) dar. Wie in der Abbildung 7 für ein Gemisch mit 30 vol% 1-Methylnaphthalene dargestellt wurde eine gute Übereinstimmung mit den Messungen von Wang et al. [19] erreicht.

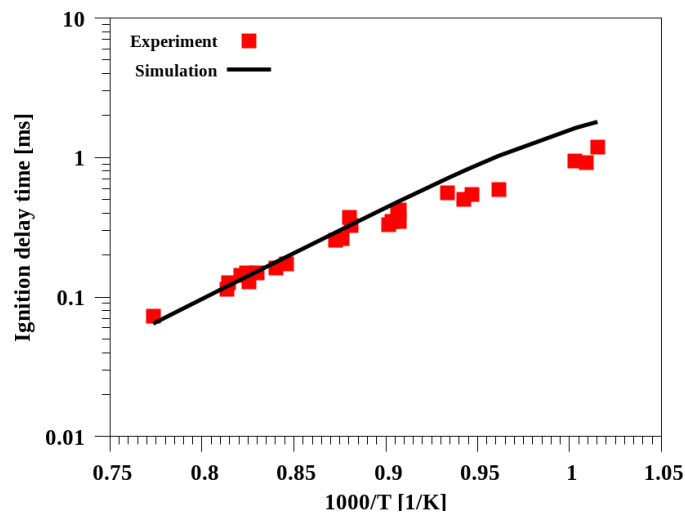


Abbildung 7: Vergleich der modellierten (überarbeitetes Modell) und gemessenen [19] Zündverzugszeiten von Wang et al. für ein 2 Komponenten Dieselreferenzgemisch

Zu diesem Zeitpunkt waren keine Experimente für Gemische aus den Deseleinkomponenten und Ammoniak publiziert. Ende 2020 wurden von Feng et al. Zündverzugszeiten für Gemische aus kommerziellem chinesischem Diesel und Ammoniak publiziert [20]. Diese wurden in einer Rapid Compression Machine gemessen. Trotz einer Optimierung sagte das kombinierte Modell eine zu hohe Reaktivität vorher (siehe Abbildung 8). Es war nicht klar, ob die Abweichung an den großen Unsicherheiten der Anfangsbedingungen, einer dato nicht bekannten Interaktion zwischen Kohlenwasserstoffen und Ammoniak oder einer vereinfachten Beschreibung des Diesels lag. Eine Übertragung der in [10] vorgeschlagenen Kreuzreaktionen auf das Dieselmodell führt zu keiner Verbesserung der vorhergesagten Zündverzugszeit. Die Abweichung wurde untersucht und diese Experimente werden in dem späteren Arbeitspaket 5.4 "Optimierung der numerischen Modelle gegen Motorexperimente" mitberücksichtigt. Wie die Autoren (Feng et al.) in ihrer Arbeit [20] aufzeigten konnten die Messdaten durch keine publizierte Reaktionskinetik beschrieben werden (Stand Juli 2020).

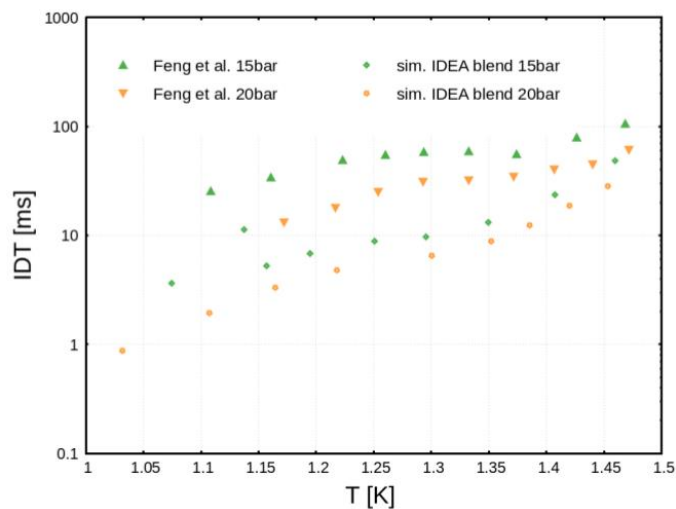


Abbildung 8: Vergleich der modellierten und gemessenen Zündverzugszeiten [20] in einer RCM für ein mageres Ammoniak / Diesel / Luft Gemisch

Diskussion über Abgasanalytik

Um die Auslegung der Messtechnik bei LKV zu unterstützen wurde die Höhe der zu erwartenden Abgasemissionen Hauptemissionen (CO_2 , CO , H_2 , NO , NO_2 , N_2O , ...) sowie Zwischenprodukte der Ammoniakchemie durch die in AP 1 erwähnten Simulationen mit dem überarbeiteten Modell abgeschätzt. Darüber hinaus wurden einige Simulationen in dem stochastischen Motormodell von LOGE für einen anderen Motor durchgeführt. Diese Simulationen beruhten auf älteren Messungen für einen Schiffsmotor im Dieselbetrieb die vom LKV bereitgestellt wurden und in denen simulativ ein Teil der Energie im Diesel durch Ammoniak substituiert wurde.

Zusammenfassung: Das Arbeitspaket wurde erfolgreich abgeschlossen. Das entwickelte Ammoniakuntermodell geht über den aktuellen Stand der Wissenschaft hinaus und kann die wichtigsten Kenngrößen bei der Ammoniakverbrennung und die Emissionsbildung (NO, N₂O, H₂, H₂O) in Standardexperimenten abbilden. Ein Modell für einen Dieselreferenzkraftstoff wurde entwickelt und optimiert. Dabei kann die Zusammensetzung des Dieselkraftstoffs frei gewählt werden. Es bestanden Diskrepanzen zwischen Modellvorhersage und den zu diesem Zeitpunkt einzigen (veröffentlichten) Messungen für Zündverzugszeiten von Ammoniak / Diesel Gemischen.

AP 2.3 Implementierung von Ammoniakchemie für tabulierten Chemie-Ansatz

Bei der Implementierung der Ammoniakchemie für den tabulierten Chemie-Ansatz müssen 2 Dinge unterschieden werden: zum einen das Erstellen der Tabelle selbst, zum anderen die Vorhersage von Verbrennung und Emissionsbildung bei der Nutzung der Tabelle.

Anpassung der Reaktionschemie um das Erstellen der Tabellen zu optimieren

Mit der ersten Version des (optimierten) detaillierten Mechanismus waren die Rechenzeiten beim Erstellen so hoch, das es nicht möglich war in überschaubarer Zeit alle Berechnungen zum Erstellen einer Tabelle durchzuführen. Dies lag daran das der numerische Löser sehr kleine Zeitschritte durchführen musste. Dieses Problem trat vor allem bei Gemischen von Diesel und Ammoniak auf und dort vor allem in den Bereichen, die für die Expansionsphase im Motor nach der Verbrennung wichtig sind. In diesem Bereich wurden Reaktionsraten im Modell beobachtet die unphysikalisch schnell waren. Dieses Problem ist darauf zurückzuführen das Reaktionsraten / Reaktionsmechanismen fast immer für den Bereich einer Verbrennung in Standardreaktoren formuliert werden (Temperatur über 800K) und somit die Bedingungen in der Expansionsphase gar nicht berücksichtigt werden. Darüber hinaus wurde eine Interaktion der Ammoniakchemie und Kohlenwasserstoffchemie in der publizierten Literatur bisher fast gar nicht untersucht. Kreuzreaktionen sind bisher nur wenig erforscht und es bestehen noch immer Unsicherheiten über die Reaktionsraten in Hinblick auf die Konkurrenz um wichtige Radikale (siehe auch Diskussion in AP 5.4).

Der Reaktionsmechanismus wurde mit den Werkzeugen LOGEresearch und LOGEtable nach dem folgenden Ablaufschema überarbeitet:

- 1.) Erstellen einer Tabelle in LOGEtable
- 2.) Identifizieren der Parameterkombinationen (Druck, Temperatur, Brennstoff / Luft Verhältnis, AGR Rate, Diesel / NH₃ Verhältnis) in denen die Rechenzeiten sehr lang sind
- 3.) Identifikation der Reaktionen / Spezies die zu kleine Zeitschritte erzwingen
- 4.) Modifikation der Reaktionen innerhalb der bekannten Unsicherheit bzw. umformulieren der Reaktionsraten

Dieser Prozess wurde oft wiederholt und es wurden ca. 100 Reaktionen modifiziert bis keine unphysikalisch schnellen Reaktionsraten mehr auftraten und die Rechenzeiten ausreichend waren, um Tabellen in überschaubaren Zeiten zu erstellen. Dieser aufwendige Arbeitsprozess wurde durch die für das Projekt angeschaffte Rechentechnik ermöglicht. Das Erstellen einer 2 Komponententabelle (Diesel / NH₃) dauert auf den angeschafften 32 Kern Workstation ca. eine Woche und ermöglicht anschließend deutlich kürzere Rechenzeiten für die Modellierung der innermotorischen Verbrennung mit tabulierter Chemie wie im Folgenden dargestellt wird.

Vergleich Vorhersage der Verbrennung mit tabulierter Chemie und direkter Lösung der Chemie

Der Vergleich der vorhergesagten Verbrennung und Emissionsbildung durch die direkte Lösung des (optimierten) detaillierten Mechanismus und der tabulierten Chemie wurden in dem stochastischen Motormodell von LOGE durchgeführt. Dazu wurde der Dieselmotor des LKV mit komplett homogenen Gemischen von 100% Diesel bis 80% Ammoniak (Kraftstoffmasse) simuliert. Dies entspricht nicht dem entwickeltem Brennverfahren und wurde zu diesem Zeitpunkt nur für die Entwicklung genutzt da noch keine Messungen vorlagen. Mit der tabulierten Chemie dauerte die Berechnung eines Zyklus ca. 1,8s auf einem CPU Kern, die direkte numerische Lösung dauert hingegen ~49min auf 24 Kernen. Es ergibt sich daraus also eine Reduktion der nötigen Rechenleistung von Faktor ~39 000 (40min x 60s/min x 24 / 1,8s). Der Nutzen der tabulierten Chemie liegt damit auf der Hand.

Ursprünglich gab es größere Abweichungen zwischen der tabulierten Chemie und der direkten Lösung der Chemie (nicht dargestellt). Der zugrundeliegende Code wurde überarbeitet. Nach der Überarbeitung war die Vorhersage des Zündzeitpunkts mit dem tabulierten Chemie-Ansatz für vorgemischte Diesel / Ammoniak Gemische nah an der direkten Lösung wie in der Abbildung 9 zu sehen.

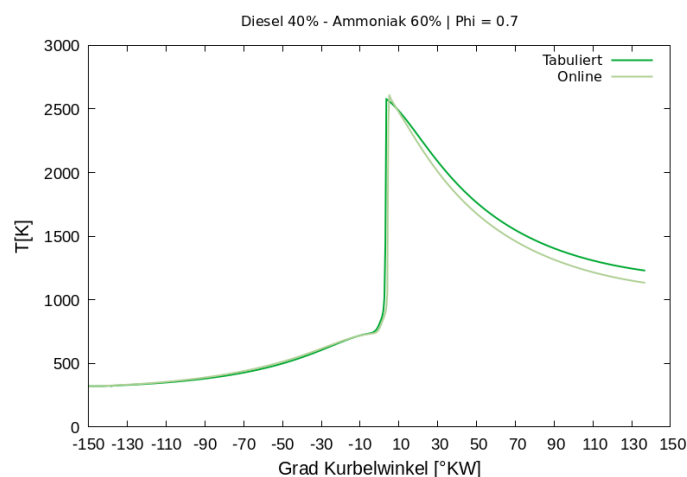


Abbildung 9: Vergleich der modellierten Temperatur im Zylinder mit direkter Lösung der Chemie und tabulierter Chemie im Stochastischen Motormodell von LOGE. Der Kraftstoff (80 %m Ammoniak / 20 m% Diesel) ist homogen vorgemischt.

Im weiteren Verlauf des AP standen erste Messungen für den Dieselbetrieb des Versuchsmotors des Partners LKV zur Verfügung. Wie beispielhaft hier für einen Betriebspunkt dargestellt, wurden diese für die Entwicklung genutzt. Das stochastische Motormodell wurde auf die Vorhersage der Dieselbetriebspunkte hin trainiert. Anschließend wurden (rein numerisch) 40% der Dieselenergie durch Ammoniak ersetzt. Das Ammoniak wurde – wie in einem Retrofit Kontext zu erwarten – mit der Einlassluft gemischt und wird durch den eingespritzten Diesel gezündet.

In der Abbildung 10 ist die mit Hilfe tabulierter Chemie modellierte Druckkurve des reinen Dieselbetriebs in rot dargestellt. Die blaue und violette Druckkurve wird von dem Modell vorhergesagt, wenn 40% des Diesel durch Ammoniak ersetzt werden. Wie zu erwarten ist die Verbrennung nicht ideal da keinerlei Optimierung der Steuerzeiten für die Dieseleinspritzung stattfand. Dadurch wurde eine unvollständige Verbrennung vorhergesagt. Das Hauptaugenmerk soll aber hier auf dem Vergleich von direkter (violett) und tabulierter (blau) Chemielösung liegen. Für die tabulierte Chemie liegt die vorhergesagte Verbrennung nah an der detaillierten Lösung.

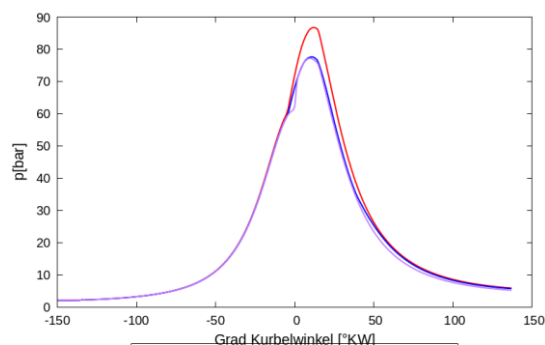
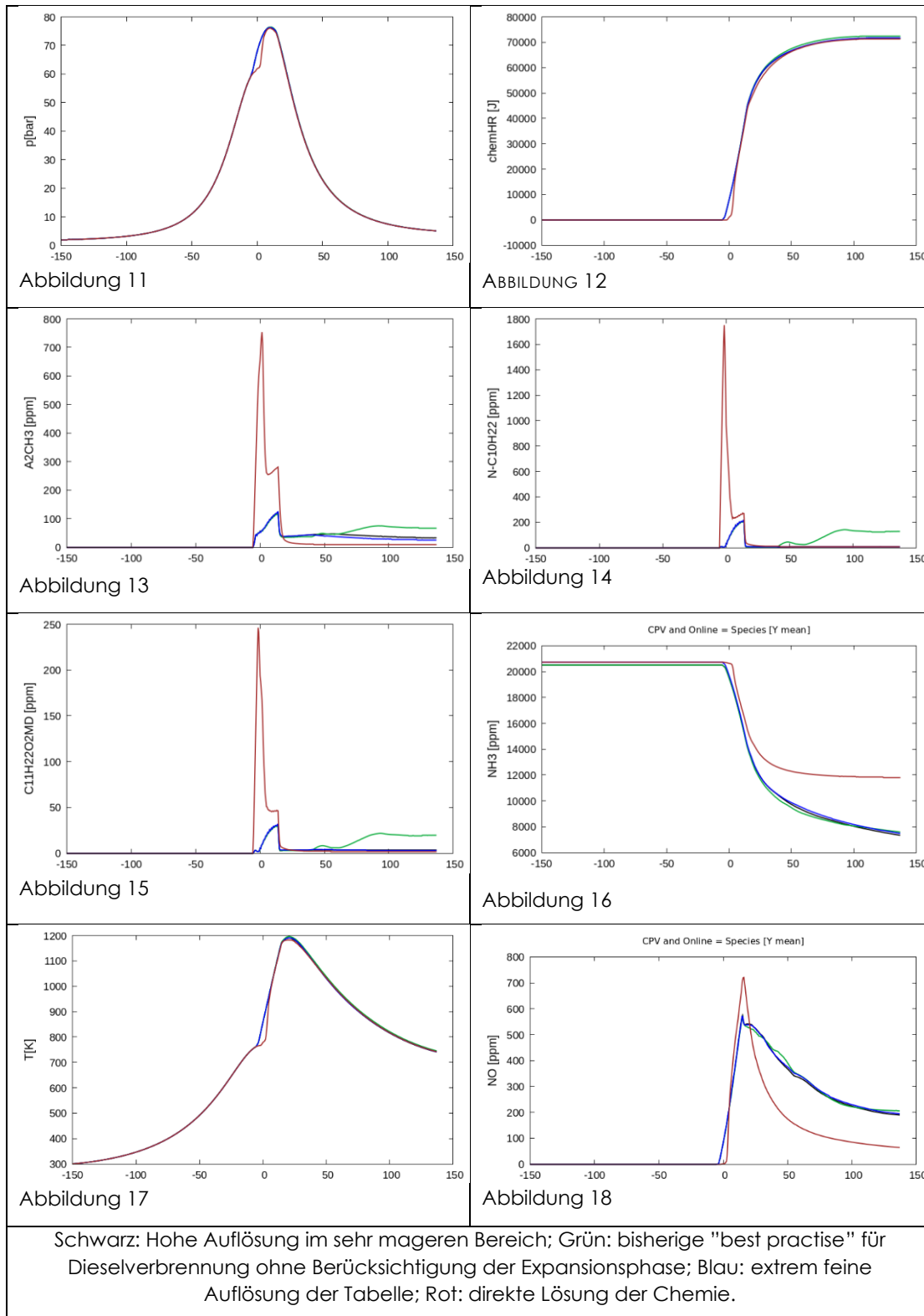


Abbildung 10: Vergleich der tabulierten Chemie mit der direkten Lösung für einen beliebigen Motorfall. Rot: vorhergesagte tabulierte Chemie für reinen Dieselbetrieb. Blau: 40% des Diesels wurden durch vorgemischtes Ammoniak ersetzt (tabulierte Lösung). Violett: Direkte Lösung der Chemie

Neben der Verbesserung der Tabulierung für Diesel / Ammoniak Gemische an sich wurde auch der Einfluss der Tabellenauflösung untersucht. Dies ist in den folgenden Abbildungen für den Fall aus Abbildung 10 dargestellt. Für die Druckspur (Abbildung 11) und die freigesetzte Wärme (Abbildung 12) geben die unterschiedlichen Tabellen sehr ähnliche Ergebnisse. Im Vergleich zur direkten Lösung der Chemie zeigt sich eine etwas frühere Zündung die aber schnell wieder aufholt und dann der direkten Lösung folgt (rote Linie). Auch für die Spitzentemperatur und die Endtemperatur (Abbildung 17) ergibt sich eine gute Übereinstimmung zwischen direkter Lösung und tabulierter Chemie (siehe z.B. Diskussionen in [21]). Die deutlich höhere Peakkonzentration der Dieselkomponenten (Abbildung 13, 14, 15) ist in Einklang mit den Limitierungen im Modellansatz (siehe z.B. Diskussionen in [21]). Für 1-Methylnaphalene (Abbildung 13) zeigt sich ein geringer Umsatz für alle Tabellenauflösungen. Generell zeigt sich das die



Tabelle mit einer feineren Auflösung auf der mageren Seite deutlich bessere Ergebnisse erreicht. Dies liegt wahrscheinlich an dem (lokal) sehr mageren Gemisch (Ammoniak und Diesel zusammen haben ein Lambda von ~ 3) für den Beispielfall. Der Umsatz des Ammoniaks (Abbildung 16) wird durch die tabulierte Chemie deutlich überschätzt und die NO Emissionen werden um den Faktor 2 überschätzt (Abbildung 17), wobei die Trends abgebildet werden. Die Vorhersage der NO Emissionen konnte innerhalb des Projektes nicht wesentlich verbessert werden. Aktuell wird nur die Bildung von NO aus Kohlenwasserstoffen berücksichtigt. Es hatte sich gezeigt dass die Herleitung, Implementierung und Validierung der nötigen Quellterme, insbesondere für Ammoniak als Kraftstoff, mehrer Monate in Anspruch nehmen würde und innerhalb des Projektes nicht zu leisten ist. Eine Veröffentlichung eines Ansatzes zur Tabulierung / Beschreibung von Quelltermen von NO Emission bei der Ammoniakverbrennung existiert bisher nicht. Für NO_2 und N_2O Bildung existiert auch keine Herleitung bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen.



Zusammenfassung:

Der Ansatz für die tabulierte Chemie wurde für Ammoniak erweitert. Nach der Erweiterung konnte die Verbrennung von Ammoniak / Diesel Gemischen im Vergleich zur direkten Lösung der Chemie hinreichend genau abgebildet werden. Der Ungenauigkeit des tabulierten Chemie Ansatz für Ammoniak / Diesel Gemische steht ein Gewinn in Rechenzeit von Faktor 39 000 für die detaillierte Chemie entgegen (bezogen auf die Rechenzeit auf einem CPU-Kern). Somit ist ein zweistufiger Ansatz bei der Simulation sinnvoll. Im ersten Schritt sollte mit Hilfe der tabulierten Chemie vor allem die eigentliche Verbrennung berechnet werden. In einem 2ten Schritt kann mit Hilfe einer einmaligen Berechnung mit der detaillierten Chemie Lösung die genaue Höhe der Emissionen (NO, N₂O, NO₂, ...) bestimmt werden. Eine Verbesserung der tabulierten Chemie für Stickstoffemissionen ist nur durch größeren Aufwand möglich. Um die Rechenzeit zu reduzieren kann hier auf den hier auf den in AP 5.2 entwickelten reduzierten Mechanismus zurückgegriffen werden.

AP 5.2 Reduktion des Reaktionsmechanismus

Die Reduktion eines Reaktionsmechanismus für einen Ammoniak / Diesel Dual-Fuel Betrieb unterschied sich stark von den bisher typischen Anwendungsfällen der LOGE Deutschland GmbH. Der Hauptunterschied lag darin das in einem Großteil der Anwendungsfälle eben nicht in einen anderen Vorgemischten Kraftstoff eingespritzt wird. Daher wurde der in [22] beschriebene Ansatz für Dual Fuel Kraftstoffe erweitert. Dennoch blieb das Problem, das eine Analyse zur Trennung von unwichtigen und wichtigen Reaktionen (Necessity Analysis) nur in homogenen 0D Reaktoren durchgeführt werden kann. In diesen ist eine Abbildung des motorischen Prozesses – Ammoniak wird durch Diesel Einspritzung gezündet – nicht möglich. Aus diesem Grund wurde die Reduktion in vielen kleinen Schritten durchgeführt und jeder Reduktionsschritt wurde gegen verschiedene Betriebspunkte in dem stochastischen Motormodell verglichen die mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus modelliert wurden. Dabei wurden Reduktionsschritte verworfen, die eine größere Abweichung im Zündverhalten oder Emissionen verursachen. Eine Analyse des Reaktionsmechanismus, um unwichtige Reaktionen zu isolieren wurde in homogen konstanten Druck Reaktoren bei verschiedenen Kraftstoffgemischen, Temperaturen und Kraftstoff / Luftgemischen in LOGEresearch durchgeführt.

Der Reaktionsmechanismus wurde von 1334 Spezies und 14213 Reaktionen auf 472 Spezies und 7003 Reaktionen reduziert. Durch den Schritt des Horizontalen Lumpings wurden dabei 351 Spezies entfernt. Der Mechanismus ist auch in der Lage alle Kombinationen der Kraftstoffe abzubilden und kann zur Modellierung anderen Dieselmotoren genutzt werden.

Die Rechenzeit für 5 Arbeitszyklen in einem repräsentativen Fall (siehe Erklärungen zu AP 2.3) wurde von ~75 Minuten / Arbeitsspiel auf ~16 Minuten / Arbeitsspiel verringert.

Damit ist eine Modellierung (zur Auslegung) auf einer gängigen Workstation für einen Ingenieur gut machbar sollte die Chemie direkt gelöst werden müssen um die Emissionen zu bestimmen.

Gleichzeitig wurden verschiedene Zwischenschritte in der Reduktion hinsichtlich ihrer Eignung zur Tabellenerstellung getestet.

Zusammenfassung

Das Ziel des AP wurde erreicht. Es wurde ein reduzierter Mechanismus entwickelt der deutlich kürzere Rechenzeiten ermöglicht.

AP 5.3 Implementierung des Mechanismus / der Tabulierten Chemie in GT-Power

Im Laufe des Projektes wurden GT-Power Modelle für den Prüfstands Aufbau in verschiedenem Detailgrad von der FVTR zur Verfügung gestellt. In diesen wurde das Verbrennungsmodell DI-Pulse durch das stochastische Motormodell von LOGE ersetzt. Die Kopplung wurde erweitert um vorgemischtes Ammoniak aus dem Ansaugtrakt (Flüssig- und Gasphase) berücksichtigen zu können und um die Erweiterung aus AP 2.3 nutzen zu können. Ein Beispiel für das Prüfstandsmodell in GT-P ist in Abbildung 19 dargestellt. In diesem Modell können die Modellparameter für das LOGE Verbrennungsmodell angepasst werden. Dies sind vor allem Parameter für das Turbulenzmodell.

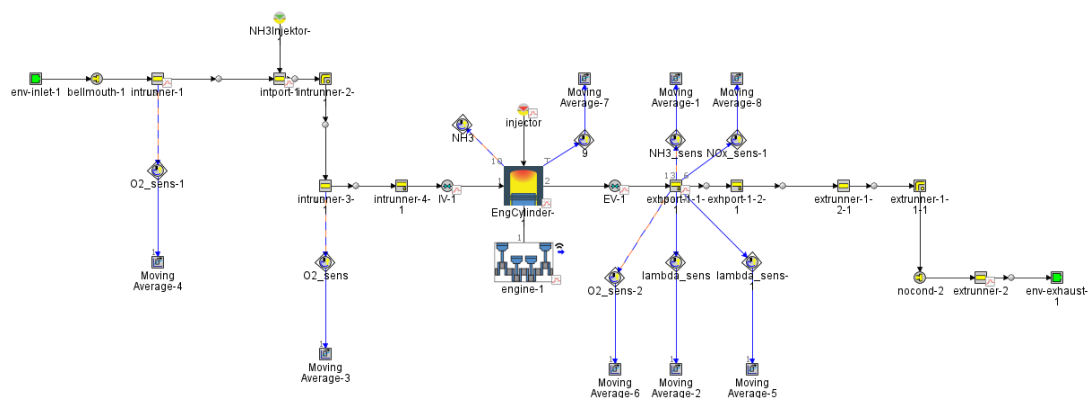


Abbildung 19: Das GT-Power Vollmotormodell

Die Kopplung wurde für einen repräsentativen Motorfall erstellt und der FVTR für GT-Power Version 2021 und 2023 zur Verfügung gestellt; jeweils in der Kopplung mit der direkten Lösung der Reaktionschemie sowie mit tabulierter Chemie. Die Abbildung 20 zeigt die Ausgabe von GT-Power für die Gastemperatur in der Kopplung mit dem stochastischen Reaktormodell. Im Laufe des Projektes wurde das gekoppelte Modell

mehrmals basierend auf Vorschlägen der FVTR und gewonnenen Erkenntnisse verbessert.

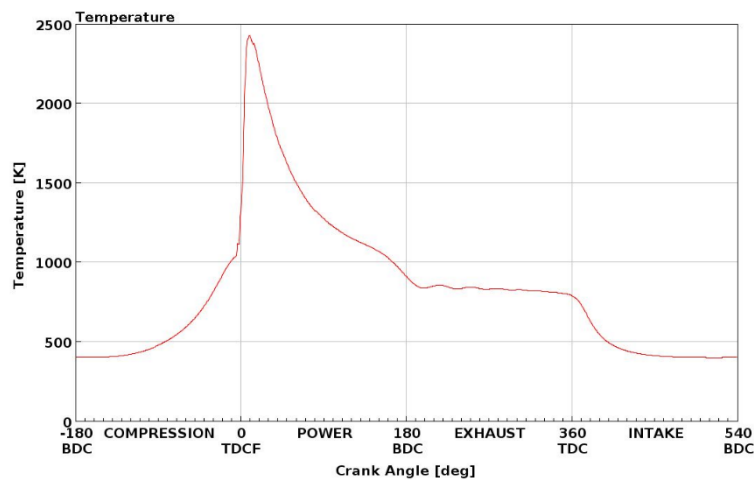


Abbildung 20: Temperaturverlauf in einer gekoppelten GT-Power Simulation

Zusammenfassung:

Eine Kopplung mit GT-Power wurde erfolgreich durchgeführt. Die Modelle wurden an die FVTR übergeben. Im weiteren Verlauf des Projektes wurden auch die überarbeiteten Modelle aus AP 5.4 in die Kopplung aufgenommen und der FVTR zur Verfügung gestellt.

AP 5.4 Optimierung der numerischen Modelle gegen Motorexperimente

Durch den Partner FVTR wurden die aufbereiteten Daten der Motormessungen inkl. der thermodynamischen Randbedingungen zur Verfügung gestellt. Diese wurden eingehend diskutiert und analysiert. Im Sinne eines Retrofitkontext, in dem nur der Brennverlauf des reinen Dieselbetriebs bekannt ist, sowie unter der Annahme das die Verbrennung der Kohlenwasserstoffe (Dieselkomponenten) bereits mit hinreichender Genauigkeit abgebildet werden kann, wurde für die Diskussion wie folgt vorgegangen:

1. Die Randbedingungen (Druck und Temperatur des Gases, Wandtemperaturen, ...) für das Arbeitsspiel im reinen Dieselbetrieb wurden durch eine thermodynamische Analyse / Druckverlaufsanalyse der FVTR bestimmt. Diese bilden die Randbedingungen für die Modellierung mit dem stochastischen Reaktormodell.
2. Die Parameter des stochastischen Reaktormodells wurden so eingestellt das die Turbulenz und somit der gemessenen Brennverlauf für reinen Dieselbetrieb im Motor gut abgebildet wurde. Für diese Optimierung wurde die tabulierte Chemie genutzt.

3. Die Betriebspunkte mit Ammoniakanteil wurden simuliert. Dabei konnte auf Messungen zurückgegriffen werden in denen zum Erreichen höherer Substitutionsraten nur eine Größe verändert wurde: Die Länge der Dieselhauptinspritzung. Dies ist in Abbildung 21 dargestellt. Die reduzierte Energie aus dem Dieselanteil wurde durch vorgemischtes Ammoniak ersetzt. Diese Motorexperimente stellen also Daten zur Verfügung in denen so wenig Variablen wie möglich geändert wurden, um den Einfluss verschiedener Ammoniakanteile auf die Verbrennung untersuchen zu können und damit die Reaktionschemie optimieren zu können.
4. Sensitivitätsstudien wurden hinsichtlich der folgenden Randbedingungen bzw. Modellparameter durchgeführt:
 - a. Temperatur des Luft / Ammoniak Gemisch zum Zeitpunkt des geschlossenen Einlassventils
 - b. Wandtemperatur
 - c. Ammoniak / Luftverhältnis
 - d. Erweiterungen des Reaktionsmechanismus für die Interaktion zwischen Ammoniak und Diesel.
 - e. Reaktionen die eine hohe Sensitivität auf die Zündverzugszeit für vorgemischte Diesel / Ammoniakgemische zeigen.

Dabei wurde festgestellt das die Sensitivitäten für Wandtemperatur innerhalb der zu erwartenden Messungenauigkeit liegt und eine untergeordnete Rolle spielen. Für das Brennstoff / Luftverhältnis und die Gastemperatur nach dem Schließen der Ventile konnte eine hohe Sensitivität ermittelt werden. Hier gab es anfänglich eine Unklarheit hinsichtlich der Messwerte. Durch die Simulation konnte gezeigt werden das ein Messgerät auf dem Prüfstand nicht ausreichend genau gemessen hat. Durch eine neue Kalibrierung konnten die Eingangsbedingungen deutlich genauer bestimmt werden.

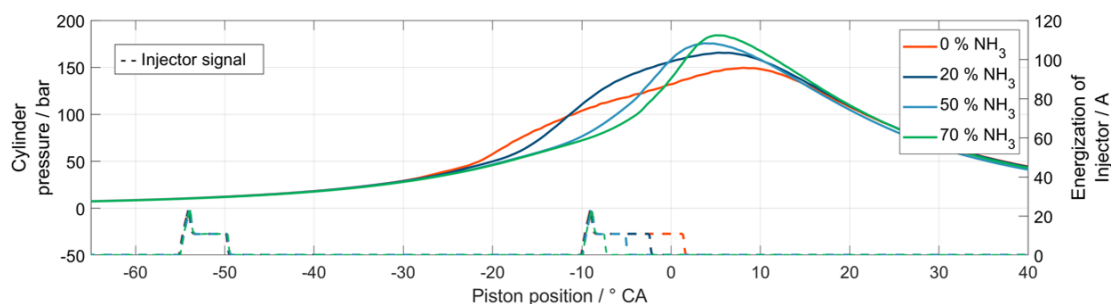


Abbildung 21: Druckverlauf und Steuerzeiten der Dieseleinspritzung

Die größte Sensitivität auf den vorhergesagten Brennverlauf für Betriebspunkte mit vorgemischtem Ammoniak konnte bei Änderungen im Reaktionsmechanismus beobachtet werden. Um die sensitivsten Reaktionen auf die Zündverzugszeit zu bestimmen, wurden Sensitivitätsanalysen auf das Integral der Temperatur für homogene Diesel / Ammoniak Gemische bei motorisch relevanten Bedingungen

durchgeführt. Dazu wurde das Werkzeug LOGEresearch und der entwickelte reduzierte Mechanismus genutzt. Eine Sensitivitätsanalyse durch Permutation der einzelnen Reaktionsraten in der Motorberechnung ist, durch den stochastischen Modellierungsansatz und die hohen Rechenzeiten bei direktem Lösen der Chemie, nicht möglich. Abbildung 22 zeigt exemplarisch das Ergebnis einer Sensitivitätsanalyse für ein Gemisch mit 70% Energieanteil im Ammoniak bei den Bedingungen die zum Zeitpunkt der Haupteinspritzung herrschen. Wie zu erkennen ist zeigen 5 Reaktionen aus der Ammoniakchemie die größten Sensitivitäten. Alle 5 Reaktionen verbrauchen oder erzeugen Radikale. In der folgenden Diskussion wird davon ausgegangen das die Reaktionsraten für n-Dekan + OH gut bekannt sind, um die Komplexität zu reduzieren.

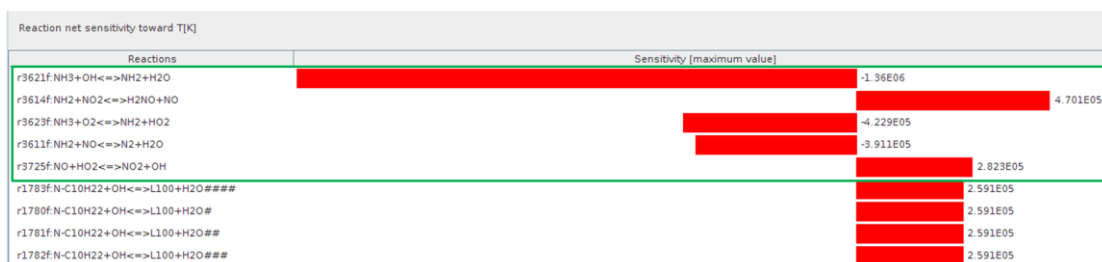


Abbildung 22: Ergebnis einer Sensitivitätsanalyse für ein homogenes Ammoniak / Diesel / Luft Gemisch bei 50bar und 800K.

Die Komplexität der Reaktionschemie von Ammoniak / Diesel Gemischen soll exemplarisch für die Variation des Ammoniakanteils für die in Abbildung 21 dargestellten Betriebspunkte diskutiert werden. Dabei wurden die folgenden Modifikationen durchgeführt:

- Reaktion: $\text{NH}_3 + \text{OH} = \text{NH}_2 + \text{H}_2\text{O}$ – Reaktionsrate wurde von der ursprünglichen Rate auf die vorgeschlagene Rate von Klaus et al. gesetzt.
- Reaktion: $\text{NH}_2 + \text{NO}_2 = \text{H}_2\text{NO} + \text{NO}$ – Verdopplung der Reaktionsrate, um Reaktivität zu erhöhen. Dies liegt im Rahmen der angegebenen Unsicherheit.
- Reaktion: $\text{NH}_3 + \text{O}_2 = \text{NH}_2 + \text{HO}_2$ - Halbierung der Reaktionsrate, um Reaktivität zu erhöhen. Dies liegt im Rahmen der angegebenen Unsicherheit.
- Reaktion: $\text{NH}_2 + \text{NO} = \text{N}_2 + \text{H}_2\text{O}$ - Halbierung der Reaktionsrate, um Reaktivität zu erhöhen. Dies liegt im Rahmen der angegebenen Unsicherheit.
- Reaktion: $\text{NO} + \text{HO}_2 = \text{NO}_2 + \text{OH}$ – Verdopplung der Reaktionsrate, um Reaktivität zu erhöhen. Dies liegt im Rahmen der angegebenen Unsicherheit.
- Zusätzliche Interaktionen zwischen Kohlenwasserstoffen, Kohlenwasserstoffradikalen und Peroxidverbindungen, die während der Oxidation von Kohlenwasserstoffen entstehen berücksichtigt. Hier wurde auf publizierte Reaktionsraten [10], [23], [24] für andere Kohlenwasserstoffe zurückgegriffen (nicht Diesel) und auf die Dieselkomponenten n-Dekan, Methyldecanoate und 1-Methylnaphthalene übertragen. Als Reaktanden aus

der Ammoniakchemie wurden dabei NH_2 , NO_2 , NO , NH , HNO und H_2NO berücksichtigt.

- Variation der Gastemperatur (Ammoniak / Luft Gemisch) im Zylinder nach schließen des Einlassventils.
- Untersuchungen, ob die Berücksichtigung von (vorgemischtem) Ammoniak als Stoßpartner in der Gasphasenchemie einen Einfluss hat. Dies liegt nahe da es sich um ein vergleichsweise effizienten Stoßpartner handelt und dieser in vergleichsweise großer Konzentration vorliegt. In publizierten Reaktionsmechanismen wurde Ammoniak bisher nicht als Stoßpartner berücksichtigt.

Die Änderungen haben keinen Einfluss auf die modellierte Verbrennung von reinem Diesel (Abbildung 23 und 24).

Dabei wurde beobachtet das für Substitutionsraten unter 50% Diesel Veränderungen in der NH_3 Chemie nicht besonders sensitiv auf den Brennverlauf sind. Für Substitutionsraten ab 50% können kleine Änderungen in der Reaktionschemie die Selbstzündung um bis zu 10 °KW verschieben wie in Abbildungen 25 und 26 für 70% Substitutionsrate zu sehen. Abbildung 27 zeigt das für Substitutionsraten von 50% und 60% eine geringere Sensitivität zu erkennen ist. Für diese Abbildungen wurden die Reaktionsraten um den angegebenen Faktor verändert.

Zusammenfassend lassen sich die Erkenntnisse über den Einfluss der Reaktionskinetik wie folgt festhalten:

- Die Änderungen der Reaktionsraten für die ausgewählten Reaktionen und die Berücksichtigung von zusätzliche Interaktionsreaktionen sind sehr sensitiv auf die vorhergesagte Selbstzündung.
- Die Berücksichtigung zusätzlicher Interaktionsreaktionen zwischen Kohlenwasserstoffen und Produkten der Ammoniakchemie beschleunigt die vorhergesagte Zündung extrem.
- Eine Veränderung der Gastemperatur zum Zeitpunkt Einlassventil schließt und +/- 10K hat einen sehr großen Einfluss auf die Selbstzündung und verschiebt diese um bis zu +/- 10 °KW für die dargestellten Fälle
- Die Berücksichtigung von Ammoniak als Stoßpartner hat keinen Einfluss auf die vorhergesagte Selbstzündung.

Die Berechnungen wurden durch die im Projekt angeschaffte Rechentechnik ermöglicht.

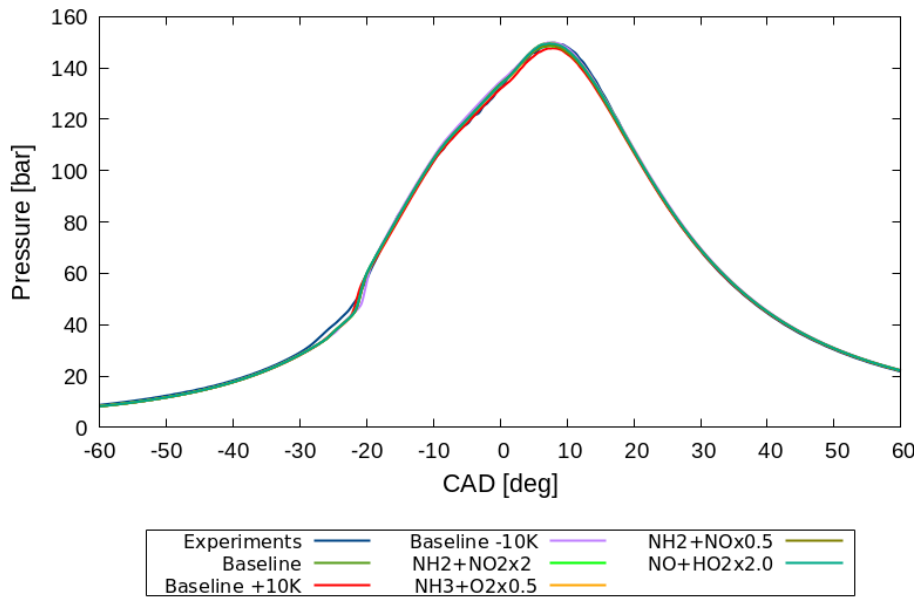


Abbildung 23: Einfluss verschiedener Reaktionen / Randbedingungen auf die modellierte Selbstzündung bei 0% Ammoniak

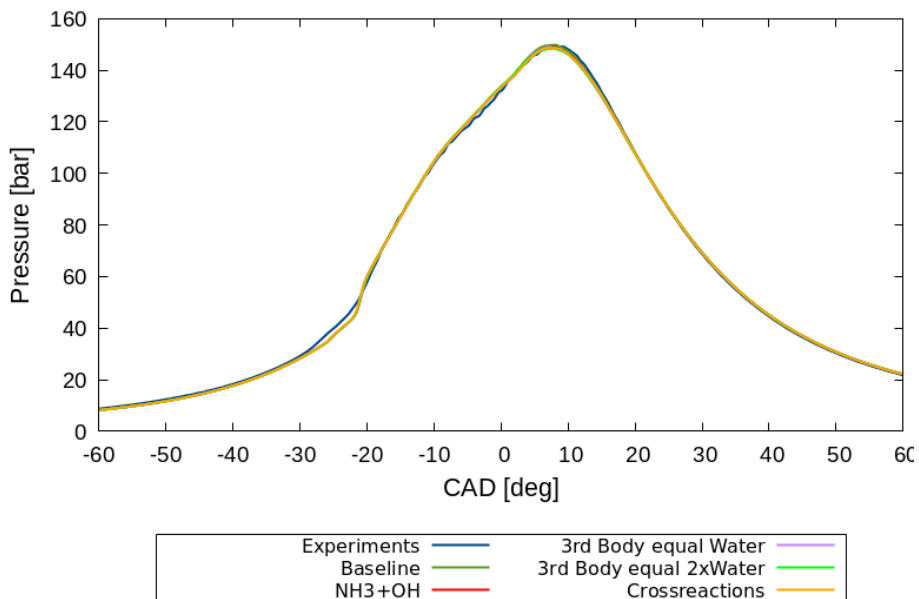


Abbildung 24: Einfluss verschiedener Reaktionen / Randbedingungen auf die modellierte Selbstzündung bei 0% Ammoniak

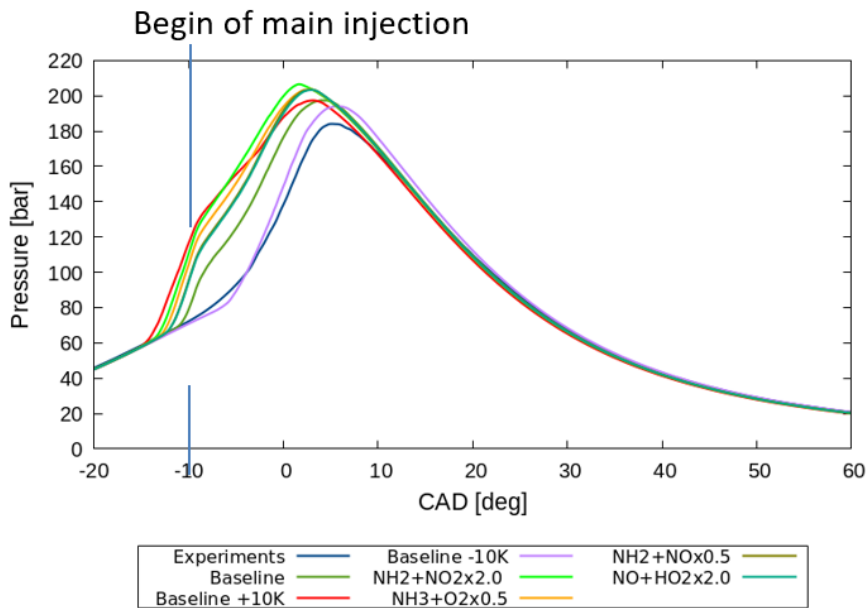


Abbildung 25: Einfluss verschiedener Reaktionen / Randbedingungen auf die modellierte Selbstzündung bei 70% Ammoniak

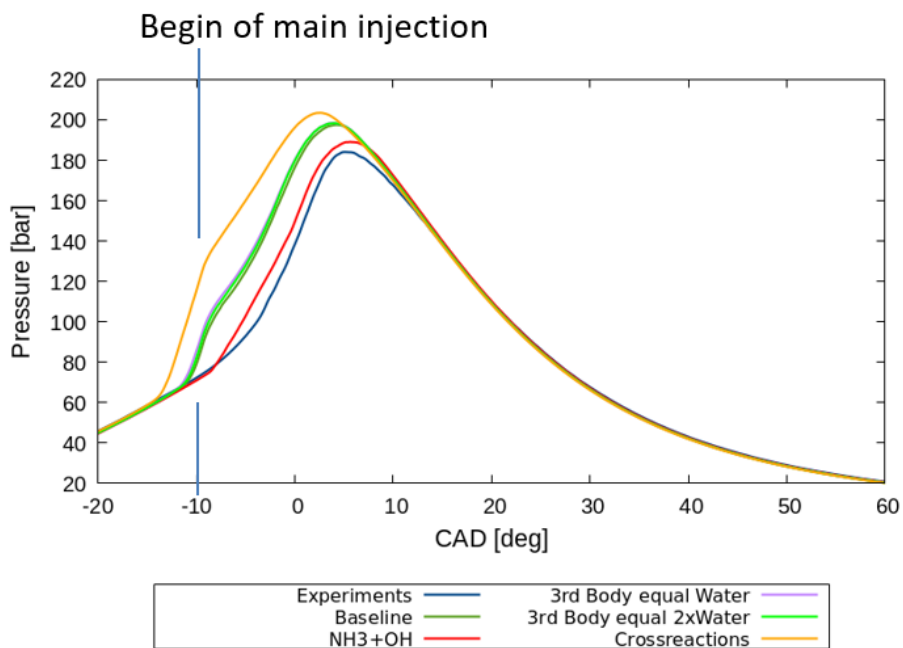


Abbildung 26: Einfluss verschiedener Reaktionen / Randbedingungen auf die modellierte Selbstzündung bei 70% Ammoniak

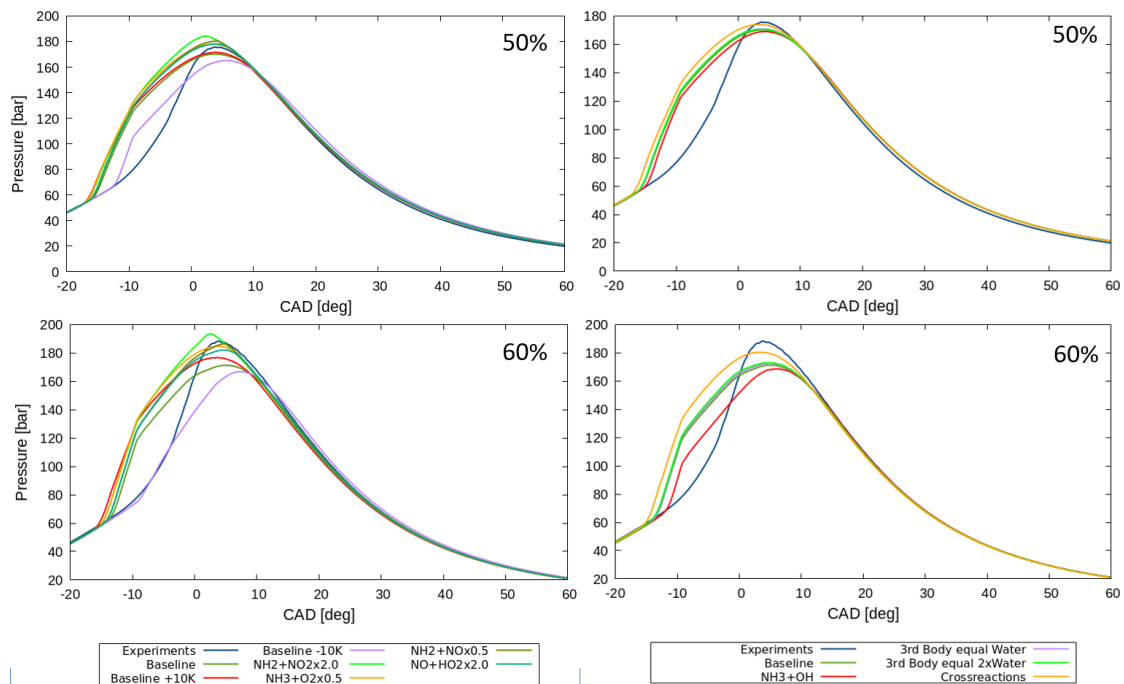


Abbildung 27: Einfluss verschiedener Reaktionen / Randbedingungen auf die modellierte Selbstzündung 50% und 60% Substitutionsrate

Während der Optimierung der Reaktionschemie wurde das überarbeitete Modell auch gegen Experimente verglichen, die typischerweise für die Untersuchungen von Reaktionskinetiken genutzt werden wie Stoßwellenrohre, Jet-Stirred-Reaktoren, Rapid-Compression-Maschinen (siehe AP 2.2). Diese Experimente haben im allgemeinen besser definierte Randbedingungen als Motorexperimente und sind weniger komplex. Änderungen am Reaktionsmechanismus die zu einer Verschlechterung der Vorhersage in solchen Experimenten führen wurden nicht in den finalen optimierten Mechanismus übernommen. Abbildung 28 zeigt die Vorhersage für die Zündverzugszeiten mit dem detaillierten Mechanismus aus AP 2.2 und Abbildung 29 zeigt die Vorhersage mit dem finalen in diesem AP optimierten Mechanismus. Die Zündverzugszeiten wurden von Feng et al. [20] in einer RCM für ein Gemisch aus Ammoniak / (chinesischer) Diesel gemessen. Es ist eine klare Verbesserung der vorhergesagten Zündverzugszeiten zu erkennen. Um den Dieselkraftstoff abbilden zu können wurde ein 2 Komponentengemisch mit passender Cetanzahl definiert.

Die Reaktionsraten des finalen Mechanismus werden an dieser Stelle nicht dargelegt.

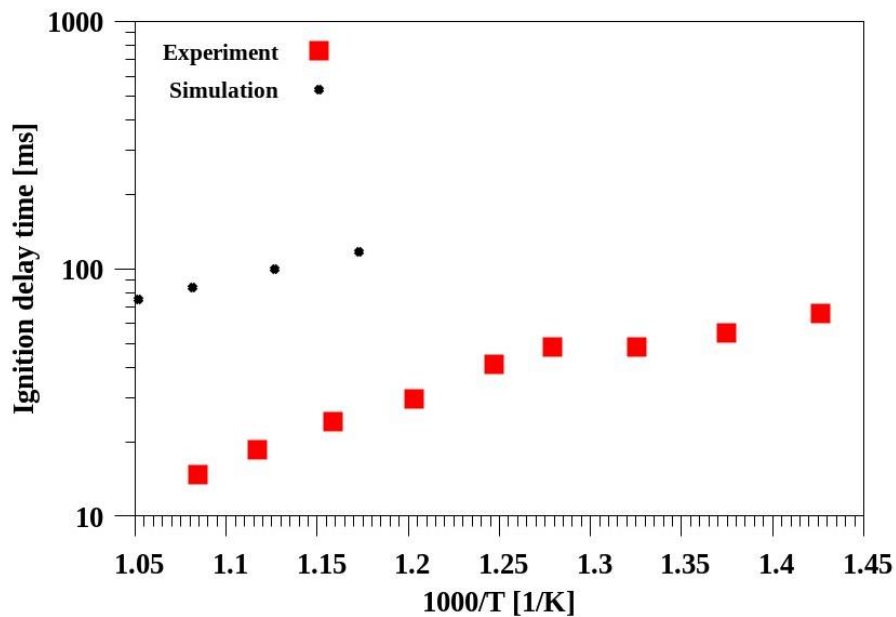


Abbildung 28: Vergleich der modellierten und gemessenen Zündverzugszeiten eines stöchiometrischen Ammoniak / Diesel Gemisches bei einem Kompressionsdruck von 15 bar. Modellierung mit dem detaillierten Mechanismus.

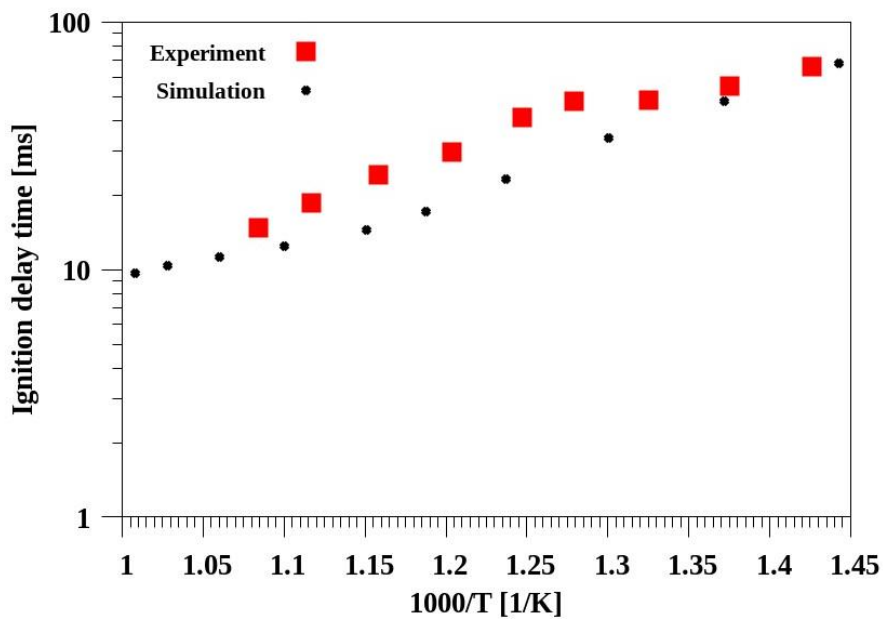


Abbildung 29: Vergleich der modellierten und gemessenen Zündverzugszeiten eines stöchiometrischen Ammoniak / Diesel Gemisches bei einem Kompressionsdruck von 15 bar. Modellierung mit dem reduzierten und optimierten Mechanismus.

Zusammenfassung:

- Durch die Messungen des Partners LKV und die Aufbereitung der Daten durch die FVTR war es möglich den Reaktionsmechanismus zu optimieren. Die Anpassungen in dem Reaktionsmechanismus sind auf das zur Verfügung stehende Motormodell / den Motor zugeschnitten. Da aber gleichzeitig auch andere Experimente in RCM, Stoßwellenrohr, Jet Stirred Reaktoren berücksichtigt wurden liegt der Schluss nahe dass eine Übertragbarkeit auf Motoren mit anderen Geometrien gegeben ist solange sich das Brennverfahren nicht ändert.
- Die bestehenden Unsicherheiten in der publizierten Literatur für Reaktionsraten mit hoher Sensitivität auf die Selbstzündung sind immer noch so hoch dass sich der vorhergesagte Zündzeitpunkt um viele °KW verschieben kann. Die Interaktion von Kohlenwasserstoffen und Ammoniak ist zum aktuellen Zeitpunkt noch immer wenig verstanden. Im Verlaufe des Projektes wurden viele Publikationen zur Ammoniakkinetik veröffentlicht, dennoch bestehen weiterhin große Unsicherheiten.
Der Ansatz die Reaktionschemie mithilfe von Motormessungen zu optimieren hat sich – dank der gut gewählten Experimentenmatrix des LKV – als durchführbar erwiesen. Die Vorhersagequalität wurde insgesamt verbessert. Eine Übertragbarkeit des Modells auf Motoren anderer Dimension scheint plausibel – sollte sich das Brennverfahren nicht grundsätzlich verändern. Für eine weitere Modellverbesserung sind hier weitere Messungen nötig.

AP 6.1 Analyse Ammoniakverfahren bei Variation motorischer Randbedingungen

Aus den numerischen Untersuchungen in Kapitel 5.4 und in gemeinsamen Diskussionen mit den Projektpartnern konnten die folgenden Erkenntnisse abgeleitet werden: Das vom Partner LKV entwickelte Brennverfahren zeigt eine hohe Sensitivität auf die Reaktionschemie. Das Verfahren stellt hohe Anforderungen an die Modellierung in allem Betriebspunkten mit hohem Ammoniakanteil.

Nach aktuellem Wissenstand können die Grundzüge des entwickelten Brennverfahrens aus reaktionskinetischer wie folgt zusammengefasst werden:

- Der Dieselmotorkraftstoff der Voreinspritzung hat viel Zeit, um sich gut zu mischen.
- Während der Kompressionsphase unterlaufen die Kohlenwasserstoffe (im aktuellen Modell hauptsächlich n-Dekan mit dem größten Anteil) eine Niedertemperaturchemie. Dies ist in Abbildung 30 deutlich an der Wärmefreisetzung für 0% und 20% Ammoniakanteil zu erkennen.
 - Vorgemischtes Ammoniak unterdrückt die Niedertemperaturchemie da es als (zusätzlicher) Radikalfänger agiert. Bei 70% Ammoniakanteil ist keine Wärmefreisetzung durch die Niedertemperaturchemie des vorgemischten Diesels mehr zu erkennen.

- Dabei konkurrieren n-Dekan und Ammoniak um Radikale wie OH, NO, HO₂.
- Gleichzeitig bildet der Zerfall einer Kraftstoffkomponente weitere Radikale, die von einem anderen Kraftstoff verbraucht werden.
- Kleinste Änderungen einer kettenabbrechenden oder kettenverzweigenden Reaktion oder der Anfangstemperatur entscheiden darüber, ob der Diesel aus der Voreinspritzung sich selbst entzünden kann oder ob erst durch den Diesel der Haupteinspritzung eine Selbstzündung erreicht werden kann.
- Eine Erhöhung der Gastemperatur um 10K bei hohen Substitutionsraten und nicht optimierten Reaktionsraten im Modell führt auch dazu das die Niedertemperaturchemie vor der Haupteinspritzung in eine vollständige Hauptzündung übergeht. Dies unterstreicht die hohe Sensitivität der Reaktionschemie.
- Das experimentell entwickelte Brennverfahren wurde so entwickelt und eingestellt das die Voreinspritzung ein Gemisch erzeugt das leicht von einer kleinen zusätzlichen Menge an Diesel gezündet werden kann. Diese wird in der Haupteinspritzung zur Verfügung gestellt. Für Substitutionsraten über 50% wird in der Hauptspritzung weniger Kraftstoff als in der Voreinspritzung eingebracht. Die sehr frühe Dieseleinspritzung ist als der Hauptgrund für die vergleichsweise geringen Emissionen des entwickelten Brennverfahren sind.

Eine detaillierte Beschreibung findet sich in der CIMAC Publikation. Im Rahmen des Projektes durchgeführte numerische Studien legen den Schluss nahe das dieses Brennverfahren auch auf andere Motorgeometrien übertragen werden kann solange die Abmessungen des Brennraums nicht zu einem deutliche anderen Brennverfahren führen. Dies könnte zum Beispiel der Fall sein, wenn in großen Bereichen des Motors nur vorgemischtes Ammoniak vorliegt und die Verbrennung allein durch eine fortschreitende Flammenfront vorangetrieben wird. Um dies zu beantworten wären weitere Experimente in größeren Motoren nötig.

Es konnte innerhalb des Projektes nicht abschließen geklärt werden, ob es einzelne Betriebspunkte gibt, in denen ein Verbrennungsfortschritt zum Ende der Verbrennung durch allein durch eine Flammenfront mit vorgemischtem Ammoniak / Luft Gemisch stattfindet. Es ist davon auszugehen dass dies aber einer bestimmten größeren Motordimension der Fall ist. Um dies zu klären sind weitere Experimente in größeren Motoren nötig ggf. mit verbesserter Messtechnik nötig. Idealerweise werden dabei optische Verfahren eingesetzt.

Es wurde numerische und experimentell bestätigt das ein frühe Voreinspritzung (für diese Motordimension) unabdingbar ist um maximalen Ammoniakumsatz und geringe Emissionen zu erreichen.

Ammonia injected into intake system



Abbildung 30: Druckverlauf und Einspritzzeiten (oben) sowie abgeleiteter Wärmefreisetzung (unten) bei unterschiedlichen Dieselsubstitutionsraten

AP 6.2 Ausarbeitung von Handlungsempfehlungen bzw. Entwicklung von Ammoniakbrennverfahren

Gemeinsam mit den Projektpartnern wurden Handlungsempfehlungen definiert, um den Einsatz vom Ammoniak als maritimen Kraftstoff zu ermöglichen. Dabei lag der Fokus auf der technischen Umsetzbarkeit möglicher Brennverfahren aus Sicht der Modellierung. Es hat sich im Laufe des Projektes gezeigt, dass ein Retrofit mit vorgemischtem Ammoniak möglich ist. Dabei sollte darauf geachtet werden, dass es zu einer vollständigen Verdampfung des Ammoniaks kommt. Eine Zündung durch einen Diesel(artigen)kraftstoff des Ammoniak / Luft Gemisch ist grundsätzlich möglich. Hohe Wirkungsgrade lassen sich aber nur durch eine sehr frühe Einspritzung erreichen (siehe Diskussion AP 6.1). Brennverfahren ohne Voreinspritzung haben sich im Experiment und in der Modellierung als weniger leistungsfähig dargestellt. Die frühe Voreinspritzung ermöglicht einen vergleichsweise geringen Ammoniakverlust und hohen Umsatz / Wirkungsgrad. Dies macht die Umrüstung auf ein moderneres Einspritzsystem bei einem Retrofit nötig, ermöglicht aber gleichzeitig den Betrieb mit reinem Dieseldieselkraftstoff, sollte dieser nötig sein. Numerische Studien legen nahe, dass eine Nutzung von Biodiesel, HVO oder anderen Dieseldieselkraftstoffen z.B. E-Fuels grundsätzlich möglich sind. Damit lassen sich die CO₂ noch weiter reduzieren. Je nach Cetanzahl und Verdampfungsverhalten müssen die Einspritzzeiten angepasst werden. Die Berücksichtigung anderer Kraftstoffe für eine numerische Vorauslegung mit den entwickelten Werkzeugen ist grundsätzlich möglich.

Es sei an dieser Stelle auf die deutlich detaillierteren Berichte der FVTR und des LKV zur direkten Auswertung der Experimente verwiesen.

Die Nutzung eines zusätzlichen Crakers scheint nicht nötig bei kleineren Motordimensionen. Gegebenenfalls könnten bei größeren Motoren geringe Anteile von H₂ vorteilhaft sein um eine schnellere Flammenausbreitung weit entfernt von Dieselzündung zu beschleunigen. Hierzu sind weitere Experimente oder numerische Untersuchungen nötig.

Aus numerischer Sicht bestehen die größten Unsicherheiten bei einer Vorauslegung für einen Retrofit in den noch immer großen Unsicherheiten hinsichtlich der Interaktion von Kohlenwasserstoffen und Ammoniak. Eine Vorgehensweise um ein Modelltraining basierend auf Messungen für den reinen Dieselmotorbetrieb durchzuführen und dann die Verbrennung von vorgemischtem Ammoniak/Luft Gemischen vorherzusagen wurde anhand der experimentellen Messungen entwickelt. Die Vorgehensweise wurde intern dokumentiert und dient als Handlungsanweisung für mögliche zukünftige Vorauslegungen.

Aus der in dem Projekt gewonnenen Erkenntnisse können nur Schlüsse auf ein Brennverfahren mit vorgemischtem Ammoniak mit Diesel Direkteinspritzung und Motoren ähnlicher Größe gezogen werden. Es ist aber davon auszugehen dass die Vorgehensweise auch auf andere Brennverfahren und Motorentypen anwendbar ist.

Messungen der Rohemissionen haben gezeigt dass das entwickelte Brennverfahren mit früher Voreinspritzung zwar die Emissionen (NO₂, NO, NH₃) deutlich senken kann aber eine Abgasnachbehandlung zwingend nötig sein wird um z.B. die IMO Tier 3 Werte zu erreichen. Eine Absenkung der Emissionen allein durch innermotorische Maßnahmen um die IMO Tier 3 einzuhalten und gleichzeitig eine hohe Dieselsubstitutionsrate zu erreichen scheint nach aktuellem Kenntnisstand für diesem Motor ohne weitere Maßnahmen nicht möglich. Ein besonderes Problem stellt der Ammoniakslupf da. Es hat sich im Verlauf des Projektes herausgestellt, dass das entwickelte und trainierte Modell den Verbrennungsverlauf und die Trends für NO, N₂O, CO₂ und CO Emissionen vorhersagen kann. Wie in Abbildung 31 für verschiedene Substitutionsraten dargestellt ist, ist vor allem die Vorhersage des Ammoniakslupf und der CO nicht gut. Es konnte innerhalb des Projektes nicht abschließend geklärt werden, ob es sich um einen geometrischen Effekt handelt (z.B. Bereiche die frei von vorgemischtem Diesel sind) der mit dem stochastischen Modell nicht abgebildet werden kann oder ob die Durchmischung generell überschätzt wird.

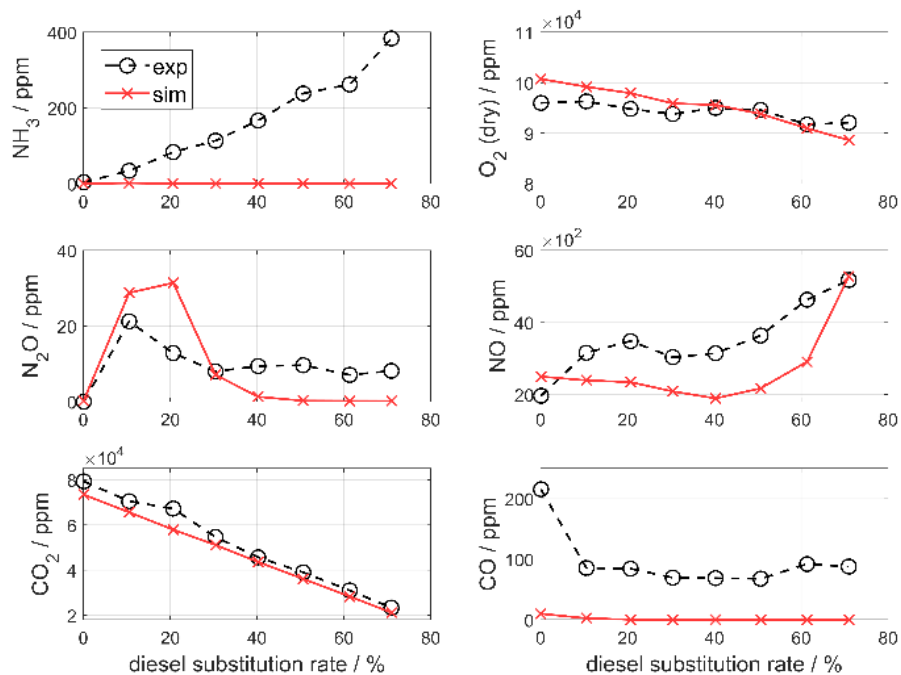


Abbildung 31: Vergleich von gemessener und vorhergesagter Emissionsbildung bei verschiedenen Substitutionsraten

AP 7.1 Projektkoordination, Kommunikation, Organisation / Durchführung von Projekttreffen

Es fanden regelmäßige Besprechungen (online) statt. Diese fanden mindestens alle 2 Wochen und bei Bedarf öfter statt. Darüber hinaus gab es Treffen vor Ort in Rostock.

AP 7.2 Durchführung eines projektbegleitenden Ammoniak-Workshops

Die Ergebnisse des Forschungsvorhabens wurden aufbereitet und im Rahmen der CAMPIRE-Projektes am 10.04.2024 vorgestellt. Dadurch konnten verschiedene Unternehmen und Forschungseinrichtungen erreicht werden. Die 3 Partner stellten das Forschungsprojekt und Erkenntnisse hinsichtlich des Umgangs mit Ammoniak, der Brennverfahrensentwicklung und Modellierung vor.

2.2 Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Die größten Posten die im Rahmen des Forschungsprojektes bilden die Personalkosten. Die Entwicklung und Erweiterung von Verbrennungsmodellen und Reaktionskinetiken ist arbeitsintensiv. Insgesamt waren viele Iterationen in der Modellentwicklung nötig, um den angestrebten Zustand zu erreichen. Die Arbeitszeit ist in etwa wie geplant in die verschiedenen Arbeitspakete gefallen. Um das Projekt erfolgreich im Rahmen der kostenneutralen Verlängerung zu begleiten und abschließen zu können wurde durch die LOGE mehr Arbeitszeit investiert als in der Zuwendung vorgesehen.

Für die Rechenintensiven Aufgaben wurden 2 Workstation für insgesamt ca. 10 000 € angeschafft. Darüber hinaus sind Lizenzkosten für GT-Power angefallen. Diese Ausgaben waren nötig, um die Integration des stochastischen Verbrennungsmodell in das GT-P Vollmotormodell der FVTR durchführen zu können (AP 5.3)

Den geringsten Posten stellen die Reisekosten da. Reisekosten sind vor allem für die Teilnahmen an Projekttreffen sowie die Vorstellung des Projektes auf einer Ammoniakkonferenz angefallen.

2.3 Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Die Arbeiten an den einzelnen Arbeitspaketen wurden wie geplant durchgeführt. Angesichts des Kenntnisstands (der publizierten Wissenschaft) zu Beginn des Projektes kann der Schluss gezogen werden das alle geplanten Ziele erreicht wurden. Ein Modell basierend auf detaillierter und tabulierten Reaktionskinetik wurde entwickelt. Dabei geht das entwickelte und reduzierte Verbrennungsmodell über den Stand der publizieren Wissenschaft hinaus.

Darüber hinaus wurden wertvolle Erkenntnisse über das Verbrennungsverhalten von vorgemischtem Ammoniak mit Dieselizezündung gesammelt. Es wurde ein Konzept für die numerische Vorauslegung einer Umrüstung von reinem Diesel auf eine Betrieb mit Ammoniak entwickelt. Die Vorgehensweise kann in gewissen Maßen auf die Entwicklung / Erweiterung für anderen vorgemischte Kraftstoffe wie Methanol übertragen werden.

Die geleistete Arbeit, nebst Kosten für Rechentechnik und Lizenzen, war nötig um diesen Stand zu erreichen. Die 7 Konferenzbeiträge die innerhalb des 2,5 jährigen Projektes erstellt wurden spricht für das hohe Interesse von Dritten an dem Forschungsprojekt.

2.4 Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere Verwertbarkeit der Ergebnisse im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplan

In den letzten Jahren hat sich die Erkenntnis weiter vertieft das Ammoniak ein wichtiger Energieträger der Zukunft sein wird. Mit den Vorteilen gerade hinsichtlich des Transports und der Herstellung kann davon ausgegangen werden das Energie (Power-to-X) in Zukunft in Form von Ammoniak transportiert wird. Eine direkte Verwendung in Schiffsmotoren bietet sich damit an. Im Rahmen des Projekte konnte gezeigt werden das ein Retrofit von bestehenden Motoren grundsätzlich möglich ist. LOGE konnte durch Messungen und Auswertung der Projektpartner ein Modell für die Vorauslegung einer solchen Umrüstung entwickeln. Darüber hinaus wurden wertvolle Erkenntnisse über das Verbrennungsverhalten von Ammoniak und Ammoniak/Diesel Gemische gesammelt und eine Reaktionschemie über den Stand der Wissenschaft hinaus entwickelt.

Die Ergebnisse der Modellentwicklung werden nach Projektende in die kommerziellen Werkzeuge LOGEfuel und LOGEengine überführt. Die entwickelten Modell stellen einen Vorsprung gegenüber anderen Anbietern dar. Darüber hinaus wurde LOGE durch die Entwicklung der Werkzeuge in die Lage versetzt eine Vorauslegung als Dienstleistung anzubieten. Die Konferenzbeiträge haben die Sichtbarkeit der Firma erhöht.

Im Rahmen des Projektes sind weitere Fragestellungen insbesondere im Bereich der Abgasnachbehandlung aufgetreten, die jetzt im Rahmen eines weiteren Forschungsprojektes untersucht werden (NH₃-Stat).

Das Thema Ammoniak als Kraftstoff wird vermehrt von Kunden angefragt werden. Aktuell wird es eher im Bereich vom Machbarkeitsstudien verortet. Sollte sich Ammoniak in den nächsten Jahren als Kraftstoff durchsetzen kann LOGE bestehende Kunden mit den entsprechenden Modell / Werkzeugen versorgen und neue Kunden gewinnen.

2.5 Während der Durchführung des Vorhabens dem ZE bekannt gewordener Fortschritt auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Das Thema Ammoniak als Kraftstoff hat in den letzten 3 Jahren vermehrt Aufmerksamkeit erfahren. Wie im Abschlussbericht des LKV dargelegt gab es eine Vielzahl von Veröffentlichungen, die die Verbrennung von Diesel und Ammoniak in Motoren untersucht haben. Diese unterscheiden hinsichtlich Brennverfahren, Motordimension und anderen Motorparametern. Eine Begleitung durch Modellierung ist in diesen Arbeiten gar nicht durchgeführt worden oder nur mit einfachen Modellen.

Hinsichtlich der Entwicklung und Untersuchung der Reaktionskinetik gab es eine Vielzahl von Publikationen die sich vor allem auf Stoßwellenrohre, Rührreaktoren und Vormischflammen konzentrieren. Für die Interaktion von Ammoniak und Diesel ist nur eine weitere Publikation [20] im Laufe des Projektes veröffentlicht worden. Die Berücksichtigung von Motorexperimente zur Modelloptimierung in diesem Projekt stellt ein Novum da.

2.6 Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse nach Nr. 11

Konferenzbeiträge

Mante, T.; Prehn, S.; Theile, M.; Seidel, L.; Mestre, L.; Buchholz, B. Mauss, F.: Ammoniak als Kraftstoffoption für eine klimaneutrale Schifffahrt – Herausforderungen, Umgang & erste Untersuchungen, 19. FAD Konferenz, Dresden, 3.-4. November 2022

Mante, T.; Prehn, S.; Theile, M.; Seidel, L.; Mestre, L.; Buchholz, B. Mauss, F.: Investigation of an ammonia diesel dual-fuel combustion process on a heavy duty single cylinder research engine for the development of suitable simulation tools for maritime applications, 17th MTZ conference Heavy-Duty-, On- and Off-Highway Engine, Donaueschingen, 16.-17. November 2022

Mante, T.; Prehn, S.; Seidel, L.; Mestre, L.; Theile, M.; Hoppe, A.; Buchholz, B.; Mauss, F.: Numerical Study of NH₃-Diesel Combustion in a Retrofit for Marine Engines using Detailed Kinetics, 30th CIMAC World Congress 2023. Ed. by VDMA. Busan, 12.-16. Juni 2023

Seidel, L.; Mestre, L.; Mante, T.; Theile, M.; Hoppe, A.; Prehn, S. et al.: Numerical study of NH₃-hydrocarbon (Diesel) chemistry interaction in marine engines using detailed reaction kinetics, 2nd Symposium on Ammonia Energy, Orléans (France), 11.-13. Juli 2023

Mante, T.; Prehn, S.; Glauner, M.; Seidel, L.; Mestre, L.; Theile, M.; Hoppe, A.; Buchholz, B.; Mauss, F.: Ammoniak Diesel Dual-Fuel Brennverfahren – Einfluss der Piloteinspritzstrategie auf Innenprozess und Emissionen, 20. FAD Konferenz, Dresden, 08.-09. November 2023

Theile, M.; Prehn, S.; Seidel, L.; Mante, T.; Hoppe, A.; Mestre, L.; Buchholz, B.; Mauss, F.: Entwicklung von Simulationswerkzeugen für zukünftige maritime Ammoniak-Verbrennungsmotoren, Statustagung maritime Technologien, Berlin, 05.-06. Dezember 2023

Theile, M.; Prehn, S.; Seidel, L.: Design of an ammonia retrofit concept for maritime propulsion units smaller than 400 kW, Dessauer Gasmotorenkonferenz, Dessau, 15. / 16. Mai 2024

Geplante Publikation in Fachjournal mit Review

Beitrag im Journal *International Journal of Engine Research*. Arbeitstitel:
„Development of an ammonia-diesel dual-fuel combustion process with consideration of greenhouse gas“

3. Literaturverzeichnis

- [1] A. Yousefi, H. Guo, S. Dev, B. Liko, and S. Lafrance, "Effects of ammonia energy fraction and diesel injection timing on combustion and emissions of an ammonia/diesel dual-fuel engine," *Fuel*, vol. 314, Apr. 2022, doi: 10.1016/j.fuel.2021.122723.
- [2] J. Otomo, M. Koshi, T. Mitsumori, H. Iwasaki, and K. Yamada, "Chemical kinetic modeling of ammonia oxidation with improved reaction mechanism for ammonia/air and ammonia/hydrogen/air combustion," *Int J Hydrogen Energy*, vol. 43, no. 5, pp. 3004–3014, Feb. 2018, doi: 10.1016/j.ijhydene.2017.12.066.
- [3] A. Frassoldati, A. Cuoci, A. Stagni, T. Faravelli, and E. Ranzi, "Skeletal kinetic mechanism for Diesel combustion," *Mcs* 9, vol. 7830, no. September, 2015, doi: 10.1080/13647830.2016.1222082.
- [4] P. Glarborg, J. A. Miller, B. Ruscic, and S. J. Klippenstein, "Modeling nitrogen chemistry in combustion," *Prog Energy Combust Sci*, vol. 67, pp. 31–68, 2018, doi: 10.1016/j.pecs.2018.01.002.
- [5] A. Stagni *et al.*, "An experimental, theoretical and kinetic-modeling study of the gas-phase oxidation of ammonia," *React Chem Eng*, vol. 5, no. 4, pp. 696–711, Apr. 2020, doi: 10.1039/c9re00429g.
- [6] K. P. Shrestha, L. Seidel, T. Zeuch, and F. Mauss, "Detailed Kinetic Mechanism for the Oxidation of Ammonia Including the Formation and Reduction of Nitrogen Oxides," *Energy & Fuels*, p. acs.energyfuels.8b01056, 2018, doi: 10.1021/acs.energyfuels.8b01056.
- [7] X. Wang, "Kinetic mechanism of surrogates for biodiesel," BTU Cottbus - Senftenberg, 2018.

- [8] A. Matriciano, L. Seidel, and F. Mauss, "An a priori thermodynamic data analysis based chemical lumping method for the reduction of large and multi-component chemical kinetic mechanisms," *Int J Chem Kinet*, vol. 54, no. 9, pp. 523–540, Sep. 2022, doi: 10.1002/kin.21592.
- [9] K. P. Shrestha *et al.*, "An experimental and modeling study of ammonia with enriched oxygen content and ammonia/hydrogen laminar flame speed at elevated pressure and temperature," *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 38, no. 2, pp. 2163–2174, Jan. 2021, doi: 10.1016/j.proci.2020.06.197.
- [10] K. P. Shrestha *et al.*, "A detailed chemical insights into the kinetics of diethyl ether enhancing ammonia combustion and the importance of NO_x recycling mechanism," *Fuel Communications*, vol. 10, p. 100051, Mar. 2022, doi: 10.1016/j.fueco.2022.100051.
- [11] P. Glarborg, J. A. Miller, B. Ruscic, and S. J. Klippenstein, "Modeling nitrogen chemistry in combustion," *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 67, Elsevier Ltd, pp. 31–68, Jul. 01, 2018. doi: 10.1016/j.pecs.2018.01.002.
- [12] U. Pfahl, K. Fieweger, and G. Adomeit, "Self-ignition of diesel-relevant hydrocarbon-air mixtures under engine conditions," *Symposium (International) on Combustion*, vol. 26, pp. 781–789, 1996, doi: 10.1016/S0082-0784(96)80287-6.
- [13] V. P. Zhukov, V. A. Sechenov, and A. Y. Starikovskii, "Autoignition of n-decane at high pressure," *Combust Flame*, vol. 153, no. 1–2, pp. 130–136, 2008, doi: 10.1016/j.combustflame.2007.09.006.
- [14] E. OLCHANSKI and A. BURCAT, "Decane Oxidation in a Shock Tube," *Int J Chem Kinet*, 2006, doi: 10.1002/kin.
- [15] X. He, B. Shu, D. Nascimento, K. Moshhammer, M. Costa, and R. X. Fernandes, "Auto-ignition kinetics of ammonia and ammonia/hydrogen mixtures at intermediate temperatures and high pressures," *Combust Flame*, vol. 206, pp. 189–200, Aug. 2019, doi: 10.1016/j.combustflame.2019.04.050.
- [16] J. Bian, J. Vandooren, and P. J. Van Tiggelen, "EXPERIMENTAL STUDY OF THE FORMATION OF NITROUS AND NITRIC OXIDES IN H₂-O₂-Ar FLAMES SEEDED WITH NO AND/OR NH₃," 1990.
- [17] J. Chen, X. Jiang, X. Qin, and Z. Huang, "Effect of hydrogen blending on the high temperature auto-ignition of ammonia at elevated pressure," *Fuel*, vol. 287, Mar. 2021, doi: 10.1016/j.fuel.2020.119563.
- [18] X. Zhang, S. P. Moosakutty, R. P. Rajan, M. Younes, and S. M. Sarathy, "Combustion chemistry of ammonia/hydrogen mixtures: Jet-stirred reactor measurements and comprehensive kinetic modeling," *Combust Flame*, vol. 234, Dec. 2021, doi: 10.1016/j.combustflame.2021.111653.
- [19] H. Wang *et al.*, "An experimental and kinetic modeling study of the autoignition of α -methyl-naphthalene/air and α -methyl-naphthalene/n-

- decane/air mixtures at elevated pressures," *Combust Flame*, vol. 157, no. 10, pp. 1976–1988, Oct. 2010, doi: 10.1016/j.combustflame.2010.04.007.
- [20] Y. Feng *et al.*, "Low-temperature auto-ignition characteristics of NH₃/diesel binary fuel: Ignition delay time measurement and kinetic analysis," *Fuel*, vol. 281, Dec. 2020, doi: 10.1016/j.fuel.2020.118761.
- [21] A. Matriciano, T. Franken, L. C. Gonzales Mestre, A. Borg, and F. Mauss, "Development of a computationally efficient tabulated chemistry solver for internal combustion engine optimization using stochastic reactor models," *Applied Sciences (Switzerland)*, vol. 10, no. 24, pp. 1–31, Dec. 2020, doi: 10.3390/app10248979.
- [22] L. Seidel *et al.*, "Systematic Reduction of Detailed Chemical Reaction Mechanisms for Engine Applications," *J Eng Gas Turbine Power*, vol. 139, no. September, pp. 1–9, 2017, doi: 10.1115/1.4036093.
- [23] K. P. Shrestha, L. Seidel, T. Zeuch, G. Moréac, P. Dagaut, and F. Mauss, "On the implications of nitromethane – NO_x chemistry interactions for combustion processes," *Fuel*, vol. 289, Apr. 2021, doi: 10.1016/j.fuel.2020.119861.
- [24] K. P. Shrestha *et al.*, "Insights into nitromethane combustion from detailed kinetic modeling – Pyrolysis experiments in jet-stirred and flow reactors," *Fuel*, vol. 261, 2020, doi: 10.1016/j.fuel.2019.116349.