

Schlussbericht

zu IGF-Vorhaben Nr. 19723 N/1

Thema

Quasidimensionale Modellierung der HC- und der CO-Bildung am Dieselmotor

Berichtszeitraum

01.01.2018 - 31.07.2020

Forschungsvereinigung

Forschungskuratorium Maschinenbau e.V.

Forschungseinrichtung(en)

Universität Stuttgart

Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart

Pfaffenwaldring 12

70569 Stuttgart

Stuttgart, 30.09.2020

Ort, Datum


Prof. Dr.-Ing. M. Bargende

Name und Unterschrift aller Projektleiterinnen und Projektleiter der
Forschungseinrichtung(en)

Gefördert durch:

HC/CO-Modell

Vorhaben Nr. 1310

Quasidimensionale Modellierung der HC- und CO-Bildung am Dieselmotor

Abschlussbericht

Kurzfassung:

In diesem Projekt wird ein phänomenologischer 0D/1D-Ansatz erarbeitet um die innermotorische Bildung der Rohemissionen an unverbrannten Kohlenwasserstoffen und Kohlenmonoxid für Dieselmotoren zu simulieren. Das neuentwickelte HC/CO-Modell ist aus zweierlei Hinsicht von Bedeutung: Zum einen sind die Ergebnisse des Modells für die Emissionsvorhersage und darüber hinaus auch für die Abgasnachbehandlung und den Regenerationsbetrieb des Dieselmotors von Interesse. Zum anderen stecken in den HC- und CO-Emissionen ein Teil der Kraftstoffenergie, weshalb sie je nach Betriebspunkt für eine präzise Vorhersage des Wirkungsgrades und damit des Kraftstoffverbrauches besonders relevant sind.

Für eine genaue Vorhersage der HC- und CO-Emissionen ist es notwendig die, bei der dieselmotorischen Verbrennung auftretenden, Inhomogenitäten abzubilden. Die nachfolgend genannten Effekte sind hauptverantwortlich für die Emissionen und werden folglich modelliert: Während lokal unterstöchiometrische Bereiche nur für die CO-Emissionen relevant sind, spielen lokal sehr magere Bereiche des Einspritzstrahls für HC- und CO-Emissionen eine Rolle. Kalte Bereiche in Nähe der Brennraumwände müssen für beide Emissionen berücksichtigt werden. Kraftstoff, der nach dem Ende der Einspritzung unter geringer Geschwindigkeit vom Injektor in den Brennraum gelangt und nicht oxidiert, muss lediglich für das HC-Modell berücksichtigt werden. In Kombination mit reduzierten chemischen Reaktionsmechanismen lassen sich mit diesen modellierten Inhomogenitäten die HC- und CO-Rohemissionen vorhersagen. Eine Validierung des HC/CO-Modells wurde anhand von zwei unterschiedlichen Pkw-Dieselmotoren durchgeführt, wobei gezeigt werden konnte, dass die gemessenen Emissionen mit dem Modell gut wiedergegeben werden können.

Das Ziel des Forschungsvorhabens ist erreicht worden.

Berichtsumfang:	70 S., 33 Abb., 9 Tab., 67 Lit.
Laufzeit:	01.01.2018 – 31.07.2020
Zuschussgeber:	BMW / IGF-Nr. 19723 N
Forschungsstelle(n):	Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart (IFS), Universität Stuttgart Leiter: Prof. Dr.-Ing. M. Bargende
Bearbeiter und Verfasser:	Christian Schnapp, M.Sc. (IFS)
Vorsitzende(r) projektbegleitender Ausschuss:	Dr.-Ing Markus Wenig (Winterthur Gas & Diesel Ltd.)
Vorsitzender Beirat:	Dr.-Ing. Tobias Löscheter Horst (Volkswagen AG)
Weitere Berichte zum Forschungsvorhaben:	R596 (2020)

Danksagung

Dieser Bericht ist das wissenschaftliche Ergebnis einer Forschungsaufgabe, die von der Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV) e. V. gestellt und am Institut für Fahrzeugtechnik Stuttgart (IFS) der Universität Stuttgart unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. M. Bargende bearbeitet wurde.

Die FVV dankt Professor Bargende und dem wissenschaftlichen Bearbeiter Christian Schnapp (IFS) für die ausgezeichnete Durchführung des Vorhabens sowie der Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen (AiF) e. V. für die finanzielle Förderung. Das Vorhaben wurde von einem Arbeitskreis der FVV unter der Leitung von Dr.-Ing Markus Wenig (Winterthur Gas & Diesel Ltd.) begleitet. Diesem projektbegleitenden Ausschuss gebührt unser Dank für die große Unterstützung.

Das Forschungsvorhaben wurde im Rahmen des Programms zur Förderung der industriellen Gemeinschaftsforschung (IGF-Nr. 19723 N) vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) über die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen (AiF) e. V. aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages gefördert.

Gefördert durch:



Inhaltsverzeichnis

1	Executive Summary	1
1.1	Executive Summary (DE)	1
1.2	Executive Summary (EN)	2
2	Einleitung und Motivation	3
3	Stand der Technik.....	5
3.1	Quellen und Einflussfaktoren von HC- und CO-Emissionen beim Dieselmotor.....	5
3.2	Reaktionskinetische Modellierung von HC- und CO-Emissionen.....	8
3.3	Emissionsmodelle zur Abbildung der HC- und CO-Emissionen bei Dieselmotoren.....	10
3.4	Phänomenologisches Zweizonenmodell nach Kožuch und Erweiterung nach Kaal.....	12
4	Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen.....	15
4.1	Daten des verwendeten Versuchsmotors.....	15
4.2	Messaufbau und Messgeräte	15
4.3	Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen bezüglich HC- und CO-Emissionen	18
4.3.1	Motorkennfeld	18
4.3.2	Variation der Brennraumwandtemperatur.....	23
4.3.3	Variation des Luftverhältnisses.....	24
5	Modellierung der HC-Emissionen.....	27
5.1	Injektortropfen	27
5.2	Ausmagerungseinfluss.....	27
5.3	Wandzoneneinfluss.....	29
5.4	Validierung des HC-Modells anhand des Kennfeldes des Versuchsmotors OM 642.....	30
5.5	Validierung des HC-Modells anhand der Betriebspunkte des Versuchsmotors OM 646	32
6	Modellierung der CO-Emissionen	37
6.1	CO-Oxidationsmechanismus.....	37
6.2	Luftmangeleinfluss	41
6.3	Ausmagerungseinfluss.....	43
6.4	Wandzoneneinfluss.....	43
6.5	Validierung des CO-Modells anhand des Kennfeldes des OM642	44
6.6	Validierung des CO-Modells anhand Betriebspunkte des OM646	46
7	Zusammenfassung und Ausblick	49
8	Anhang	51

8.1	Literaturverzeichnis	51
8.2	Abkürzungsverzeichnis	54
8.3	Abbildungsverzeichnis.....	55
8.4	Tabellenverzeichnis.....	56
8.5	Symbolverzeichnis	57
8.6	Softwaredokumentation.....	60

1 Executive Summary

1.1 Executive Summary (DE)

Strengere Vorgaben hinsichtlich des Kraftstoffverbrauchs sowie niedrigere Emissionsgrenzwerte seitens des Gesetzgebers rücken die Bedeutung der unverbrannten Kohlenwasserstoff-(HC) und Kohlenmonoxid-Emissionen (CO) in den Fokus der Entwicklungstätigkeiten bei Dieselmotoren. Diese Emissionen spielen aus zweierlei Hinsicht eine bedeutende Rolle. Zum einen ist die quantitative Kenntnis der Rohemissionen für die Abgasnachbehandlung und somit auch für Emissionsvorhersagen essenziell. Zum anderen sind diese Emissionen wesentlich für die Vorhersage des Umsetzungswirkungsgrades und somit auch für Verbrauchsvorhersagen, da in den HC- und CO-Molekülen ein Teil der im Kraftstoff gebundenen chemischen Energie ungenutzt bleibt. Aus diesem Grund wurde ein Simulationsmodell zur Vorhersage der HC- und CO-Rohemissionen bei Dieselmotoren entwickelt, welches auf einem phänomenologischen zweizonigen Modellansatz beruht.

Das HC-Modell berücksichtigt drei Quellen, die für die Emissionsentstehung hauptverantwortlich sind: In einem ersten Untermodell werden HC-Emissionen, die durch Injektortröpfeln entstehen, modelliert. Hierbei tritt Kraftstoff nach dem Ende der eigentlichen Einspritzung langsam aus dem Injektor und oxidiert aufgrund der schlechten Gemischaufbereitung nur unzureichend. Als zweites werden HC-Emissionen, die durch Ausmagerung entstehen modelliert. Diese entstehen in Bereichen, in denen das Kraftstoff-Luft-Gemisch durch hohe Lufteinmischung und folglich niedrigen Verbrennungstemperaturen zunächst nicht vollständig oxidieren kann. Die Modellierung beinhaltet dabei einen nachgeschalteten Reaktionsmechanismus, so dass ausgemagerter Kraftstoff durch hohe Temperaturen im Unverbrannten bzw. durch Einmischung in heiße verbrannte Bereiche nachträglich oxidieren kann. Als dritte Quelle werden HC Emissionen aus Wandbereichen modelliert. Die Oxidation des Kraftstoffes, welcher in diese Bereiche eintritt, ist aufgrund der vergleichsweise geringen Temperatur in der Nähe der Brennraumwände stark reduziert. Die Modellierung dieses Untermodells beinhaltet die Berechnung der Randzone mittels der Dicke des Wandbereiches sowie der Einmischung von unverbranntem Kraftstoff in diese Randzone. Die Oxidation im Kernbereich erfolgt mittels Einschritt-Reaktionsmechanismus.

Im CO-Modell werden ebenso die drei, für die Emissionsentstehung hauptverantwortlichen, Quellen modelliert. In einem Submodell werden CO-Emissionen, die in lokal unterstöchiometrischen Bereichen entstehen modelliert. Dabei wird sowohl die Bildung lokal fetter Zonen durch die Einspritzung als auch deren Abnahme durch Vermischung mit mageren Bereichen berücksichtigt. Als zweites werden CO-Emissionen, die, analog zum HC Modell, durch Ausmagerung entstehen modelliert. CO-Emissionen, die im Modell durch Ausmagerung entstehen, können nachträglich oxidieren, wenn sie in die verbrannte Zone gelangen. Zuletzt werden auch für das CO-Modell Emissionen aus wandnahen Bereichen modelliert. CO, welches zunächst durch Ausmagerung oder unterstöchiometrische Bereiche entsteht und in die modellierte Wandzone einmischt, entzieht sich durch die lokal geringen Temperaturen der weiteren Oxidationsmöglichkeit. Für das CO-Modell wurde ein Einschritt-Oxidationsmechanismus entwickelt, der für CO in der verbrannten Zone angewandt wird.

Das HC/CO-Modell wurde anhand zweier unterschiedlicher Dieselmotoren, welche auf dem OM 642 und dem OM 646 basieren, abgestimmt. Die HC- und CO-Messergebnisse konnten mit dem Simulationsmodell gut wiedergegeben werden. Hierbei zeigte sich für das HC- und das CO-Modell, dass eine separate Abstimmung des Wandzonenmodells für den OM 646 keine wesentliche Verbesserung mit sich bringt, was wiederum im Ergebnis den Abstimmprozess verringert. Des Weiteren konnte gezeigt werden, dass mit einem aus beiden Abstimmungen gemittelten Parametersatz, eine hinreichend gute Vorhersagefähigkeit für beide Motoren gegeben werden kann.

1.2 Executive Summary (EN)

Intensified specifications regarding fuel consumption and lower emission limits set by the legislator are moving the importance of unburned hydrocarbon (HC) and carbon monoxide (CO) emissions into the focus of development activities for diesel engines. These emissions play an important role in two different ways. On the one hand, quantitative knowledge of raw emissions is essential for the exhaust after treatment and thus also for emission predictions. On the other hand, these emissions are essential for predicting the combustion efficiency and thus also for predicting fuel consumption, since a part of unreleased chemical energy of the fuel is still bound in the HC and CO molecules. For this reason, a simulation model, which is based on a phenomenological two-zone model approach, has been developed to predict the raw HC and CO emissions of diesel engines.

The HC model takes three sources into account, which are mainly responsible for the emission occurrence: In a first sub-model, HC emissions caused by injector dribble are modelled. Here, fuel slowly emerges from the injector after the end of the actual injection process and oxidizes only insufficiently due to poor mixture preparation. Secondly, HC emissions caused by overmixing are modelled. These emissions are caused in areas where the fuel mixture cannot fully oxidize at first due to high air mixing in and thus low combustion temperatures. The modelling includes an affiliated reaction mechanism, so that overmixed fuel can oxidize subsequently due to high temperatures in the unburned or by mixing in into hot burned areas. As a third source, HC emissions from wall areas are modelled. The oxidation of the fuel entering these areas is strongly reduced due to the comparatively low temperature near the combustion chamber walls. The modelling of this sub-model includes the calculation of the peripheral zone by means of the boundary thickness as well as the mixing in of unburned fuel into this peripheral zone. The oxidation in the core zone is performed by a one-step reaction mechanism.

In the CO model, the three sources that are mainly responsible for emission occurrence are also modelled. In a first sub-model, CO emissions that are produced in locally sub-stoichiometric areas are modelled. Both the formation of locally rich zones through injection and their reduction through mixing with lean areas are taken into account. Secondly, CO emissions, which analogous to the HC model result from overmixing, are modelled. CO emissions that are formed in the model by overmixing can oxidize subsequently when they enter the burned zone. Finally, emissions from areas near the combustion chamber walls are also considered in the CO model. CO, which is initially generated by overmixing or understoichiometric areas and which is mixed into the modelled peripheral zone, cannot further oxidized due to the locally low temperatures. A one-step oxidation mechanism has been developed for the CO model, which is applied to CO in the burned zone.

The HC/CO model was calibrated using two different diesel engines, one based on the OM 642 and one based on the OM 646. The HC and CO measurement results were well reproduced with the simulation model. The HC and the CO model showed that a separate calibration of the peripheral zone model for the OM 646 does not result in any significant improvement, which in turn reduces the calibration process. Furthermore, it could be shown that with a parameter set averaged from both calibrations, a sufficiently good prediction capability can be given for both engines.

2 Einleitung und Motivation

Mehr als 100 Jahre nach seiner Erfindung spielt der Dieselmotor noch immer eine bedeutende Rolle für die Mobilität von heute. So beträgt der Bestand an Personenkraftwagen (Pkw) mit Dieselmotor in Deutschland zum 01.01.2020 laut Kraftfahrt-Bundesamt (KBA) über 15,1 Mio., was einem Anteil von knapp 32% entspricht [1]. Der Bestand hält sich in den letzten Jahren auf konstant hohem Niveau und liegt sogar deutlich über dem Bestand des Jahres 2015, als bekannt wurde, dass ein deutscher Automobilkonzern eine illegale Abschaltvorrichtung in seinen Dieselfahrzeugen eingesetzt hat [2]. Im Bereich der Lastkraftwagen (Lkw) zeigt sich anhand des Bestandes zu Beginn des Jahres 2019 die enorme Bedeutung des Dieselmotors mit einem Anteil von über 94% [3]. Ein wesentlicher Grund für die hohe Marktdurchdringung liegt hierbei in der hohen Wirtschaftlichkeit des Dieselmotors. Entsprechend lässt sich folgern, dass der Dieselmotor nichts an seiner Aktualität verloren hat und auch Gegenstand weiterer Forschungs- und Entwicklungsarbeit sein wird.

Die Auseinandersetzung mit HC- und CO-Emissionen beim Dieselmotor spielt dabei in zweierlei Hinsicht eine wichtige Rolle. Zum einen ist der Ausstoß dieser Emissionen durch den Gesetzgeber limitiert. In Abbildung 1 sind die Grenzwerte der unterschiedlichen EU-Emissionsstandards für Diesel-Pkw für die beiden Emissionen eingetragen. Während CO alleine limitiert ist, gilt ein Grenzwert für die Summe aus HC und Stickoxiden (NO). Während ab der Norm Euro 4 der Grenzwert für CO konstant geblieben ist, wurde die zulässige Masse für die Summe aus HC und NO weiter reduziert. Für zukünftige Abgasnormen kann mit einer weiteren Herabsetzung der Grenzwerte gerechnet werden. Zudem ergeben sich durch geänderte Prüfzyklen höhere Anforderungen an das Gesamtsystem. Mit dem Umstieg vom Neuen Europäischen Fahrzyklus (NEFZ) auf den Worldwide harmonized Light Duty Test Cycle (WLTC) ergeben sich deutlich dynamischere Fahrzustände. Durch Messungen im realen Fahrbetrieb, was unter den Begriff Real Driving Emissions (RDE) fällt, kommt als weitere Herausforderung hinzu, dass es kein vordefiniertes Fahrprofil mehr gibt. Um unter diesen Bedingungen weiterhin die Abgasnorm einzuhalten, sollten bereits die Rohemissionen durch innermotorische Maßnahmen möglichst geringgehalten werden.

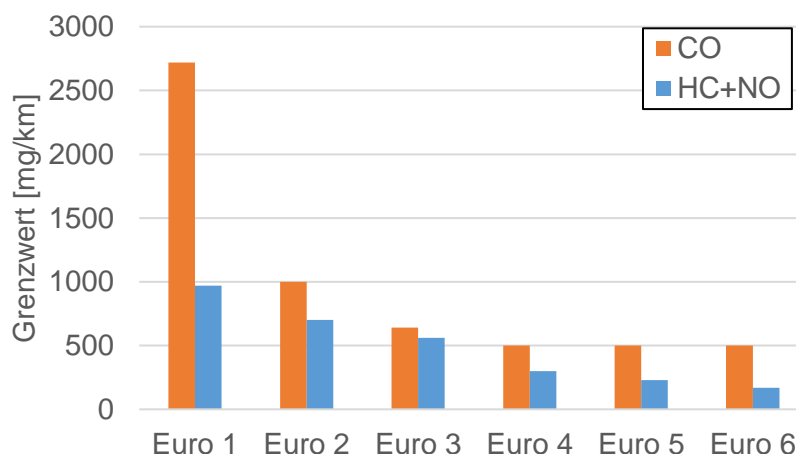


Abbildung 1: Grenzwerte der unterschiedlichen Abgasnormen in der EU für CO und HC+NO für Pkw mit Dieselmotor [4]

Zum anderen spielen die HC- und CO-Emissionen aus verbrauchstechnischer Sicht eine wichtige Rolle. In diesen Emissionen steckt noch ein Teil der chemisch gebundenen Energie des Kraftstoffes, der folglich ungenutzt bleibt. Während der untere Heizwert von Dieselmotor bei 42,9 MJ/kg liegt, beträgt der untere Heizwert für Propan, das für die HC-Messung als Referenzgas verwendet wird, bei 46,4 MJ/kg. Der Wert für CO liegt mit 10,1 MJ/kg deutlich darunter, was allerdings am vergleichsweise schwerem Sauerstoffatom liegt. Betrachtet man die Kette der Wärmefreisetzung wird durch die Oxidation von CO zu CO₂ etwa 45% der im Kraft-

stoff gespeicherten Energie frei [5]. Entsprechend besteht bei der Entwicklung des Dieselmotors auch aus Sicht des Kraftstoffverbrauches ein Interesse, die HC- und CO-Emissionen möglichst gering zu halten. [6]

Der Kraftstoffverbrauch lässt sich in einen CO₂-Ausstoß umrechnen, der wiederum gesetzlichen Vorgaben unterliegt. So wird in [7] ein ab 2020 geltendes Ziel für die Neuwagenflotte in der EU von 95 g CO₂/km festgelegt, was einem Verbrauch an Dieselkraftstoff von 3,6 l auf 100 km entspricht. Hierbei gelten allerdings Sonderregelungen: Zum Beispiel werden besonders verbrauchsarme Fahrzeuge stärker gewichtet. Außerdem ist der Grenzwert für einzelne Hersteller abhängig von der Fahrzeugmasse der Flotte. Je größer die Masse ist, desto höher ist der zulässige CO₂-Ausstoß, ab dem die Abgabe für Emissionsüberschreitung erhoben wird. Somit besteht auch ein erkennbares wirtschaftliches Interesse seitens der Fahrzeughersteller bereits innermotorisch die HC- und CO-Emissionen möglichst gering zu halten.

Die Simulation nimmt heutzutage eine wichtige Stellung im Motorentwicklungsprozess ein, da mit ihr der Umfang zeitaufwendiger und teurer Prüfstandversuche reduziert werden kann. Die 0D/1D-Simulation bietet sich hierbei als wichtiges Entwicklungswerkzeug an. Sie vereinbart einen geringen Rechenzeitbedarf und bietet durch die Verwendung von phänomenologischen Modellen dennoch eine hohe Vorhersagefähigkeit. Dadurch eignet sich die 0D/1D-Simulation für die Untersuchung unterschiedlicher Motorkonzepte für stationäre und transiente Bedingungen ohne Kenntnis der detaillierten Motorgeometrien. Somit lassen sich unter anderem Ladungsbewegungen und Turbulenz aber auch die Dieselverbrennung an sich simulieren. Basierend auf einem phänomenologischen Zweizonenmodell lassen sich aktuell Stickoxid- und Rußemissionen berechnen [8]. Eine Modellierung der HC- und CO-Emissionen ist jedoch bislang im Rahmen dieses Modells nicht möglich. Die Kenntnis dieser Emissionen ist jedoch für eine exakte Vorhersage des Kraftstoffverbrauchs unverzichtbar. Bei dem erreichten hohen Stand der Dieselmotorenteknik sind Verbesserungen des Kraftstoffverbrauchs nur noch mit hohem Aufwand zu erreichen. Oft sind mit verschiedenen Maßnahmen nur noch Reduktionen des Verbrauchs von wenigen Prozentpunkten möglich. Entsprechend ist es notwendig geworden den Kraftstoffverbrauch in der Simulation mit mindestens einer solchen Genauigkeit vorherzusagen zu können. Für eine derart präzise Vorhersage des Kraftstoffverbrauchs müssen die HC- und CO-Emissionen eines Motors zwingend berücksichtigt werden, da in verschiedenen Bereichen des Kennfelds über diese Emissionen bereits Energie der Magnitude der angestrebten Vorhersagegüte verloren geht.

In dieser Arbeit wird deshalb ein Modell zur Berechnung der HC- und CO-Emissionen für 0D/1D-Simulationen am Dieselmotor vorgestellt. Dieses Modell ermöglicht die Vorhersage dieser Rohemissionen für die Abgasnachbehandlung aber auch für deren energetische Betrachtung innerhalb des Brennraumes.

3 Stand der Technik

Im diesem Kapitel soll der aktuelle Stand der Technik dargelegt werden. Zunächst wird dabei auf Quellen und wesentliche Einflüsse auf HC- und CO-Emissionen, welche sich in der Literatur finden, eingegangen. Im Anschluss werden existierende Reaktionsmechanismen dargestellt, sowie bereits existierende Modelle zur Abbildung der Emissionen. Zuletzt soll das phänomenologische Modell nach Kožuch [8] sowie dessen Erweiterung nach Kaal [9] erläutert werden, da dieses Modell dem Stand der Technik in der quasidimensionalen Modellierung der Stickoxid- und Rußemissionen darstellt und das entwickelte HC/CO-Modell auf dieser Zweizonenmodellierung aufbaut.

3.1 Quellen und Einflussfaktoren von HC- und CO-Emissionen beim Dieselmotor

Für die Modellierung der Emissionen ist es zunächst essentiell, die wesentlichen lokalen Quellen und Einflussfaktoren für die Entstehung der Emissionen zu bestimmen und sich auf diese zu beschränken. Bereiche, in denen CO nur als Zwischenprodukt auftritt und durch Randbedingungen nahezu vollständig zu CO₂ weiteroxidiert, müssen nicht zwangsweise modelliert werden. Ein ähnliches Vorgehen findet sich bereits bei der dieselmotorischen Stickoxidmodellierung. Da thermisches NO den mit Abstand größten Anteil der Stickoxide ausmacht, wird praktisch in allen Modellen lediglich dessen kinetisch kontrollierte Bildung mit Hilfe des erweiterten Zeldovich-Mechanismus beschrieben [9].

Zunächst werden die wesentlichen Quellen und Einflussfaktoren von HC-Emissionen untersucht. Experimentelle Untersuchungen, die im Wesentlichen zu ähnlichen Ergebnissen kommen, finden sich hierzu in [10-13]. Als eine Hauptquelle werden HC-Emissionen durch Ausmagerung (engl. Overmixing) genannt [10-13]. Dies tritt in Bereichen auf, in denen durch Vermischung des eingespritzten Kraftstoffes mit der Brennraumluft ein sehr mageres Gemisch entsteht. Durch den hohen Luftüberschuss ist der Temperaturanstieg durch die Wärmefreisetzung des Kraftstoffes gering, was eine langsame Oxidation zur Folge hat. Als Kraftstoffverhältnis der mageren Zündgrenze ϕ_L wird in [13] ein Wert von 0,3 angegeben, in [11] wird für ϕ_L eine Spanne von 0,1 bis 0,3 für dieselmotorische Bedingungen angegeben. Für eine Konzentrationsverteilung des Sprays wie sie zum Beispiel in [13, 14] angenommen wird, sind diese Emissionen somit lokal dem äußeren Sprayrand zuzuordnen.

Für unterschiedliche Parametervariationen wird in den experimentellen Untersuchungen ein Anstieg der HC-Emissionen mit zunehmendem Zündverzug [11-13] festgestellt. Je länger der Zündverzug, umso mehr Zeit bleibt der Gemischaufbereitung, um Bereiche, die außerhalb der mageren Zündgrenze liegen, zu bilden. Ein direkter Zusammenhang zwischen der Menge an ausgemagertem Kraftstoff und der Mischungsrate, dem Zündverzug und der mageren Zündgrenze wird in [13] postuliert.

Eine Variation des Einspritzzeitpunktes wurde in [11] und [13] durchgeführt. In beiden Fällen konnten ein Anstieg der HC-Emissionen, ausgehend vom Einspritzzeitpunkt mit geringstem Zündverzug, bei längerem Zündverzug festgestellt werden [11]. Der Anstieg der HC-Emissionen ist dabei für spätere Einspritzungen deutlich höher als für frühere. Dies kann damit erklärt werden, dass für frühere Einspritzungen mehr Zeit für die Oxidation vorhanden ist und durch die fortschreitende Kompression die Temperaturerhöhung die Oxidation begünstigt.

Ein Einfluss des globalen Luftverhältnisses auf die HC-Emissionen wurde ebenso untersucht [10, 11, 13]. Durch den zunehmend mageren Betrieb des Motors ist ein Anstieg der HC-Emissionen zu verzeichnen. Es wird angenommen, dass sich dabei vermehrt lokal ausgemagerte Bereiche, in denen der Kraftstoff nur schlecht oxidiert, bilden. In [11] und [13] wird ein starker Anstieg der HC-Emissionen ebenso bei zu geringen Luftverhältnissen festgestellt, wenn der Motor nahe bzw. unterhalb der Stöchiometrie betrieben wird.

Die Untersuchungen aus [10, 11, 13] zeigen außerdem, dass sich die HC-Emissionen durch höhere Einlasstemperaturen, höhere Verdichtungsverhältnisse oder eine höhere Cetanzahl reduzieren lassen. Ein wesentlicher Effekt ist hierbei die Reduzierung des Zündverzuges, der wie bereits erwähnt den Anteil des ausmagernden Kraftstoffes reduziert.

Eine weitere Quelle der HC-Emission stellen wandnahe Bereiche dar, in denen durch die lokal geringeren Temperaturen sowie eine mögliche Interaktion zwischen Spray und Wand keine beziehungsweise nur eine stark reduzierte Oxidation von Kraftstoff stattfinden kann. In [11] wurden mehrere Motoren unterschiedlicher Hubvolumina untersucht. Mit zunehmendem Hubvolumen wurde dabei eine Abnahme der HC-Emissionen festgestellt, was die These des Wandeinflusses bestätigt, da bei kleineren Motoren der eingespritzte Kraftstoff schneller in Wandbereiche eintritt. Nimmt man eine Randzone mit konstanter Dicke an, in der die Temperaturen für die Kraftstoffoxidation zu gering sind, so würde diese bei kleineren Motoren einen größeren Anteil des Zylindervolumens einnehmen. In [13] wird eine Variation der Öl- und Kühlmitteltemperatur durchgeführt. Hierdurch kann ein Einfluss auf die Zylinderwandtemperaturen genommen werden. Mit höheren Zylinderwandtemperaturen ergeben sich dabei geringere HC-Emissionen. Dies wird darauf zurückgeführt, dass Wandverlöschungseffekte mit zunehmender Zylinderwandtemperatur abnehmen. Ähnliche Ergebnisse liefern auch neuere Untersuchungen für einen Motor mit Benzin-Direkteinspritzung [15].

Eine weitere Hauptquelle für HC-Emissionen stammt aus Kraftstoff, der nach dem Ende der eigentlichen Einspritzung langsam aus dem Injektor austropft und entsprechend nachfolgend als Injektortröpfeln bezeichnet wird (engl. injector dribble). Die experimentellen Untersuchungen in [11] und [12] umfassen die Verwendung von Injektoren mit unterschiedlichen Sacklochvolumina. In beiden Fällen konnte ein Anstieg der HC-Emissionen mit höherem Sacklochvolumen gemessen werden. Die HC-Konzentration im Abgas in Abhängigkeit des Sacklochvolumens lässt anhand der beiden Publikationen einen annähernd linearen Zusammenhang vermuten.

Experimentelle Untersuchungen zum Injektortröpfeln wurden außerdem in [16] durchgeführt. Hierbei wurde das Verhalten eines Einloch-Dieselinjektors in einer Druckkammer im Bereich des Endes der Einspritzung untersucht. Mit Hilfe von Röntgenstrahlen konnten Aufnahmen aus dem Inneren des Injektors gemacht werden. Diese zeigten, dass nach dem Schließen der Injektornadel Gasblasen innerhalb des Injektors vorlagen. Ebenso wurde der druckkammerseitige Bereich am Einloch-Injektor untersucht. Aufnahmen zeigten, dass es zu einem Austritt von Kraftstoff aus dem Injektor nach dem eigentlichen Ende der Einspritzung kommt. Durch die Gasblasen wurde folglich Kraftstoff aus dem Injektor verdrängt. In [16] werden zwei grundsätzlich mögliche Ursachen für die Existenz der Gasblasen innerhalb des Injektors genannt. Beim Schließen der Injektornadel kommt es zu einem starken lokalen Druckabfall. Fällt der Druck unter den Dampfdruck des Kraftstoffes, bilden sich Dampfblasen. Allerdings liegt der Dampfdruck deutlich unter den Drücken in der Druckkammer. Zudem müssten die gebildeten Blasen in sich zusammenfallen, wenn sich nach kurzer Zeit der Druck im Injektor dem Druck der Gaskammer angleicht. Dies ist allerdings nicht der Fall. Daher wird in [16] davon ausgegangen, dass nach dem Ende der Einspritzung Gas aus der Druckkammer in den Injektor gelangt und ein entsprechendes Kraftstoffvolumen verdrängt. Diese These wird dadurch gestützt, dass in einigen Hochgeschwindigkeitsaufnahmen die Bewegung der Blasen von der Düse in Richtung Injektorsackloch zu erkennen war. Die Untersuchungen in [16] umfassten auch eine Variation der Parameter Düsenlochdurchmesser, Einspritzdruck und Umgebungsdruck. Es konnte dabei ein Anstieg des Injektortröpfelns mit größerem Düsenlochdurchmesser, höherem Raildruck und geringerem Umgebungsdruck detektiert werden. [16]

In der Literatur finden sich auch Untersuchungen zum Injektortröpfeln an einem optisch zugänglichen Heavy-Duty Dieselmotor [17]. Ein wesentlicher Unterschied zu den Untersuchungen in der Druckkammer aus [16] besteht in der zeitlichen Änderung des Druckes innerhalb des Zylinders. Hierbei konnte gezeigt werden, dass sich das Phänomen des Injektortröpfelns grob in drei Bereiche einteilen lässt. Zunächst findet das unmittelbare Injektortröpfeln statt, welches kurz nach Ende der Einspritzung einsetzt. Im weiteren Verlauf des Arbeitsspieles kommt es zum spätphasen Injektortröpfeln, welches während der Expansion eintritt. Dieses ist nach [17] scheinbar mit dem Zylinderdruck verknüpft und fand in allen untersuchten Betriebspunkten bei einem Zylinderdruck von 12 bis 20 bar statt. Zuletzt findet das Blow-down-Injektortröpfeln statt, welches mit dem Öffnen der Auslassventile einsetzt. Aufgrund der sinkenden Zylindertemperatur mit fortschreitender Expansion lässt sich grundsätzlich sagen,

dass mit später einsetzendem Injektortröpfeln die Oxidationsmöglichkeit des austretenden Kraftstoffes geringer wird.

Eine kombinierte Untersuchung aus 3D-CFD-Simulation und Prüfstandsmessungen hinsichtlich der Quellen der HC-Emissionen in Heavy-Duty Dieselmotoren findet sich in [18]. Hierbei wurden mittels schnellem Flammenionisationsdetektor (FID) die HC-Emissionen im Auslasskanal kurbelwinkelaufgelöst gemessen. Ein Vergleich der Messung mit der Simulation zeigte, dass ein Großteil der HC-Emissionen aus dem Bereich des Feuerdecks, als der Nähe des Injektors, entstammt. Eine Berücksichtigung des Injektortröpfelns in der Simulation führte zu einer Verbesserung der quantitativen Vorhersage der HC-Emissionen. In [18] wird vermutet, dass 25 bis 50% des Sacklochvolumens zum Injektortröpfeln beitragen. Des Weiteren wird davon ausgegangen, dass, je nach Betriebspunkt, 75 bis 90% der gesamten HC-Emissionen auf Dribble zurückgeführt werden können. In [19] wurden die Untersuchungen aus [18] unter anderem hinsichtlich der Menge an Kraftstoff, die nach dem Ende der Einspritzung aus dem Injektor tritt, fortgeführt. Als Durchschnittswert wird angegeben, dass das Injektortröpfeln 18% des Sacklochvolumens umfasst.

Für CO-Emissionen finden sich gewisse Ähnlichkeiten zu den HC-Emissionen, was die Quellen der Emissionen anbelangt. Grundvoraussetzung für diese Quellen ist dabei, dass sich zunächst CO aus dem eingespritzten Kraftstoff bildet. In [20] werden die bereits für HC bekannten Quellen des Injektortröpfelns und des Ausmagerns genannt. Zusätzlich wird als wichtige Quelle CO aus lokal unterstöchiometrischen Bereichen genannt, was vor allem bei hoher Last auftritt. Des Weiteren lässt sich ein Einfluss von Wandeffecten auf die CO-Emissionen anhand bestehender Literaturquellen argumentativ begründen. Dieser Effekt wurde bereits für die HC-Emissionen ausgemacht. Ein Wandeinfluss auf die NO-Emissionen, welche im Wesentlichen aus thermischem NO bestehen, wurde in [21] gezeigt. Da es somit einen Effekt auf noch nicht vollständig oxidierten Kraftstoff (HC) sowie einen Effekt auf bereits verbrannte Bereiche hinter der Flamme (NO) gibt, lässt sich ebenso ein Effekt auf Bereiche, in denen durch unvollständige oder unvollkommene Verbrennung CO gebildet wurde, begründen. Die Tatsache, dass die kinetisch kontrollierte Oxidation von CO in einem Bereich zwischen der kinetisch kontrollierten Bildung von NO bzw. Oxidation von HC liegt, unterstreicht diese Argumentation.

Messungen zur Untersuchung einzelner Effekte auf die CO-Emissionen wurden in [10, 22-26] durchgeführt. Variationen des Luftverhältnisses wurden in [23] und [10] durchgeführt. Ein Anstieg der CO-Emissionen ist für einen sehr mageren Motorbetrieb sowie einen Betrieb in Richtung der Stöchiometrie erkennbar. Basierend auf den Ursachen der Emissionen ist der Anstieg auf CO durch Ausmagerung bzw. auf CO aus lokal fetten Bereichen zurückzuführen. Ein Anstieg von CO für vergleichsweise magere Betriebsbedingungen liegt somit vor, obwohl durch die höheren HC-Emissionen insgesamt weniger CO gebildet wird. Folglich muss die Weiterreaktion von CO zu CO₂ verstärkt gehemmt sein.

Verschiedene Parameter, die die Einspritzung betreffen, wurden ebenfalls untersucht [10, 24, 25]. Variationen des Einspritzzeitpunktes [10, 25] zeigen, dass eine Verschiebung der Einspritzung in Richtung spät zu höheren CO-Emissionen führen. Wie bereits für die HC-Emissionen kann die kürzere Zeitspanne bis zum Öffnen des Auslassventils als auch die geringeren Verbrennungstemperaturen als Ursachen genannte werden. Die durchgeführte Raildruckvariation in [25] zeigte mit zunehmendem Einspritzdruck eine Reduzierung der CO-Emissionen. Die bessere Gemischaufbereitung führt zu einer Reduzierung lokal fetter Regionen. Die Ergebnisse aus [24] zeigen ebenfalls eine Abnahme der CO-Emissionen mit steigender Einspritzrate.

Durch höhere Einlasstemperaturen lassen sich CO-Emissionen reduzieren [10, 23]. Ein höheres Potential zur Reduzierung bei gleicher Einlasstemperatur ergibt sich hierbei bei höherem Luftüberschuss. Hierbei profitiert die CO-Oxidation in lokal mageren Bereichen von der höheren Temperatur im Brennraum. Durch Verwendung einer Wassereinspritzung im Einlasskanal, ergibt sich der gegenteilige Effekt [23]. Durch die Verdampfung des Wassers werden die Brennraumtemperaturen abgesenkt, was zu einem Anstieg der CO-Emissionen führt.

Die Auswirkungen des Dralls auf die CO-Emissionen wurden in [22] untersucht. Demnach verringert ein erhöhtes Drallniveau die CO-Emissionen, wobei der Drall allerdings einen zwei- bis dreimal stärkeren Effekt auf die Rußemissionen hat. Nach [22] kann das Drallniveau zwei Quellen der CO-Emissionen beeinflussen: Mit einem höheren Drall ist davon auszugehen, dass es zu einem stärkeren Ausmagerungseffekt kommen kann. Durch die bessere Einmischung von Luft werden allerdings gleichzeitig lokal unterstöchiometrische Bereiche reduziert.

3.2 Reaktionskinetische Modellierung von HC- und CO-Emissionen

In diesem Kapitel werden Möglichkeiten zur reaktionskinetischen Modellierung der Emissionen vorgestellt. Unter ausreichend hohen Temperaturen sind für beide Emissionen die Oxidationsraten so hoch, dass in einer ersten Näherung von Konzentrationen im Gleichgewichtszustand ausgegangen werden kann. Zum Ende der Hochdruckphase hin sinken allerdings, bedingt durch die Expansion, die Brennraumtemperaturen, was zu einer kinetisch kontrollierten Oxidation führt. Diese hat einen wesentlichen Einfluss auf die Gesamtemissionen, da sie bestimmt welcher Anteil der Emissionen oxidiert und welcher Anteil bis zum Öffnen des Auslassventils bestehen bleibt.

Reaktionsmechanismen lassen sich im Wesentlichen in fünf Kategorien unterteilen, die sich vor allem hinsichtlich der Anzahl an Spezies und Reaktionen unterscheiden und nachfolgend mit abnehmendem Detaillierungsgrad beschrieben werden. Detaillierte Mechanismen versuchen alle wichtigen Elementarreaktionen und Einzelspezies zu beinhalten. Entsprechend hoch können die Anzahl an Spezies mit über 1000 bzw. die Anzahl der Reaktionen mit über 10000 sein [27, 28]. Bei den konzentrierten (engl. lumped) Mechanismen werden Moleküle ähnlicher chemischer Verbindung gruppiert und als eine repräsentative Spezies behandelt. Reduzierte Mechanismen stellen Vereinfachungen von detaillierten Reaktionsmechanismen dar, bei denen durch Methoden wie Annahmen von Quasistationarität oder Sensitivitätsanalysen die Anzahl an Spezies bzw. Reaktionen reduziert wird [29]. Skelettmechanismen fokussieren sich bei der Ableitung aus detaillierten Mechanismen auf einen bestimmten Anwendungsbereich, zum Beispiel die HCCI-Verbrennung [30], weshalb sich die Gültigkeit auf diesen beschränkt. Globale Reaktionsmechanismen stellen die Form mit der geringsten Anzahl an hinterlegten Spezies und Reaktionen dar. So wird die Oxidation unterschiedlicher Kohlenwasserstoffe in Flammen zum Beispiel in [31] durch lediglich eine Einschritt-Reaktionskinetik beschrieben. [32]

Detaillierte Mechanismen können mit ihrer Vielzahl an Spezies und Reaktionen ein breiteres Anwendungsspektrum abdecken. So beinhaltet der detaillierte Mechanismus [28, 33, 34] der CRECK Modeling Group des Politecnico di Milano neben einer Niedertemperatur- und einer Hochtemperaturoxidation auch die Ruß- und Stickoxidmodellierung. Jedoch geht mit dem hohen Detaillierungsgrad auch ein hoher Rechenaufwand einher. Für jede einzelne Spezies ist eine Differenzialgleichung zu lösen, weshalb die Rechenzeit ungefähr mit der dritten Potenz zur Anzahl an Spezies ansteigt [33].

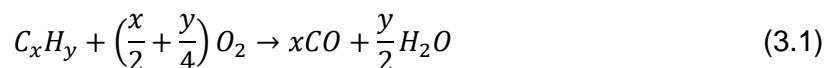
Für die HC-Reaktionskinetik beim Dieselmotor spielt der Ausgangskohlenwasserstoff bzw. das Gemisch unterschiedlicher Kohlenwasserstoffe, welches Dieseldieselkraftstoff repräsentieren soll, eine wichtige Rolle. Dieseldieselkraftstoff besteht aus einer Vielzahl unterschiedlicher Kohlenwasserstoffe, die sich in der Anzahl an Kohlenstoffatomen und ihrer Untergruppen differenzieren. In [35] werden detaillierte Analysen zur Zusammensetzung dreier unterschiedlicher, kommerziell erhältlicher Dieseldieselkraftstoffe gezeigt. Die Analysen zeigen, dass es signifikante Unterschiede in den Anteilen der einzelnen Kohlenwasserstoffe innerhalb der untersuchten Dieseldieselkraftstoffe gibt. Allen ist jedoch die Hauptzusammensetzung aus Aromaten, Cycloalkanen und n- bzw. iso-Alkanen gemein.

Um nicht jedes vorkommende Molekül des Dieseldieselkraftstoffes reaktionskinetisch modellieren zu müssen, werden Dieseldieselersatzkraftstoffe verwendet, die in ihren chemischen bzw. physikalischen Eigenschaften dem tatsächlichen Kraftstoff ähnlich sind. Entsprechend der jeweiligen Anwendung sollte der Ersatzkraftstoff hinsichtlich einer bzw. beiden Eigenschaften echtem Dieseldieselkraftstoff entsprechen. Hinsichtlich der Zündwilligkeit ist n-Heptan ein aus einer Komponente bestehender Ersatzkraftstoff, der aufgrund der ähnlichen Cetanzahl wie Dieseldieselkraftstoff

verwendet wird [36-38]. Aufgrund der unterschiedlichen Flüchtigkeit zwischen n-Heptan und echtem Dieselmotorkraftstoff kann es jedoch zu Unterschieden bei der Simulation bezüglich der flüssigen Sprayeindringtiefe und der Verdampfung kommen und folglich auch bei der Verbrennung. Als weiteren wesentlichen Unterschied ist zu erwähnen, dass für n-Heptan ein H/C-Verhältnis von 2,29 vorliegt, was über dem von Dieselmotorkraftstoff mit ungefähr 1,8 liegt [39]. Im Vergleich mit andern Ersatzkraftstoffen gibt es für n-Heptan eine Vielzahl an Reaktionsmechanismen, die über einen weiten Anwendungsbereich anhand von experimentellen Untersuchungen validiert wurden. [35]

Eine Übersicht zu Dieselmotorkraftstoffen, die aus mehreren Komponenten bestehen, wird in [33] gezeigt. Ersatzkraftstoffe aus zwei Komponenten werden durch ein Gemisch aus einem n-Alkan, wie n-Heptan oder n-Dekan, und einem Aromaten, wie Toluol, Xylole oder α -Methylnaphthalin definiert. Hierzu zählt der als IDEA-Kraftstoff bezeichnete Ersatzkraftstoff, welcher aus einem Gemisch aus 70 Vol.-% n-Dekan und 30 Vol.-% α -Methylnaphthalin besteht und dessen physikalische und chemische Eigenschaften Dieselmotorkraftstoff ähneln [35]. Ein auf diesem Gemisch basierender Mechanismus wurde im Rahmen von CFD-Simulationen eingesetzt und zeigte hinsichtlich der Ruß- und Stickoxidemissionen gute Übereinstimmungen mit den Messungen [40].

Die bereits genannten Mechanismen bieten sich grundsätzlich zur reaktionskinetischen Modellierung der HC-Emissionen an. Mit Ausnahme des globalen Einschrittmehanismus [31] enthalten diese auch Reaktionsgleichungen zur Beschreibung der CO Bildung bzw. Oxidation. In [31] wird über einen einfachen Zweischrittmehanismus für Kohlenwasserstoffe bereits die CO Bildung und Oxidation abgebildet:



Ein Dreischritt-CO-Modell, welches Bildung und Oxidation von CO berücksichtigt, findet sich in [38] und ist in Abbildung 2 schematisch dargestellt. Die CO-Bildung wird dabei direkt an den Kraftstoffumsatz gekoppelt. Dies entstammt der Vorstellung, dass bei der Verbrennung jedes Kohlenstoffatom zunächst zu CO oxidiert. CO kann nachfolgend zu CO₂ mit OH entsprechend der Reaktion



beziehungsweise mit O₂ entsprechend der Reaktion



oxidieren. Basis für das Dreischritt-CO-Modell bildet dabei die Annahme eines partiellen Gleichgewichtes der Wasserstoffverbrennung. [38]

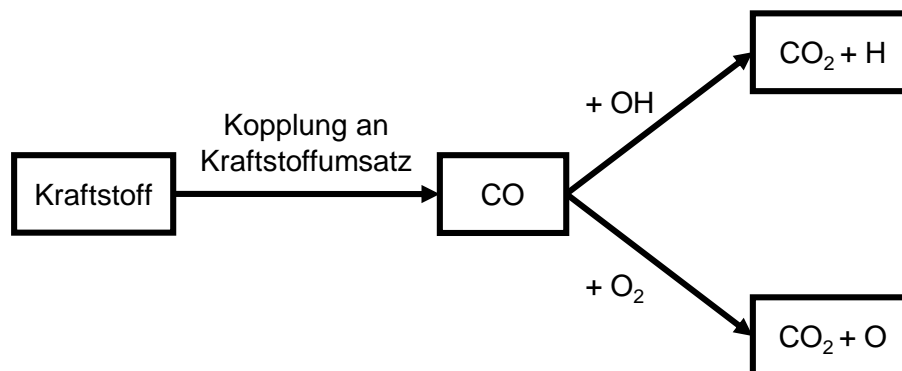


Abbildung 2: Dreischritt-Mechanismus zur Abbildung der CO-Bildung und CO-Oxidation [38]

Das in [41] vorgestellte quasidimensionale Verbrennungsmodell enthält beinhaltet eine CO Modellierung für den verbrannten Bereich. Diese beruht lediglich auf drei unterschiedlichen chemischen Reaktionen deren Kinetik ebenfalls durch Annahme von partiellen Gleichgewichten berechnet wird. Neben Reaktion (3.3), die aufgrund starker Nichtlinearitäten dreimal verwendet wird, beinhaltet das Modell die Reaktionen (3.4) und (3.5).



Für den Anwendungsfall, dass nicht die CO-Bildung anhand eines Kohlenwasserstoffes, sondern lediglich die CO-Oxidation hin zu CO_2 von Interesse ist, bieten sich sogenannte CO/ H_2 -Synthesegasmechanismen an. Auf den Dieselmotor übertragen würden sich solche Mechanismen für lokale Bereiche anbieten, in denen CO, welches durch unvollständiger oder unvollkommener Verbrennung gebildet wurde, nachträglich oxidieren kann. Eine Übersicht zu bestehenden CO/ H_2 -Mechanismen findet sich in [42]. Die aufgezeigten Mechanismen bestehen aus 13 bis 16 Spezies und 30 bis 59 Reaktionen. Die Mechanismen wurden mit Ergebnissen unterschiedlicher experimenteller Messungen hinsichtlich Zündverzugszeiten, Flammengeschwindigkeiten und Spezieskonzentrationen miteinander verglichen und bewertet. Die experimentellen Messungen unterscheiden sich dabei in den einzelnen Bereichen hinsichtlich Druck, Temperatur, stöchiometrischem Verhältnis und Verhältnis von CO zu H_2 . [42]

3.3 Emissionsmodelle zur Abbildung der HC- und CO-Emissionen bei Dieselmotoren

In diesem Kapitel werden existierende Modelle zur Simulation der HC- und CO-Emissionen dargestellt werden. Die Modelle beschränken sich dabei auf solche, welche im Rahmen der 0D/1D-Simulation verwendet werden können. 3D-CFD Simulationen mit implementierten Reaktionsmechanismen werden somit hier nicht erwähnt. Zunächst wird nachfolgend auf die Modellierung der HC-Emissionen eingegangen.

In [43] wird ein in Matlab/Simulink implementiertes Modell vorgestellt, mit dem ein Marine-Dieselmotor basierend auf physikalischen, semiphysikalischen, mathematischen und thermodynamischen Gleichungen simuliert wird. Die Beschreibung des Modells soll sich dabei nachfolgend auf die Abbildung der HC- und CO-Emissionen beschränken, auch wenn das Modell umfassender ist.

Das HC-Modell in [43] berücksichtigt HC-Emissionen, die durch Ausmagern und Injektortropfen gebildet werden und anschließend teilweise oxidieren können. Die Menge an ausgemagerten Kraftstoff wird dabei über einen Faktor an die Gesamtmenge des eingespritzten Kraftstoffs während des Zündverzuges gekoppelt. Zusätzlich gelangt ein Teil des Kraftstoffes durch Injektortropfen in den Brennraum. HC aus beiden Quellen kann nachträglich durch einen empirischen Oxidationsmechanismus oxidieren.

Im CO-Modell aus [43] werden Emissionen aus der Premixed- und der Diffusionsverbrennung berücksichtigt. Der Anteil an CO, der aus der Premixed-Verbrennung entsteht, basiert dabei auf Gleichgewichtsannahmen für O, OH, O_2 und CO_2 [44] sowie den CO-Reaktionen (3.3) und (3.4). CO, was durch die Diffusionsverbrennung gebildet wird, wird über einen Faktor an die Rußoxidation gekoppelt. [43]

Im Mittel werden mit dem Modell die gemessenen HC- und CO-Emissionen für die durchgeführten Last- und Drehzahlsprünge gut wiedergegeben. Für die stationären Bedingungen zwischen den Sprüngen liegen für die Messung jedoch deutliche Schwankungen der Emissionen vor, die von der Simulation nicht abgebildet werden. Inwieweit diese Abweichungen auf die Messung bzw. die Simulation zurückzuführen sind, wird allerdings nicht diskutiert. [43]

Ein quasidimensionales Modell zur Simulation von NO, Ruß und HC wird in [45] vorgestellt. In diesem wird der Einspritzstrahl in Pakete und Zonen unterteilt. Jede Zone wird dabei als offenes System behandelt für das Massen-, Energie- und Speziesgleichungen gelöst werden. Das Modell berücksichtigt dabei HC-Emissionen aus drei Quellen: Durch Ausmagerung, durch Wandeffekte und durch Injektortropfen. Als magere Zündgrenze wird ein Wert des Kraftstoffverhältnisses von $\phi_L = 0,2$ angenommen. Unverbrannter Kraftstoff, der sich außerhalb der

Zündgrenze befindet, wird für die Emissionsberechnung berücksichtigt. Die lokale Kraftstoffkonzentration über den Sprayradius $C(r)$ wird mit einem Ansatz aus [13] berechnet:

$$C(r) = C_c \left(1 - \left(\frac{r}{r_m} \right)^{1.5} \right) \quad (3.6)$$

Nach Gleichung (3.6) nimmt somit die Konzentration ausgehend von Sprayachse C_c zum Sprayrand ab. Eine nachträgliche thermische Oxidation des zunächst ausgemagerten Kraftstoffes wird im Modell berücksichtigt. Basierend auf der Annahme, dass in den sehr mageren Bereichen, die Variation der Sauerstoffkonzentration eher gering ist, findet eine Vereinfachung der HC-Reaktionsrate statt:

$$\frac{dm_{HC}}{dt} = -A \frac{m_{HC}^a}{V} \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad (3.7)$$

Bei der Berechnung des Kraftstoffes aus Wandeffekten findet in [45] keine Berechnung einer Wandzone statt, was dem Modellansatz nach Kaal [9] für die NO-Berechnung entsprechen würde. Stattdessen wird die Masse an unverbrannten Kraftstoff aus allen Zonen berechnet, die bei der Sprayausbreitung auf die Zylinderwand treffen würden (engl. overpenetrated fuel spray). [45]

$$m_{HC,op} = c_{op} \sum_{i=op}^{Zonen} m_{Krst,i} \quad (3.8)$$

In Gleichung (3.8) entspricht der Abstimmparameter c_{op} dem Anteil an Kraftstoff, der auf die Zylinderwand trifft und der unverbrannt den Brennraum verlässt. Für c_{op} wird dabei ein Wert von 0,02 angenommen. [45]

Als letzte Quelle werden im Modell HC-Emissionen durch Injektortropfeln berücksichtigt. Hierfür wird ein Ansatz gewählt, wie er auch in [46] zu finden ist. Demnach tritt ein Anteil des Kraftstoffes im Injektor aus dem Injektor aus und verbleibt als unverbrannter Kraftstoff. Für den Anteil des Kraftstoffes im Injektor, der aus dem Injektor austritt, wird dabei ein Wert von 0,12 festgelegt. [45]

Neben einem Vergleich der Ergebnisse des HC-Modells mit Messungen für eine Last- und eine Drehzahlvariation werden ebenso der Anteil der unterschiedlichen Quellen an den Gesamtemissionen für die Lastvariation gezeigt. Demnach nehmen für geringe Lasten vor allem HC-Emissionen durch Ausmagerung zu. HC-Emissionen aus Wandeffekten konnte nur im Bereich geringer Last festgestellt werden. Der prozentuale Anteil der HC-Emissionen durch Injektortropfeln nimmt mit ansteigender Last zu und macht trotz der Verwendung einer Sitzlochdüse den Großteil der Emissionen im Modell ab einer Last von 80% aus. [45]

Eine weitere Veröffentlichung der Modellierung von HC und CO aber auch NO und Ruß für ein quasidimensionales Verbrennungsmodell findet sich in [41]. Die Modellierung der HC-Emissionen entspricht dabei im Wesentlichen der aus [45]. Es werden als Quellen der Emissionen Ausmagern, Wandeffekte und Injektortropfeln modelliert. Der Anteil des Kraftstoffes, der durch Auftreffen auf die Brennraumwand als HC-Emission verbleibt und durch den Parameter c_{op} festgelegt wird, wird mit einem Wert von 0,015 etwas geringer eingeschätzt als in [45]. [41]

Der Vergleich zwischen Simulations- und Messergebnissen erfolgt mittels sieben Betriebspunkten, wobei vier der Volllast mit Drehzahlen von 1500 bis 4000 U/min entsprechen und drei einer Last von 50% mit Drehzahlen von 1500 bis 3000 U/min. Wie bereits in [45] wird auch in [41] der Anteil der unterschiedlichen Emissionsquellen angegeben. Auch hier ist der Anteil der HC-Emissionen durch Ausmagern bei geringerer Last deutlich größer als bei Volllast. Ebenso ist der Anteil der HC-Emissionen durch Injektortropfeln für Volllast größer als für 50% Last. HC-Emissionen durch Wandeffekte spielen bei 50% Last eine untergeordnete Rolle, sind jedoch die Hauptquelle der HC-Emissionen für den Betriebspunkt bei 1500 U/min und Volllast. Dass die Simulationsergebnisse aus [41] im Vergleich zu [45] einen höheren Einfluss des

Wandeffektes zeigen, kann anhand der Motorspezifikationen abgeleitet werden. Mit einer Bohrung von 69,9 mm ist der in [41] gewählte Motor deutlich kleiner als der Motor in [45] mit einer Bohrung von 130 mm.

Das CO-Modell aus [41] beruht auf der bereits in Kapitel 3.2 vorgestellten Reaktionskinetik, die auf den drei Reaktionsgleichungen (3.3), (3.4) und (3.5) sowie Gleichgewichtsannahmen beruht. Durch die Verwendung des Multizonenansatzes für den Einspritzstrahl findet bereits eine Modellierung der Inhomogenitäten hinsichtlich des Luftverhältnisses beziehungsweise der Temperatur statt. Weitere Effekte, wie zum Beispiel ein Einfluss wandnaher Bereiche, werden nicht berücksichtigt. Übertragen auf die Quellen der CO-Emissionen werden somit primär CO aus lokal fetten Bereichen sowie CO durch Ausmagerung abgebildet. Ein Vergleich zwischen Simulation und Messung erfolgt anhand der gleichen Betriebspunkte wie für das HC-Modell. Da lediglich die Gesamtemissionen des CO-Modells dargestellt sind, lassen die Ergebnisse für diese Emissionen keinen Rückschluss auf die Quelle der Emissionen zu. [41]

3.4 Phänomenologisches Zweizonenmodell nach Kožuch und Erweiterung nach Kaal

In der Vergangenheit ist bei der Modellierung der Dieselemissionen ein Schwerpunkt bei den Sickoxiden zu finden, was sich an der Mehrzahl von Modellen zeigt [8, 47-49]. Das Modell nach Kožuch kann dabei als Stand der Technik bei diesen aufgrund der guten Vorhersagefähigkeit und des phänomenologischen Ansatzes angesehen werden. Dieses Modell wurde von Kaal erweitert [9]. Da das entwickelte HC/CO-Modell auf den Modellen nach Kožuch und Kaal aufbaut, werden diese Modelle nachfolgend dargestellt.

Die Zustände innerhalb des Brennraums bei der dieselmotorischen Verbrennung sind von starken Inhomogenitäten, vor allem hinsichtlich der lokalen Temperatur sowie des lokalen Luftverhältnisses, geprägt. Die zentrale Gleichung der chemischen Reaktionskinetik zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit bildet die Arrhenius Gleichung, benannt nach Svante Arrhenius [50]:

$$k = A \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \tag{3.9}$$

Nach Gleichung (3.9) liegt somit zwischen der Reaktionsgeschwindigkeit einer chemischen Reaktion und Reaktionstemperatur ein exponentieller Zusammenhang vor. Aufgrund dieser exponentiellen Abhängigkeit sind einzonige Modelle zur Emissionsmodellierung gänzlich ungeeignet. Das Emissionsmodell nach Kožuch, welches schematisch in Abbildung 3 dargestellt ist, versucht die Inhomogenitäten im Brennraum durch eine zweizonige Modellierung abzubilden. Für eine detaillierte Abbildung, die auch Enthalpie- und Wandwärmeströme enthält, sei auf [8] verwiesen.

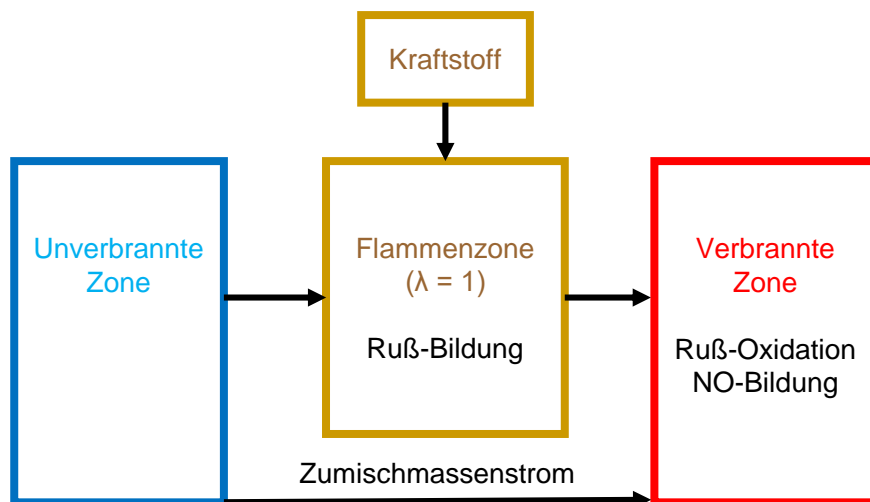


Abbildung 3: Schema des Zweizonenmodells zur Stickoxid- und Rußberechnung nach Kožuch [8]

Das phänomenologische Emissionsmodell nach Kožuch teilt den Brennraum in eine kalte unverbrannte Zone und eine heiße verbrannte Zone auf. Beide Zonen sind durch eine infinitesimal dünne, masselose Flammenzone voneinander getrennt. Der Gesamtmassenstrom in die verbrannte Zone setzt sich aus zwei Massenströmen zusammen. Ein Massentransport erfolgt durch die Flammenzone, wobei die Verbrennung stöchiometrisch modelliert wird. Somit liegt hier eine Koppelung des Massenstroms am Brennverlauf vor. Ein zweiter Massentransport erfolgt durch die Zumischung von der unverbrannten in die verbrannte Zone nach Gleichung (3.10). [8]

$$g = c_g \cdot \rho_{uvz} \cdot u_{Turb,g} \cdot V_{vz}^{2/3} \cdot Anz_D + c_{ga} \cdot \frac{dm_B}{d\varphi} \cdot 6 \cdot n \quad (3.10)$$

Die Zumischung besteht somit aus einem turbulenz- und einem brennverlaufsproportionalen Term. Die Berechnung der turbulenten Geschwindigkeit berechnet sich auf Basis eines k- ϵ -Modells. Da die thermische Stickoxidbildung erst ab relativ hohen Temperaturen einsetzt [47, 51], beschränkt sich die Stickoxidmodellierung auf die verbrannte Zone, wobei hierfür der Zeldovich-Mechanismus Anwendung findet. [8]

Eine Erweiterung des Modells nach Kožuch wurde von Kaal entwickelt [9, 52]. Die Erweiterung umfasst zum einen den Einfluss durch lokal fette Bereiche, zum anderen den Einfluss unterschiedlichen Zylinderwandtemperaturen auf die NO-Bildung. Im Modell nach Kožuch kommt es zu einer Überschätzung der Stickoxidemissionen, wenn der Motor in einem Bereich nahe der Stöchiometrie betrieben wird. Kaal erweiterte hierzu das Modell durch Einführung einer fetten Zone. Diese wird mit einer reduzierten Temperatur und einer unterstöchiometrischen Zusammensetzung modelliert, was zu einer reduzierten Stickoxidbildung im Modell führt. Der Anteil der fetten Zone wird dabei mittels Funktion des globalen Luftverhältnisses nach Gleichung (3.11) modelliert. [9]

$$a = -\cos(A \cdot \lambda \cdot \pi + P \cdot \pi) + O \quad (3.11)$$

Kaal zeigte außerdem einen Einfluss der Zylinderwandtemperaturen auf die Stickoxidemissionen, der bislang unzureichend berücksichtigt wurde. Hierfür wurde das Modell nach Kožuch um eine Randzone erweitert, in der aufgrund der geringeren Temperaturen im Bereich der Brennraumwände keine Stickoxidbildung stattfindet. Die Randdicke an Kolben, Laufbuchse und Zylinderkopf hängt von deren jeweiligen Temperaturen ab und wird nach Gleichung (3.12) berechnet. [9]

$$b_{NO} = F \cdot \left(\frac{T_{Wand}}{400 \text{ K}} \right)^E + C \quad (3.12)$$

Die in diesem Kapitel genannten Modelle nach Kožuch und Kaal bilden Inhomogenitäten ab, die auch für die Modellierung der HC- und CO-Emissionen eine bedeutende Rolle spielen. Zum einen ist eine Unterscheidung zwischen einer kalten, unverbrannten und einer heißen verbrannten Zone wichtig, da chemische Reaktionen eine starke Temperaturabhängigkeit aufweisen. Außerdem ist vor allem für die CO-Emissionen ein starker Einfluss durch unterstöchiometrische Bereiche zu erwarten, der ebenso modelliert werden muss. Analog zur Randzone bei der Stickoxidmodellierung ist ebenso ein Einfluss wandnaher Bereiche auf die HC- und CO-Emissionen zu erwarten. Im Gegensatz zum NO-Modell ist allerdings in diesem Bereich nicht die Emissionsbildung, sondern die Oxidation der Emissionen gehemmt. Zuletzt, und dies betrifft das HC- und das CO-Modell, sind geeignete Reaktionsmechanismen, analog zum Zeldovich-Mechanismus, zur Beschreibung der kinetisch kontrollierten Oxidation nötig.

4 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen

In diesem Kapitel werden die wesentlichen Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen, die der Modellierung zugrunde liegen, dargestellt. Hierbei handelt es sich um jene Messungen eines Pkw-Dieselmotors, die im Rahmen eines Forschungsprojektes durchgeführt wurden und von Kaal zur Modellierung verwendet wurden [9, 21]. Auf diese Quellen wird im Wesentlichen für die Beschreibung des vermessenen Motors sowie der verwendeten Messgeräte zurückgegriffen. Im Anschluss werden die wichtigsten Messergebnisse hinsichtlich der HC- und CO-Emissionen dargestellt. Neben einer Übersicht der Emissionen im Kennfeld werden die Ergebnisse einer Variation der Brennraumwandtemperatur und des Luftverhältnisses dargestellt.

4.1 Daten des verwendeten Versuchsmotors

Die Messdaten zur Erstellung des HC/CO-Modells entstammen einem Motor der Daimler AG. Es handelt sich hierbei um eine modifizierte Euro 5 Variante des OM 642, einem 3,0-l-V6-Dieselmotor mit einstufiger VTG-Abgasturboaufladung und Common-Rail Einspritzsystem. Im Wesentlichen unterscheidet sich der Versuchsmotor vom Serienmotor durch einen speziellen Kolben, der das Verdichtungsverhältnis reduziert. Eine Zusammenfassung der wichtigsten Kenngrößen des Motors findet sich in Tabelle 1. [9]

Tabelle 1: Kenngrößen des vermessenen Motors OM 642 [21, 53]

Zylinderzahl	V6
Bankwinkel	72°
Bohrung	83 mm
Hub	92 mm
Hubraum	2987 cm ³
Ventile / Zylinder	4
Verdichtungsverhältnis (thermodyn.)	Reduziert auf 14,3:1
Maximaler Einspritzdruck	1600 bar

4.2 Messaufbau und Messgeräte

Der Motor wurde mit insgesamt 19 Temperatursensoren und 12 integralen Druckaufnahmestellen ausgestattet, wodurch eine vollständige Vermessung des Luftpfades an allen wichtigen Stellen gewährleistet ist. Jeder Zylinder wurde mit einer eigenen Hochdruckindizierung ausgestattet. Zudem befinden sich an jeder Zylinderbank Niederdruckindizierungen in der Mitte des Ladeluftverteilers beziehungsweise des Auslasskrümmers. In Abbildung 4 werden die wichtigsten Messstellen dargestellt. [21]

4 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen

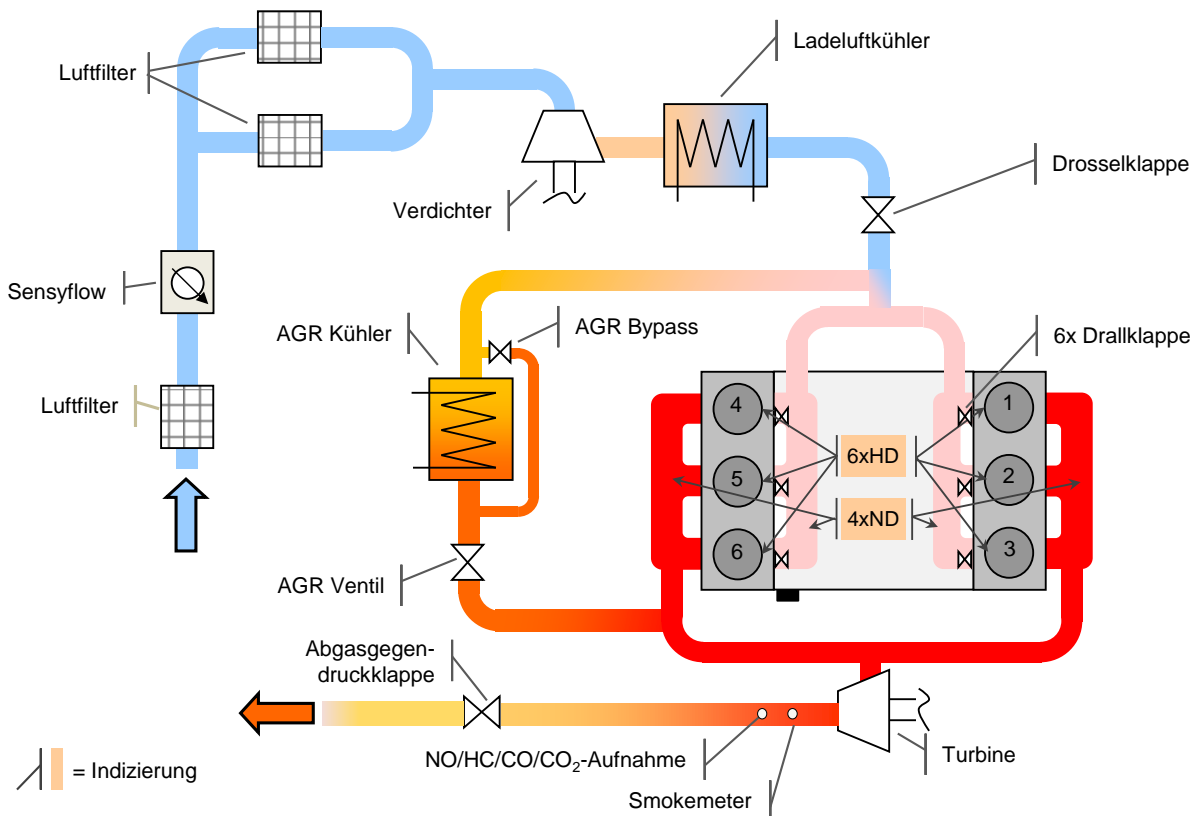


Abbildung 4: Aufbau und Messstellen des OM 642 [21]

Für die Hochdruckindizierung wurden ungekühlte piezoelektrische Hochdrucksensoren des Typs GU23D der Firma AVL verwendet, die zwischen den Auslassventilen platziert wurden. Für die Einlass- bzw. Auslasseite wurden piezoresistive Absolutdrucksensoren des Typs 4005BA5 bzw. 4045A der Firma Kistler verwendet. Um eine Beschädigung durch zu hohe Abgastemperaturen zu verhindern, besitzt der Sensor auf der Auslasseite einen Umschaltadapter. Für die Luftmassenmessung wurde ein Sensyflow Heißfilm-Anemometer der Firma ABB verwendet. Zur Erzeugung eines möglichst laminaren Luftstroms wurde ein entsprechend langes Beruhigungsrohr verwendet. Zur Bestimmung des Kraftstoffmassenstroms wurde eine Kraftstoffwaage vom Typ 733s der Firma AVL verwendet. [21]

Zur Abgasanalyse wurde eine gewöhnliche Abgasmessanlage verwendet, um die wichtigsten Abgaskomponenten zu bestimmen. Die gemessenen Komponenten des Abgases, sowie das dazugehörige Messgerät, findet sich in Tabelle 2.

Tabelle 2: Gemessene Abgaskomponenten und entsprechende Messgeräte

Komponente	Messgerät
CO und CO ₂	Nichtdispersiver Infrarot-Analysator (NDIR)
HC	Flammenionisations-Detektor
NO	Chemilumineszenz-Detektor (CLD)
O ₂	Paramagnetischer Sauerstoff Detektor (PMD)
Partikel	Smokemeter

Da für diese Arbeit die Modellierung der HC- und CO-Emissionen im Vordergrund steht, beschränkt sich die Beschreibung der Messverfahren auf die wichtigsten Aspekte des FID und des NDIR. Zunächst soll das Verfahren zur Messung der HC mittels FID dargestellt werden. Im Abgas finden sich eine Vielzahl unterschiedlicher Kohlenwasserstoffverbindungen. Mit Hilfe

eines FID lassen sich nicht die einzelnen Kohlenwasserstoffe nachweisen sondern ein Summenergebnis dieser [54]. Das Messprinzip wird nachfolgend anhand Abbildung 5 erklärt.

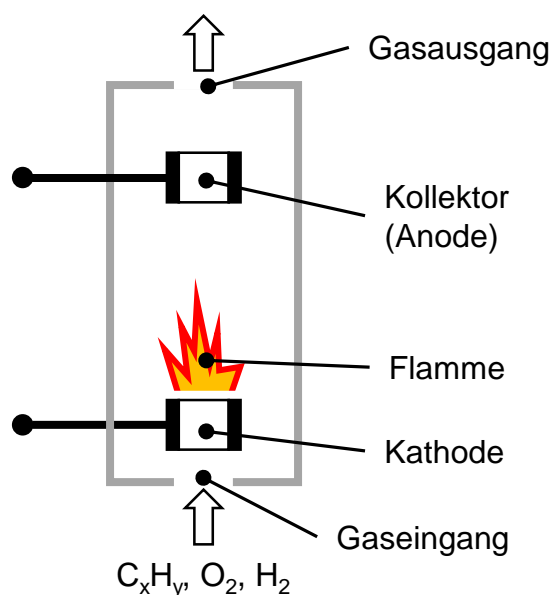


Abbildung 5: Flammenionisationsdetektor zur Messung der HC-Emissionen

Aus dem Abgas wird ein Teilmassenstrom entnommen und dem FID zugeführt. Für die Messung von Kohlenwasserstoffen im Abgas von Dieselmotoren ist es wichtig die Abgasprobe zu beheizen, da es sonst zu einer Auskondensation von Kohlenwasserstoffen kommen kann, was zu einer fehlerhaften Messung führen würde. Zusammen mit dem Abgas werden synthetische Luft und ein Gasgemisch, welches Wasserstoff beinhaltet, in den FID geleitet, in dem eine Flamme in einem elektrischen Feld zwischen Anode und Kathode brennt. Dabei kommt es zu einer Ionisierung. [54, 55]



Hierbei liefert nach [55] nur eines von 10^5 Kohlenstoffatomen ein Ion. Diese transportieren zwischen der Anode und Kathode einen Strom, der letztlich dem Messsignal entspricht. Kalibriert wird das Messgerät mithilfe eines Nullgases, zum Beispiel Stickstoff, und eines Referenzgases, für das häufig Propan verwendet wird.

Mit Hilfe des NDIR erfolgt die Messung des CO im Abgas. Bei diesem Messverfahren wird die Eigenschaft von Gasen, Infrarot-Strahlung in einem charakteristischen Wellenlängenbereich zu absorbieren, genutzt. Das Messprinzip wird anhand von Abbildung 6 erklärt.

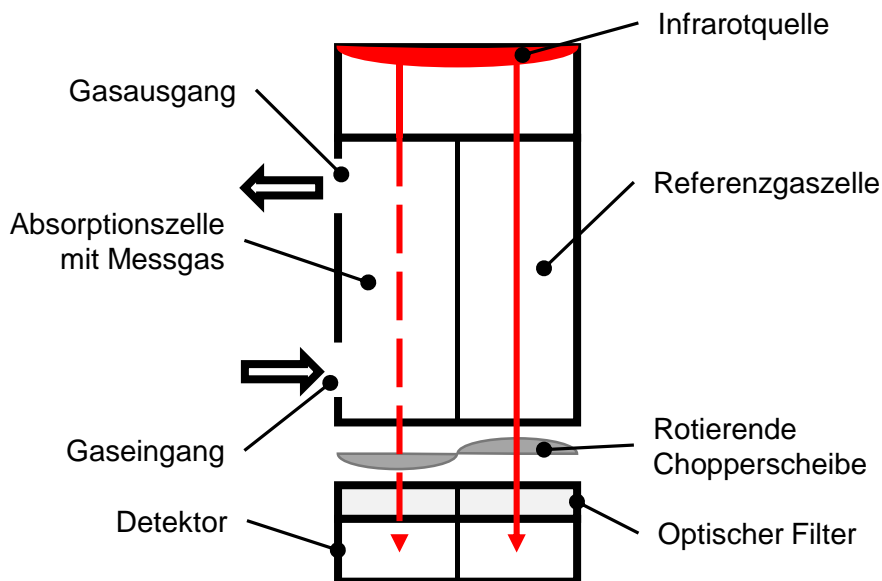


Abbildung 6: Nichtdispersiver Infrarot-Analysator zur Messung von CO und CO₂

Der NDIR-Analysator besitzt eine zweigeteilte Messzelle, die von einer Infrarotquelle durchstrahlt wird. Ein Teil der Messzelle ist mit einem nicht absorbierenden Referenzgas, wie zum Beispiel Stickstoff, gefüllt. Der andere Teil wird vom Proben gas durchströmt. Hierbei wird ein zur Konzentration des untersuchten Schadstoffes proportionaler Anteil der Strahlungsenergie im charakteristischen Wellenbereich des Schadstoffes absorbiert. Auf der gegenüberliegenden Seite der Infrarotquelle befindet sich der Detektor, der aus zwei Kammern besteht, die Proben des zu untersuchenden Schadstoffes enthalten und zum Beispiel mittels Membran voneinander getrennt sind. Durch die Differenz der ankommenden Strahlung kommt es zu einer unterschiedlichen Absorption in den beiden Kammern, die zu einem Druckunterschied zwischen den beiden Kammern führt. Die folglich Auslenkung der Membran dient als Maß der Schadstoffkonzentration des Proben gas. Durch eine rotierende Chopperscheibe wird die Infrarotstrahlung zyklisch unterbrochen, was zu einer wechselnden Auslenkung und somit zu einer Modulation des Sensorsignals führt. Aufgrund der Querempfindlichkeit gegenüber Wasserdampf wird das Proben gas typischerweise getrocknet, bevor es den NDIR-Analysator durchströmt. [55, 56]

4.3 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen bezüglich HC- und CO-Emissionen

In diesem Kapitel werden die Messergebnisse dargestellt, die für den Einfluss auf die HC- und CO-Emissionen wesentlich sind. Hierbei wird neben den Emissionen für das Motorkennfeld auch der Einfluss der Brennraumwandtemperatur, die über eine Variation der Öl- und Kühlmitteltemperatur gesteuert wird, untersucht. Eine weitere Variation betrifft das Luftverhältnis für einen Vollastbetriebspunkt.

4.3.1 Motorkennfeld

Der in Kapitel 4.1 vorgestellte Prüfling wurde von Sosio im Rahmen eines abgeschlossenen Forschungsprojektes [21] an mehreren Kennfeldpunkten in einem Drehzahlbereich von 850 bis 3200 U/min vermessen. Die Messpunkte im Motorkennfeld sind in Abbildung 7 dargestellt.

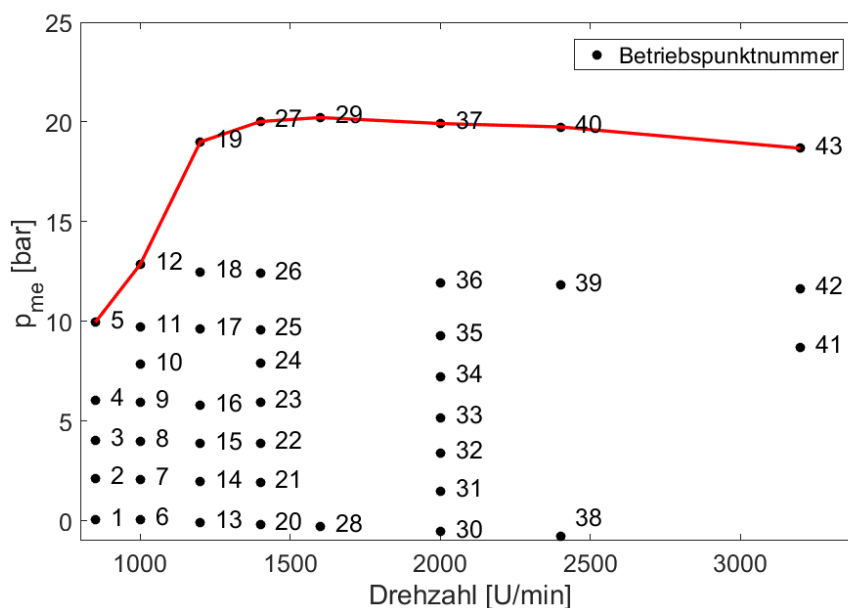


Abbildung 7: Betriebspunkte der Kennfeldvermessung des Versuchsmotors OM 642

Der Motor wurde mit einer, für den NEFZ typischen, Applikation hinsichtlich der Abgasrückführung (AGR) betrieben. Hierbei sei angemerkt, dass dieser Zyklus zwar vom WLTC abgelöst wurde, jedoch zur Zeit der Durchführung der Messungen dem aktuellen Prüfzyklus entsprach [21]. Im NEFZ relevanten Teillastbereich bei relativ niedrigen Drehzahlen sorgt diese Applikation mit hohen AGR-Raten für ein relativ geringes Luftverhältnis. Dies zeigt das gemessene Lambda-Kennfeld des Versuchsmotors in Abbildung 8. Hinsichtlich eines geringen Luftverhältnisses ist ein weiterer relevanter Betriebsbereich, der Bereich des Eckdrehmomentes, erkennbar. In diesem Bereich kommt es zu einer Gemischanfettung um den Ladedruck der Abgas-turboaufladung und somit das maximale Motordrehmoment zu erhöhen. Durch den höheren Abgasmassenstrom und die höhere Abgasenthalpie kann die Turbinenleistung gesteigert werden. [57]

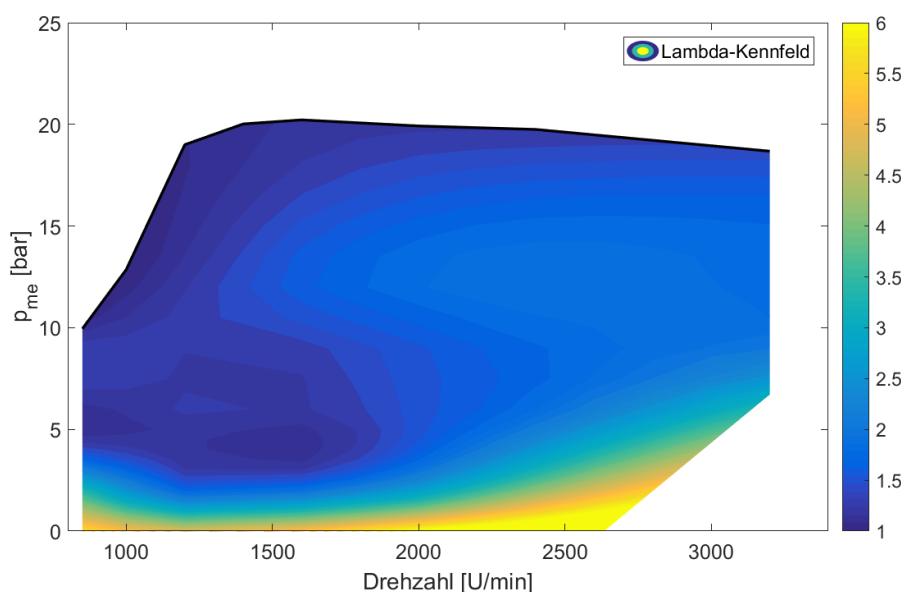


Abbildung 8: Lambda-Kennfeld des Versuchsmotors OM 642

Wie sich anhand der Arrhenius Gleichung (3.9) erkennen lässt, ist die Brennraumtemperatur ein entscheidender Faktor für die Oxidation der HC- und CO-Emissionen. Für ausreichend hohe Temperaturen ist für magere Bereiche innerhalb des Brennraums mit einer ausreichend

schnellen Oxidationskinetik zu rechnen. Als Referenzwert für die Oxidationsgeschwindigkeit in den unterschiedlichen Betriebspunkten ist in Abbildung 9 die maximale Massenmitteltemperatur im Motorkennfeld dargestellt. Hierbei sei darauf verwiesen, dass es sich hierbei nicht um gemessene Werte, sondern um Ergebnisse der Simulation handelt. Auch wenn es durch das inhomogene Brennverfahren beim Dieselmotor zu einer inhomogenen Temperaturverteilung innerhalb des Brennraumes kommt, so kann die maximale mittlere Brennraumtemperatur dennoch als Indikator für die Geschwindigkeit der Oxidationskinetik angesehen werden. Aus Abbildung 9 ist ersichtlich, dass es einen gewissen Zusammenhang gibt, zwischen der Motorlast und der maximalen Massenmitteltemperatur gibt. Dies ist im Wesentlichen auf den stärkeren Luftüberschuss im Niedriglastbereich zurückzuführen. Für die HC- und CO-Emissionen lässt sich daher schlussfolgern, dass eine reduzierte Reaktionskinetik als Quelle der Emissionen mit abfallender Last einen stärkeren Einfluss hat.

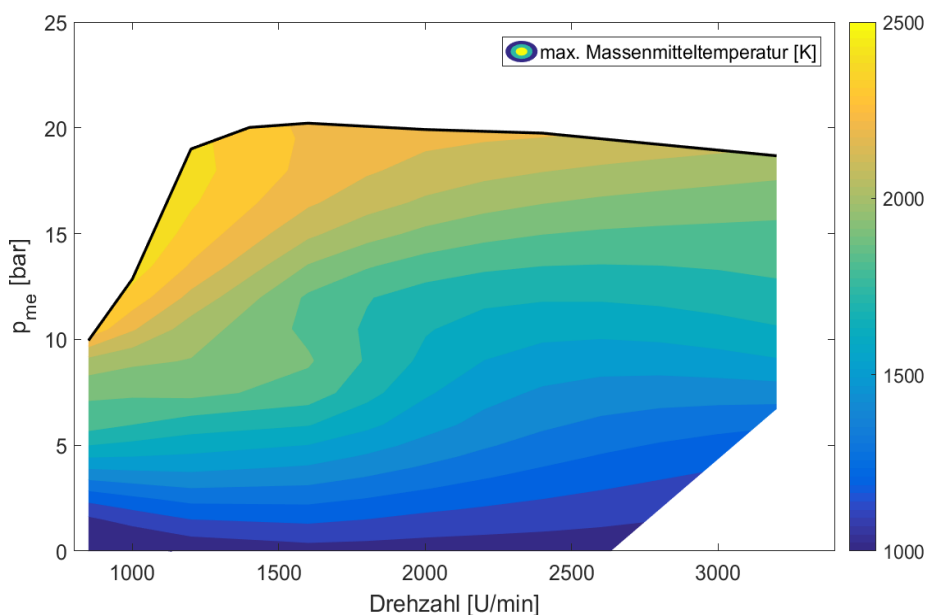


Abbildung 9: Maximale Massenmitteltemperatur im Kennfeld des Versuchsmotors OM 642

Die gemessenen Emissionen, zunächst die HC-Emissionen, werden nachfolgend dargestellt und analysiert. In Abbildung 10 sind die gemessenen HC-Emissionen zum einen in der Einheit ppm dargestellt, zum anderen als Anteil der Kraftstoffenergie $x_{Krst,HC}$, der in diesen Emissionen gespeichert ist. Dieser Anteil berechnet sich unter Zuhilfenahme des unteren Heizwertes des Referenzgases Propan C_3H_8 nach Gleichung (4.2).

$$x_{Krst,HC} = \frac{(m_{HC,A0} - m_{HC,ES}) \cdot H_{u,C_3H_8}}{m_{Krst} \cdot H_{u,Krst}} \quad (4.2)$$

Abbildung 10 kann entnommen werden, dass im untersuchten Motorkennfeld primär ein Zusammenhang zwischen der Motorlast und den HC-Emissionen erkennbar ist. Während sich im hohen und mittleren Lastbereich die Emissionen auf einem niedrigen Niveau bewegen, ist im niedrigen Lastbereich ein deutlicher Anstieg mit abfallendem Mitteldruck erkennbar. Hinsichtlich der Tendenzen verhalten sich die beiden Darstellungen – Emissionen in ppm und Anteil der Kraftstoffenergie in den Emissionen – in Abbildung 10 ähnlich. Es treten somit vor allem in den Bereichen verstärkt HC-Emissionen auf, in denen die Reaktionskinetik durch geringere Brennraumtemperaturen verlangsamt ist. Für die HC-Emissionen hat die Gemischanfettung im Bereich des Eckdrehmomentes, siehe Abbildung 8, einen vernachlässigbaren Einfluss. In den Untersuchungen von [11] wird ein starker Anstieg der HC-Emissionen unterhalb eines kritischen Luftverhältnis von $\lambda \approx 1,1$ angegeben, was in diesen Betriebspunkten unterschritten wird. Da es jedoch seit den Untersuchungen von [11] deutliche Weiterentwicklungen

des Einspritzsystems, zum Beispiel des maximalen Einspritzdruckes, und damit der Gemischaufbereitung gab, ist mit einer Verschiebung dieses kritischen Luftverhältnisses hin zu geringeren globalen Luftverhältnissen zu rechnen [56].

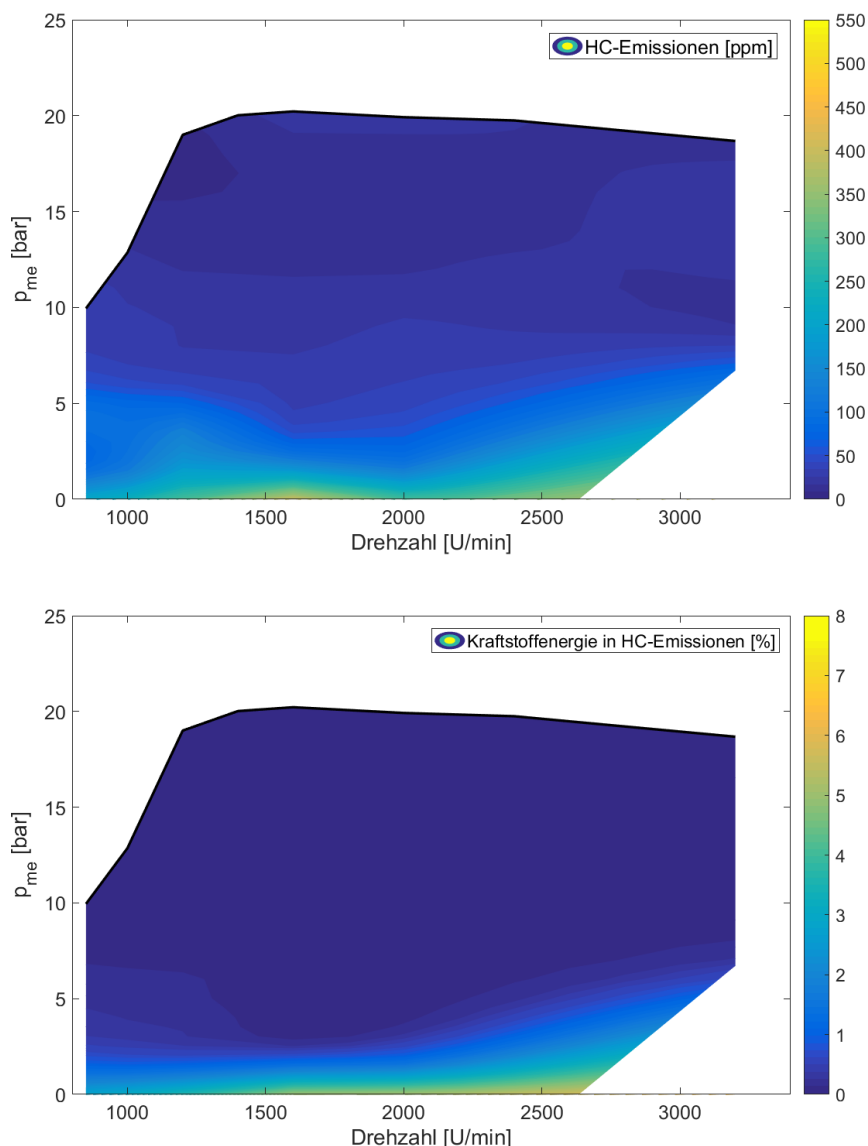


Abbildung 10: oben: Gemessene HC-Emissionen im Kennfeld des Versuchsmotors OM 642; unten: Anteil der Kraftstoffenergie in den HC-Emissionen

Eine, zu den HC-Emissionen, analoge Betrachtung der CO-Emissionen im Motorkennfeld ist in Abbildung 11 dargestellt. Die Berechnung des Anteils der Kraftstoffenergie in den CO-Emissionen $x_{Krst,CO}$, erfolgt entsprechend Gleichung (4.3) und somit analog zu den HC-Emissionen.

$$x_{Krst,CO} = \frac{(m_{CO,A0} - m_{CO,ES}) \cdot H_{u,CO}}{m_{Krst} \cdot H_{u,Krst}} \quad (4.3)$$

Bezüglich der Emissionen in ppm ist vor allem der Bereich des Eckdrehmomentes markant, in dem mit Abstand die höchsten Emissionen verzeichnet werden. In diesem Bereich liegen die für das Kennfeld geringsten Luftverhältnisse vor. Dies führt zu größeren, lokal unterstöchiometrischen Bereichen, die für den Anstieg der Emissionen verantwortlich sind. Analog zu den HC-Emissionen lässt sich ein weiterer Anstieg hin zu niedrigen Lasten erkennen. Die Emissionen liegen zwar in der ppm-Betrachtung deutlich unter denen des Eckdrehmomentes, entsprechen jedoch einem ähnlichen Anteil der Kraftstoffenergie. Dies ist auf den höheren Luftüberschuss im Niedriglastbereich zurückzuführen. Im Bereich höherer Drehzahl und mittlerer

4 Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen

bis hoher Last befinden sich die geringsten CO-Emissionen innerhalb des vermessenen Kennfeldes. Eine gute CO-Oxidation in diesen Bereichen kann zum einen auf ein ausreichend mageres Luftverhältnis sowie ausreichend hohen Brennraumtemperaturen zurückgeführt werden, wie aus Abbildung 8 und Abbildung 9 ersichtlich wird.

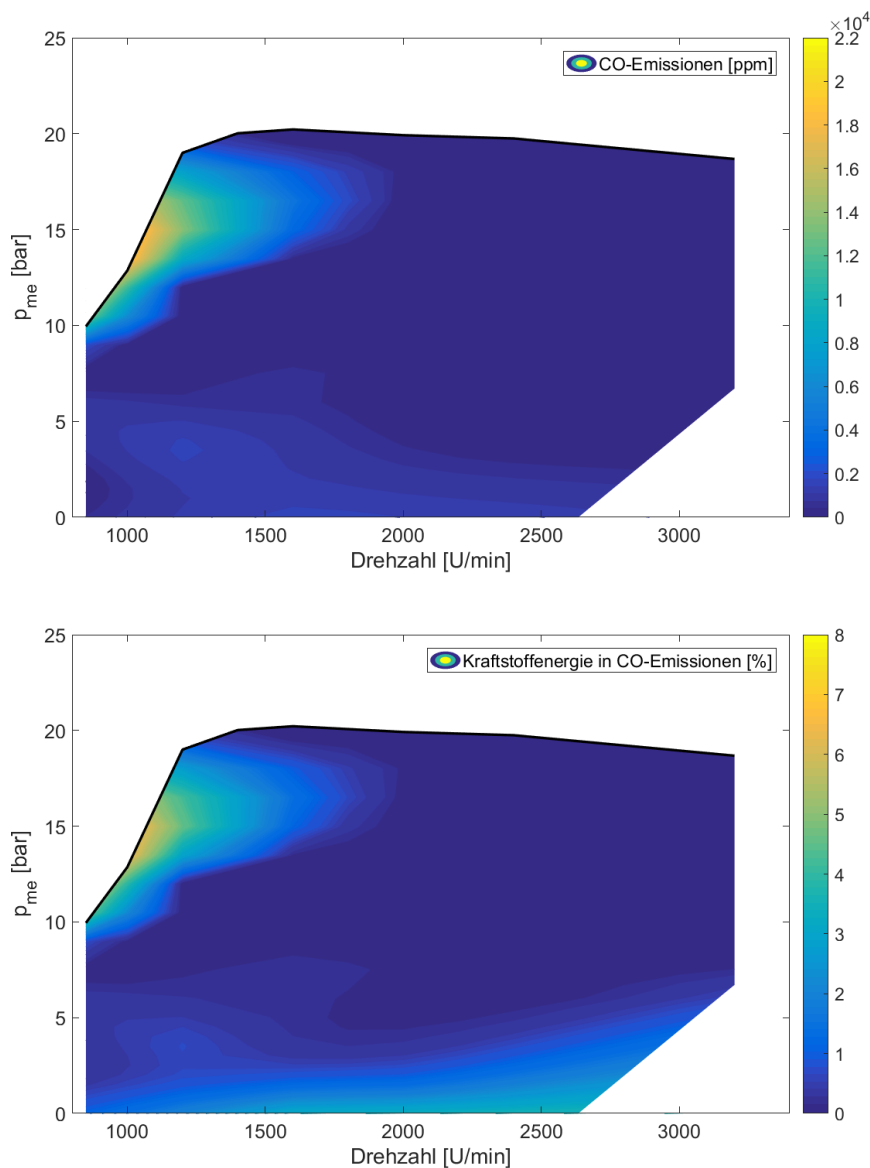


Abbildung 11: oben: Gemessene CO-Emissionen im Kennfeld des Versuchsmotors OM 642; unten: Anteil der Kraftstoffenergie in den CO-Emissionen

Zusammenfassend lässt sich somit sagen, dass für den untersuchten Motor der Niedriglastbereich für die HC- und CO-Emissionen relevant ist. Der Bereich des Eckrehmomentes, in dem die geringsten Luftverhältnisse auftreten, spielt lediglich für die CO-Emissionen eine Rolle. Ein Anstieg der HC-Emissionen ist hier nicht zu verzeichnen. Bereiche mit hohen Brennraumtemperaturen und ausreichend magerem Luftverhältnis zeigen für beide Emissionen die geringsten Absolutwerte hinsichtlich der Betrachtungen in ppm und in Anteil an Kraftstoffenergie in den Emissionen. Hierbei sei angemerkt, dass für den transienten Betrieb sich die kritischen Bereiche im Kennfeld verschieben können. So können zum Beispiel bei einem Lastsprung hin zu höheren Lasten ebenso verstärkt CO-Emissionen aus lokal fetten Bereichen auftreten, wenn noch nicht ausreichend Ladedruck bereitsteht. Als ebenso kritisch für die Emissionen bei transienten Vorgängen kann die Trägheit der AGR-Rate angesehen werden.

4.3.2 Variation der Brennraumwandtemperatur

In den experimentellen Untersuchungen von [21] wurde auch eine Variation der Brennraumwandtemperatur durchgeführt. Die Variation der Wandtemperatur wurde dabei durch eine Veränderung der Kühlmittel- und Öltemperatur mittels externer Konditionierung realisiert. Die Randbedingungen der Variation sind in Tabelle 3 dargestellt.

Tabelle 3: Betriebsbedingungen der durchgeführten Variation der Kühlmittel- und Öltemperatur

Parameter	Wert
Drehzahl	850 U/min
Indizierter Mitteldruck	3 bar
Kühlmitteltemperatur	35 – 80 °C
Öltemperatur	35 – 85 °C
Luftverhältnis	3,8 – 4,0
AGR-Rate	0%

Für die Untersuchungen wurde die Kühlmitteltemperatur mittels externer Konditionierung in vier Schritten von 35 bis 80 °C variiert. Da der Motor über einen Öl-Kühlmittel-Wärmetauscher verfügt, entstand eine Kopplung der beiden Betriebsmitteltemperaturen. Dadurch ergab sich eine Spreizung von unter 20 °C zwischen den beiden Temperaturen. Eine genauere tabellarische Übersicht der Kühlmittel- und Öltemperaturen zeigt Kaal in [9]. [21]

Eine direkte Wandtemperaturmessung fand im Rahmen der Untersuchungen von [21] nicht statt. Daher wurde von Kaal zur thermischen Modellierung der Brennraumwände ein FE-Wandtemperaturmodell verwendet, welches als Resultat Ergebnisse der Brennraumwandtemperatur des Zylinderkopfes, der Laubuchse und des Kolbens liefert. Die mittlere Brennraumwandtemperatur, sowie die Auswirkungen auf die gemessenen Emissionen ist in Abbildung 12 zu sehen. [9]

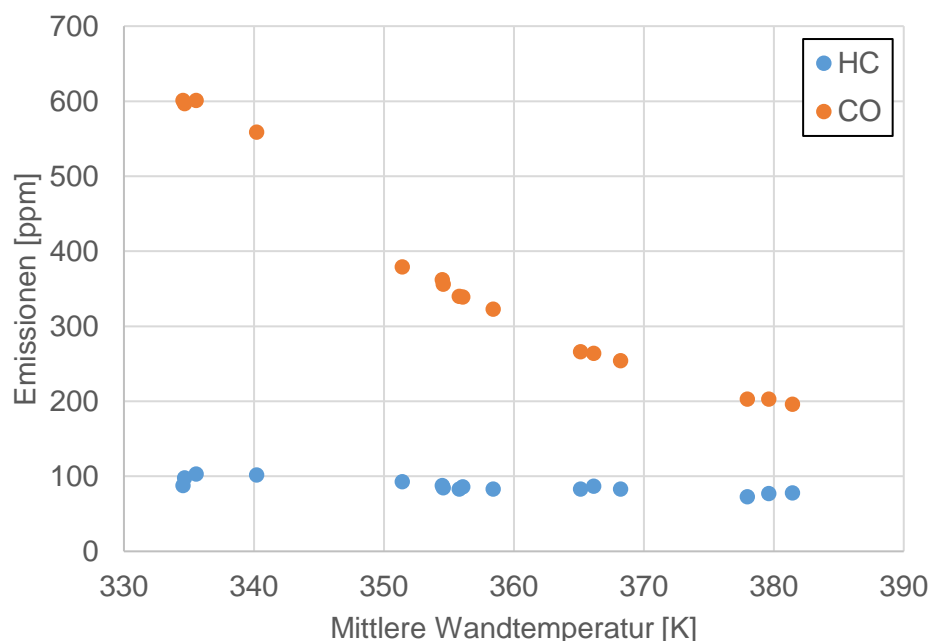


Abbildung 12: Gemessene HC- und CO-Emissionen für die Kühlmittel- und Öltemperaturvariation in Abhängigkeit der mittleren Wandtemperatur

Für die gemessenen HC- als auch CO-Emissionen lässt sich ein Anstieg für geringere Wandtemperaturen erkennen. Durch die höheren Wandwärmeverluste ergibt sich ein geringeres Temperaturniveau im Brennraum aber auch im Bereich der Brennraumwände, was zu einer langsameren Oxidation der beiden Emissionen führt. Relativ gesehen ist ein deutlich höherer Anstieg bei den CO-Emissionen zu verzeichnen. Eine höhere Sensitivität bei den CO-Emissionen ließe sich durch die deutlich höheren benötigten Oxidationstemperaturen erklären. Generell verhalten sich die HC- und CO-Emissionen für diese Variation konträr zu den Stickoxiden, da deren Bildung durch das geringere Temperaturniveau verringert wird.

4.3.3 Variation des Luftverhältnisses

Eine weitere, im Rahmen von [21] durchgeführte Variation, betrifft das Luftverhältnis. Die Randbedingungen dieser Variation sind in Tabelle 4 dargestellt. Bezüglich des indizierten Mitteldruckes und der Drehzahl ließen sich diese Betriebspunkte im Kennfeld dem Bereich des Eckdrehmomentes zuordnen.

Tabelle 4: Betriebsbedingungen der durchgeführten Variation des Luftverhältnisses

Parameter	Wert
Drehzahl	1000 U/min
Indizierter Mitteldruck	10,8 – 14,2 bar
Luftverhältnis	1,4 – 1,0
AGR-Rate	0%

Die Variation umfasst 11 Betriebspunkte mit unterschiedlichen Luftverhältnissen. Die Variation des Luftverhältnisses wurde dabei mit Hilfe der Einspritzmasse realisiert, was die Spreizung des indizierten Mitteldruckes in Tabelle 4 erklärt. Die gemessenen HC- und CO-Emissionen sowie das Luftverhältnis der Betriebspunkte sind in Abbildung 13 zu sehen. Einen recht starken Einfluss des Luftverhältnisses in Bereichen nahe der Stöchiometrie liegt für die CO-Emissionen vor. Je näher sich das globale Luftverhältnis in Richtung Stöchiometrie bewegt, desto stärker ist der Anstieg der Emissionen. Die Variation stimmt mit den Ergebnissen der Kennfeldvermessung überein, bei der ebenso für die Betriebspunkte mit geringstem Luftverhältnis im Bereich des Eckdrehmomentes die höchsten CO-Emissionen detektiert wurden. Es lässt sich somit erkennen, dass durch das inhomogene Brennverfahren bereits bei einem überstöchiometrischen Betrieb lokal fette Bereiche gebildet werden, aus denen CO nicht durch Vermischung mit mageren Bereichen bis zum Öffnen der Auslassventile zu CO₂ weiteroxidieren kann.

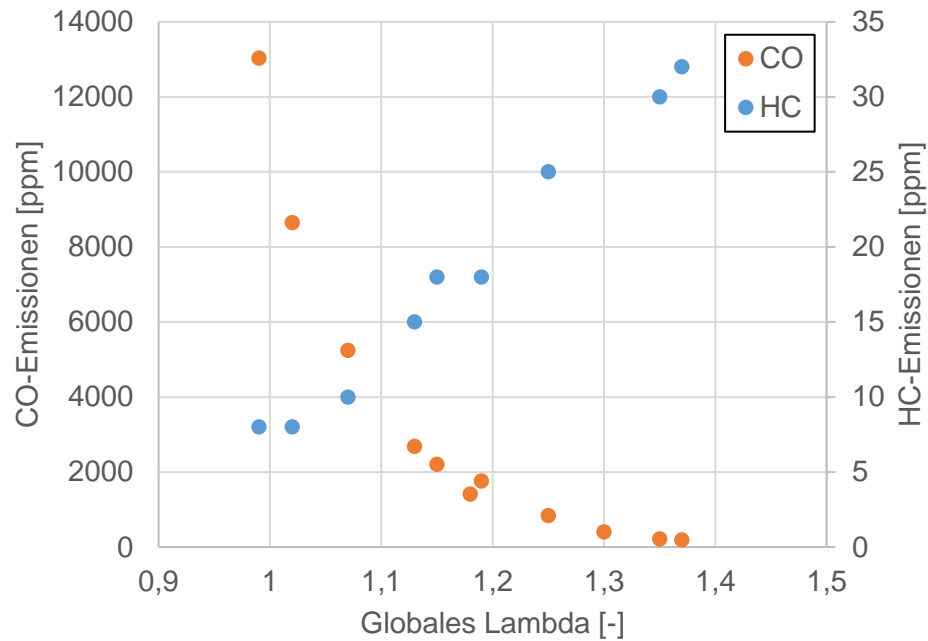


Abbildung 13: Gemessene HC- und CO-Emissionen für die Lambda-Variation

Für alle Betriebspunkte der Variation bewegen sich die HC-Emissionen auf niedrigem Niveau. Auch für einen stöchiometrischen Betrieb konnte kein Anstieg der gemessenen HC-Emissionen festgestellt werden. Lokal fette Bereiche, die es bei diesem Betrieb aufgrund der steigenden CO-Emissionen geben muss, sind somit für die Modellierung der HC-Emissionen nicht relevant. Die Temperaturen in den unterstöchiometrischen Bereichen sind folglich ausreichend, um die H-C-Verbindung aufzubrechen. Sollte es für den heutigen Stand der Dieselmotoren folglich noch ein kritisches Luftverhältnis geben, unterhalb dessen es zu einem sprunghaften Anstieg der HC-Emissionen kommt, so ist dieses seit den Untersuchungen aus [11] deutlich geringer geworden.

5 Modellierung der HC-Emissionen

Nachdem der Stand der Technik hinsichtlich der Quellen der HC-Emissionen sowie Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen dargelegt wurden, wird in diesem Kapitel die Modellierung der HC-Emissionen vorgestellt. Das HC-Modell beinhaltet die Auswirkungen durch Injektortröpfeln, Ausmagerung und durch Brennraumwandeffekte. Zuletzt werden die Ergebnisse für die Abstimmung des HC-Modells anhand zwei unterschiedlicher Motoren vorgestellt.

5.1 Injektortröpfeln

Eine Quelle der HC-Emissionen die modelliert wird entstammt dem Injektortröpfeln. Wie bereits in Kapitel 3.1 erwähnt handelt es sich hierbei um Kraftstoff, der nach dem eigentlichen Einspritzevent aus dem Injektor austritt und durch unzureichende Gemischaufbereitung als unverbrannter Kraftstoff verbleibt. Die Modellierung dieser Emissionen erfolgt nach Gleichung (5.1) analog zu unterschiedlichen anderen Modellen [41, 45, 46] und beinhaltet den Abstimmparameter $c_{HC,Inj}$. Das Injektorvolumen V_{Inj} bezeichnet dabei das zum Brennraum hin offene Injektorvolumen, was je nach Injektorart das Sacklochvolumen einschließt.

$$m_{HC,Inj} = c_{HC,Inj} \cdot \rho_{Krst} \cdot V_{Inj} \quad (5.1)$$

Geht man von einer üblicherweise nahezu konstanten Kraftstoffdichte aus, so handelt es sich hierbei folglich um eine Masse an HC, die unabhängig vom Motorbetrieb ist. Aus Gleichung (5.1) folgt, dass mit zunehmender Einspritzmasse der Kraftstoffanteil, der durch Injektortröpfeln in den Brennraum gelangt, abnimmt. Des Weiteren ergibt sich ein linearer Anstieg der HC-Emissionen mit dem Injektorvolumen, welcher analog zu den Ergebnissen aus [11] ist. Entsprechend ergeben sich Vorteile bei Sitzlochdüsen gegenüber Sacklochdüsen, da bei erstgenannten das zum Brennraum offene Volumen deutlich reduziert ist [5].

Für den Abstimmparameter $c_{HC,Inj}$ wird in [46] ein Wert von 0,12 verwendet. Dieser Wert wurde auch für weitere Modelle [41, 45] übernommen. Der in [46] geschätzte Wert für $c_{HC,Inj}$ von 0,21, der von einer Darstellung aus [11] abgeleitet wurde, entspricht dem höchsten in der Literatur gefundenen Wert und kann als ein Richtwert für plausible Maximalwerte von $c_{HC,Inj}$ angesehen werden.

5.2 Ausmagerungseinfluss

Als nächstes wird die Modellierung von unverbrannten Kohlenwasserstoffen, die durch Ausmagerung entstehen, vorgestellt. Hierbei müssen zwei Aspekte berücksichtigt werden. Zum einen geht es zunächst darum einen Anteil des Kraftstoffes der ausmagert zu bestimmen. Zum anderen muss die Möglichkeit einer nachfolgend stattfindenden Oxidation modelliert werden. Exemplarisch kann hierfür eine teilweise ausgemagerte frühe Voreinspritzung, die durch eine ausgeprägte Haupteinspritzung erfasst wird und oxidiert, genannt werden. Der Anteil, des Kraftstoffes, der zunächst ausmagert, wird direkt an die Einspritzung gekoppelt und wird nach Gleichung (5.2) berechnet.

$$f_{HC,Ausm} = \frac{c_{HC,Ausm} \cdot u_{Turb,g} \cdot AnZ_D}{m_{tInj,i} \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{RT_{AIFT}}\right) \cdot 10^{12}} \quad (5.2)$$

Der eingespritzte Kraftstoff magert in den Bereichen aus, in denen das Gemisch sich außerhalb der Zündgrenzen befindet. Dieses Phänomen tritt primär in den Randbereichen des Sprays auf, in denen eine starke Verdünnung durch Luftmischung stattfindet. Mit einer steigenden Turbulenz ist folglich mit einer stärkeren Luftmischung und somit einem höheren Ausmagerungsanteil zu rechnen.

Als mageres Kraftstoffverhältnis ϕ_L , ab dem für dieselmotorische Drücke und Temperaturen keine Verbrennung mehr erfolgt, wird in [11] ein Bereich von 0,1 bis 0,3 genannt. In den bereits vorgestellten Multizonenmodellen wird ein Wert von 0,2 verwendet [41, 58]. Für das HC-Modell wurde für ϕ_L ein Wert von 0,2 verwendet, was einem Luftverhältnis von 5,0 entspricht und mit

diesem eine adiabat isobare Flammentemperatur für die mageren Bereiche berechnet. Diese wird für die exponentiellen Temperaturabhängigkeit entsprechend des Arrhenius-Ansatzes in Gleichung (5.2) verwendet. Hierdurch wird der Einfluss einer reduzierten Reaktionskinetik durch verringerte Temperaturen, wie sie zum Beispiel bei frühen Voreinspritzungen oder allgemein geringen Brennraumtemperaturen vorliegen, berücksichtigt. Als Aktivierungsenergie E_A wird in Gleichung (5.2) ein Wert von 77900 J/mol verwendet, was der Aktivierungsenergie für die HC-Oxidation in mageren Bereichen aus [45] entspricht.

Eine schematische Darstellung des Ausmagerungsmodells ist in Abbildung 14 dargestellt. Der ausgemagerte Kraftstoff wird entsprechend den Volumenanteilen auf die unverbrannte und die verbrannte Zone aufgeteilt. Grundsätzlich finden sich für unterschiedliche Kohlenwasserstoffe vereinfachte Reaktionskinetiken in der Form nach Gleichung (5.3) in [31].

$$\frac{d[HC]}{dt} = -A \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) [HC]^m [O_2]^n \quad (5.3)$$

In [11] wird eine Vereinfachung für die Oxidation der Kohlenwasserstoffe in den mageren Bereichen entwickelt, welche bereits in Kapitel 3.3 mit Gleichung (3.7) vorgestellt wurde. Da die Variation der Sauerstoffkonzentration in den mageren Bereichen nur wenig variiert, wurde diese für die Berechnung der HC-Oxidation in [11] nicht berücksichtigt. Die Annahme einer nahezu konstanten Sauerstoffkonzentration in den mageren Bereichen kann für die Hochdruckphase eines Betriebspunktes als Näherung gelten. Liegen jedoch unterschiedliche stöchiometrische AGR-Raten vor, so kann es doch zu einer stärkeren Variation der Sauerstoffkonzentration in den mageren Bereichen kommen. Entsprechend wurde Gleichung um einen Term erweitert, der die Sauerstoffkonzentration in der jeweiligen Zone x_{O_2} zur Sauerstoffkonzentration in Luft $x_{O_2, Luft}$ ins Verhältnis setzt.

$$\frac{dm_{HC,ox}}{dt} = -A \frac{m_{HC}^2}{V} \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \frac{x_{O_2}}{x_{O_2, Luft}} \quad (5.4)$$

Für Gleichung (5.4) wurden die Werte für A , und E_A aus [45] übernommen. Entsprechend dem Zweizonenmodell nach Kožuch werden die Volumen und Temperaturen der jeweiligen Zonen für die Oxidationsgleichung verwendet. Auch findet ein Massentransport vom unverbrannten in die verbrannte Zone analog zum Modell nach Kožuch statt. Somit kann Kraftstoff, der zunächst ausmagert, durch eine ausgeprägte Verbrennung nachträglich oxidieren.

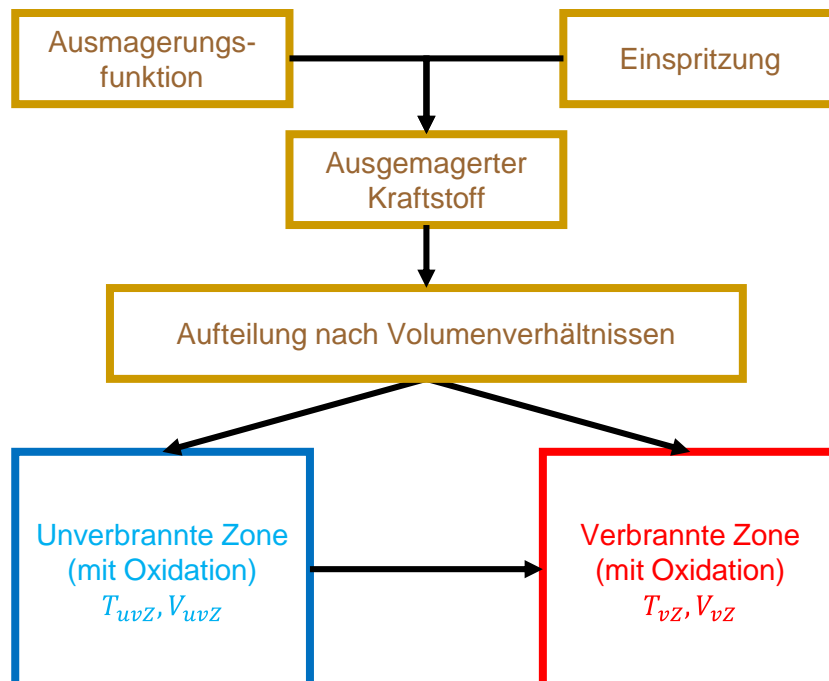


Abbildung 14: Schematische Darstellung des Ausmagerungsmodells

5.3 Wandzoneneinfluss

Als letztes Submodell wird der Einfluss der reduzierten Oxidationskinetik in der Nähe der Brennraumwände vorgestellt. In Kapitel 3.4 wurde der Randzonenansatz nach Kaal bereits vorgestellt. Bei diesem wird ein Teil der verbrannten Zone einer Randzone zugeordnet, in der keine Stickoxidbildung stattfindet. Eine entsprechende, auf das HC-Modell übertragene, Modellvorstellung könnte wie folgt aussehen: Analog wird für das HC-Modell eine Randzonendicke in Abhängigkeit der Wandtemperatur berechnet. Der Kraftstoff wird entsprechend den Volumenverhältnissen auf eine Kernzone und eine Randzone aufgeteilt, wobei in letztgenannter keine Oxidation stattfindet. In der Modellentwicklung zeigte sich jedoch eine solche Wandzonenmodellierung als nicht zielführend. Als problematisch zeigten sich hierbei vor allem die Bereiche im Kennfeld bei hoher Last mit allgemein niedrigem Niveau an HC-Emissionen. Hier würden sich unrealistisch niedrige Randzonendicken ergeben, die deutlich unter den üblichen Dicken thermischer Grenzschichten liegen [59]. Auch wird über eine reine Berücksichtigung der Zylinderwandtemperatur nicht dem Brennraumzustand Rechnung getragen. Bei höheren Zylindertemperaturen ist mit einer schnelleren Oxidation des Kraftstoffes zu rechnen, bevor wesentliche Teile des Gemisches in den Randzonenbereich einmischen.

Der Aufbau der Wandzonenmodellierung ist in Abbildung 15 dargestellt. Dieses Untermodell enthält einen Ansatz zur Oxidation des Kraftstoffes, einen Term zur Beschreibung der Randzonendicke sowie einen Ansatz zur Beschreibung der Einmischung in die Randzone. Zu Beginn der Einspritzung wird der Kraftstoff vollständig in eine Kernzone eingespritzt. Hierbei liegt die Modellvorstellung zugrunde, dass der Kraftstoff mit Austritt aus dem Injektor zunächst auf das heiße Gas im Inneren des Brennraums trifft. In dieser kann der Kraftstoff nach Gleichung (5.3) entsprechend eines Oxidationsansatzes aus [31] oxidieren. Hierbei wurden die Reaktionsparameter des Ersatzkraftstoffes n-Heptan verwendet, da dieser eine ähnliche Cetanzahl wie Dieselkraftstoff besitzt [35].

Analog zum NO-Modell wird eine Randzonendicke für wandnahe Bereiche definiert, in denen die Temperaturen für die HC-Oxidation zu gering sind. Die Randzonendicke des HC-Modells b_{HC} wird dabei über den Abstimmparameter $c_{HC,RZ}$ entsprechend Gleichung (5.5) an die Randzonendicke des NO-Modells b_{NO} gekoppelt. Im Vergleich zu einer separaten Berechnung der HC-Randzonendicke mittels Gleichung (3.12) reduziert sich somit der Aufwand der Abstimmung auf einen Parameter.

$$b_{HC} = c_{HC,RZ} \cdot b_{NO} \quad (5.5)$$

Das Brennraumvolumen wird in der Modellvorstellung, wie auch in Abbildung 15 dargestellt, vereinfacht als zylindrisch angesehen. Somit kann mit Hilfe der Randzonendicken für den Zylinderkopf, Laubbuchse und Kolben der Anteil des Randzonen Volumens am gesamten Brennraumvolumen x_{RZ} berechnet werden.

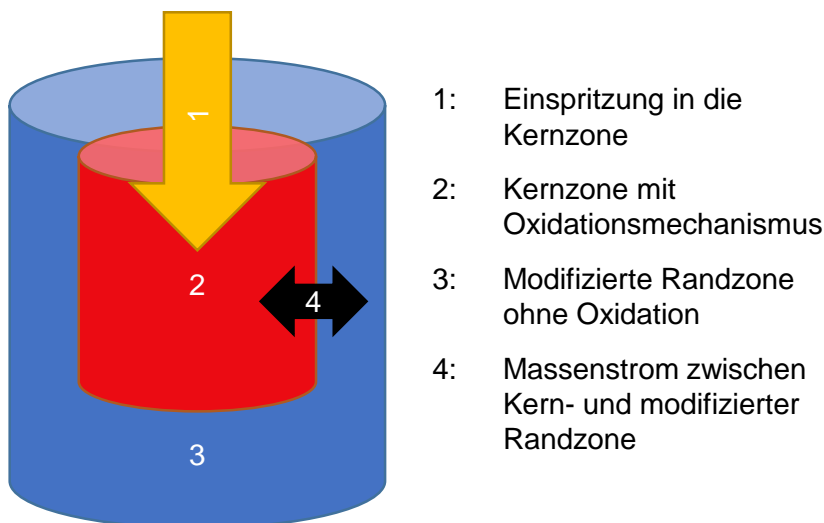


Abbildung 15: Schematische Darstellung des Wandzonenmodells

Mit Beginn der Einspritzung beginnt auch die Ausbreitung des Kraftstoffes in Richtung wandnaher Bereiche. Hierfür wird die sogenannte Randeinmischfunktion *bmi* (engl. boundary mixing in) mit Hilfe des Integrals aus Gleichung (5.6) berechnet. Die Berechnung findet dabei für jede Einspritzung einzeln statt.

$$bmi_{Inj,i} = \frac{\int m_{Inj,i} \cdot u_{Turb,g} d\varphi}{\sqrt{(s_p + h_{OT})^2 + \left(\frac{d}{2}\right)^2} m_{tInj,i}} \quad (5.6)$$

Mit einer höheren Turbulenz kommt es zu einer schnelleren Verteilung des Kraftstoffes im Brennraum und somit auch zu einer schnelleren Einmischung in die Nähe der Zylinderwände. Der Nenner setzt sich aus der Einspritzmasse der jeweiligen Einspritzung sowie einem Hebelarm zusammen. Der Hebelarm entspricht dabei dem Abstand eines mittig platzierten Injektors zum Kolbenrand. Hierdurch kommt es zu einer schnelleren Einmischung in Wandbereiche, wenn sich der Kolben während der Einspritzung in der Nähe des oberen Totpunktes befindet. Zu Beginn jeder Einspritzung nimmt *bmi* den Wert 0 an, was der Vorstellung entspricht, dass der Kraftstoff zunächst in Richtung Brennrauminnenes eingespritzt wird. Als Maximalwert kann *bmi* den Wert 1 annehmen. Die Randeinmischfunktion wird mit dem Randzonenanteil multipliziert. Hierdurch ergibt sich der modifizierte Randzonenanteil x_{mRZ} , der ebenso für jede Einspritzung einzeln berechnet wird.

$$x_{mRZInj,i} = bmi_{Inj,i} \cdot x_{RZ} \quad (5.7)$$

Je nachdem, ob der modifizierte Randzonenanteil zu- oder abnimmt, kommt es zu einem Massenstrom der noch nicht oxidierten HC in Richtung Rand- beziehungsweise in Richtung Kernzone. Unverbrannte HC, die von der Randzone wieder in die Kernzone gelangen, können somit nachträglich oxidieren.

5.4 Validierung des HC-Modells anhand des Kennfeldes des Versuchsmotors OM 642

Das HC-Modell, mit den in den Kapiteln 5.1 bis 5.3 vorgestellten Untermodellen, besitzt insgesamt drei Abstimmparameter: Der Parameter $C_{HC,Inj}$ dient der Abstimmung der HC-Emissionen, die durch Injektortropfen entstehen. Mit Hilfe von $C_{HC,Ausm}$ erfolgt die Abstimmung der HC-Emissionen durch ausgemagerten Kraftstoff. Schließlich wird mit dem Parameter $C_{HC,RZ}$ durch Kopplung an das NO-Randzonenmodell eine HC-Randzonendicke für wandnahe Bereiche definiert, um HC-Emissionen durch Wandeffekte zu berücksichtigen. Zunächst werden die Gesamtergebnisse des abgestimmten Modells mit den Messungen der Betriebspunkte des Kennfeldes des Versuchsmotors OM 642 verglichen, was in Abbildung 16 dargestellt ist. Im Anschluss erfolgen weitere Untersuchungen zum Einfluss der einzelnen Untermodelle auf die Gesamtemissionen. Die Abstimmparameter, die den Ergebnissen aus Abbildung 16 zugrunde liegen, sind in Tabelle 5 dargestellt.

Tabelle 5: Abstimmparameter des HC-Modells für den OM 642

Abstimmparameter	Wert
$C_{HC,Inj}$	0,120
$C_{HC,Ausm}$	2,205
$C_{HC,RZ}$	0,297

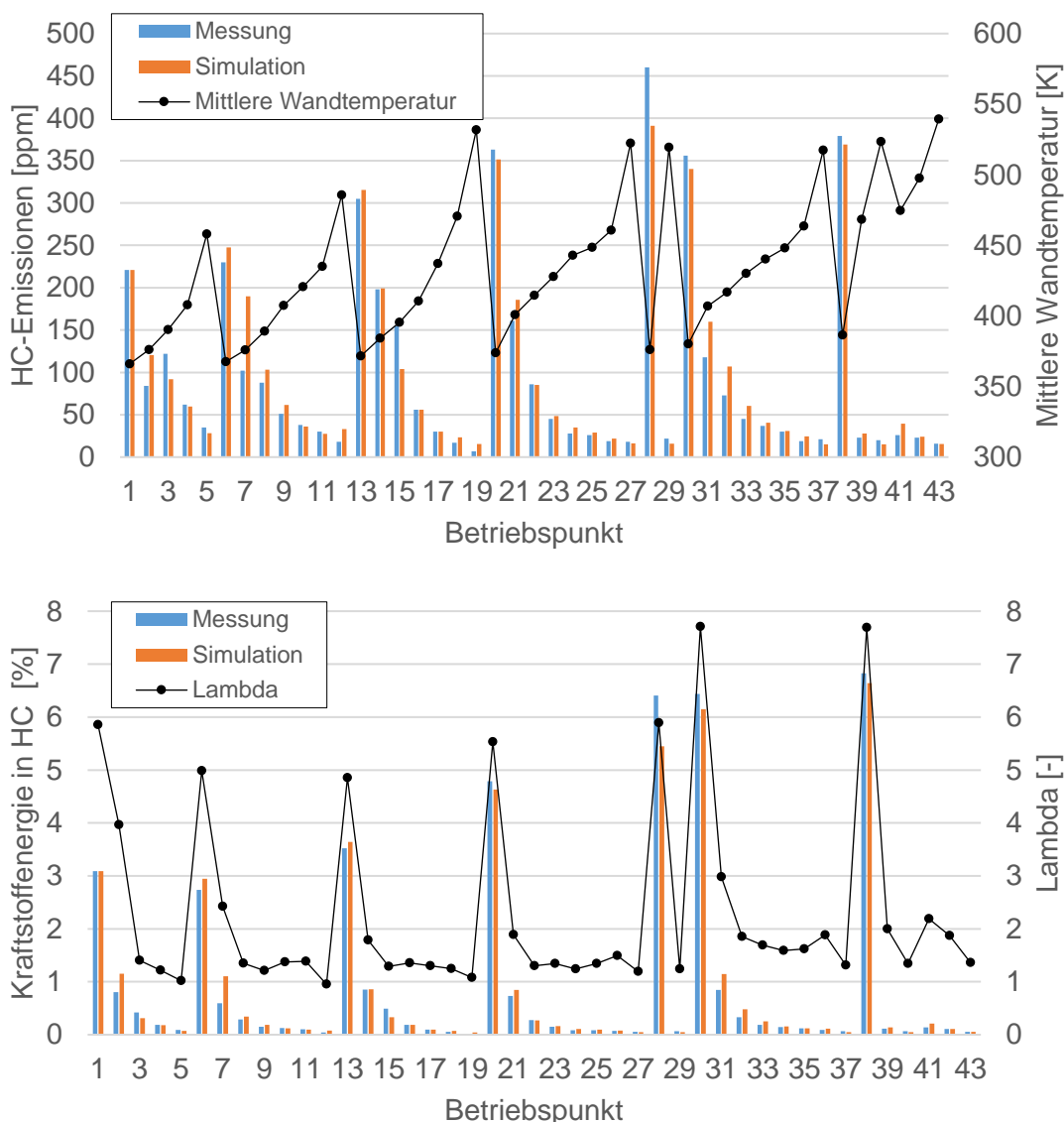


Abbildung 16: oben: HC-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: HC-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM 642

Im gesamten Kennfeld zeigt das Modell eine gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen hinsichtlich der energetischen Betrachtung als auch der Betrachtung in ppm. Lediglich für Betriebspunkt 7 existiert eine etwas größere Abweichung zwischen Simulation und Messung. Ein Vergleich mit den Ergebnissen anderer Modellen [41, 45] zeigt, dass auch bei detaillierterer Modellierung relative Abweichungen dieser Größenordnung in der Emissionsmodellierung vorkommen. Insgesamt beträgt die durchschnittliche Abweichung für die 43 Betriebspunkte 14 ppm bzw. 0,1% für die Kraftstoffenergie in den HC-Emissionen.

Eine Plausibilisierung der Abstimmparameter lässt sich für die Abstimmparameter $C_{HC,Inj}$ und $C_{HC,RZ}$ durchführen. Für $C_{HC,RZ}$ liegt mit 0,12 ein Wert vor, wie er auch bereits in anderen Modellen verwendet wird. Grundsätzlich sollte die HC-Randzonendicke geringer sein als die NO-Randzonendicke, weshalb der Wert für $C_{HC,RZ}$ ebenso plausibel erscheint. Eine Plausibilisierung des Wertes $C_{HC,Ausm}$ anhand von Erfahrungswerten oder physikalischen Zusammenhängen wurde nicht gefunden.

Anhand Abbildung 16 ließe sich vermuten, dass der Anstieg der HC-Emissionen hin zu geringen Lasten sowohl auf die geringere Wandtemperatur, als auch auf den höheren Luftüberschuss rückführbar ist. Daher wurde eine erneute Abstimmung des HC-Modells vorgenommen, bei der jeweils ein Untermodell ausgeschaltet wurde. Ein Abstimmparameter wurde somit

gleich 0 gesetzt, während eine erneute Optimierung der anderen Abstimmparameter durchgeführt wurde. Die Ergebnisse dieser Auswertung zeigt Abbildung 17.

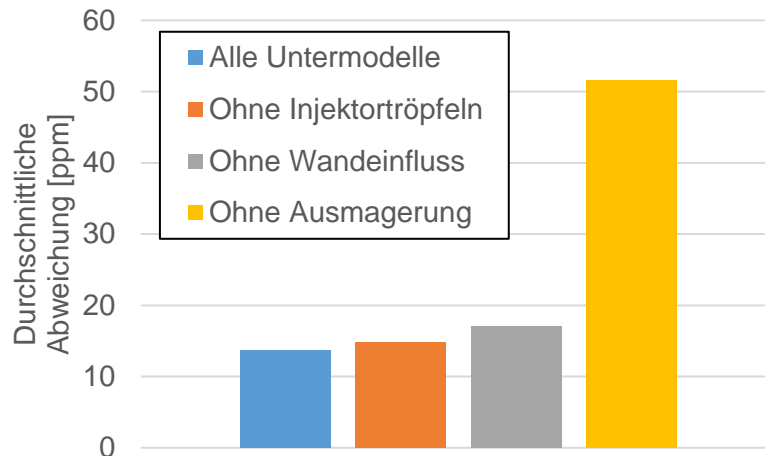


Abbildung 17: Ergebnisse des HC-Modells ohne einzelne Untermodelle

Anhand von Abbildung 17 ist zu erkennen, dass für das Kennfeld des Versuchsmotors OM 642 die Untermodelle Injektortropfen und Wandeinfluss eher eine untergeordnete Rolle spielen. Wird eines dieser Modelle ausgeschaltet, so ist der Anstieg der durchschnittlichen Abweichung gegenüber dem gesamten HC-Modell eher gering. Ohne Verwendung des Ausmagerungsmodells ergeben sich deutlich größere Abweichungen, weshalb diesem Untermodell die größte Bedeutung zugeschrieben werden kann. Die Ergebnisse stimmen somit mit dem Modell aus [45] überein, wonach – mit Ausnahme des Betriebs in Nähe der Volllast – der größte Anteil der HC-Emissionen durch Ausmagerungseffekte verursacht wird. Die zugrundeliegenden Betriebspunkte der Ergebnisse aus Abbildung 17 wurden im Kennfelddiagramm in Abbildung 7 dargestellt. Da sich die Betriebspunkte über einen weiten betriebsrelevanten Kennfeldbereich erstrecken und sowohl Niedrig- als auch Volllast berücksichtigt werden, kann die Bedeutung der einzelnen Untermodelle, wie sie aus Abbildung 17 folgt, für den Motorbetrieb insgesamt argumentativ begründet werden.

5.5 Validierung des HC-Modells anhand der Betriebspunkte des Versuchsmotors OM 646

An einem zweiten Motor wurde ebenso die Abstimmung des HC-Modells durchgeführt. Hierbei handelt es sich um einen Einzylinder-Versuchsmotor, der auf dem zugrundeliegenden Motor OM 646 basiert. Die wichtigsten Kenngrößen des Motors sind in Tabelle 6 dargestellt. Die Messungen hierzu wurden im Rahmen des FVV-Projektes Nr. 1235 mit dem Titel „Emissionsmodellierung der dieselmotorischen Verbrennung mit variabler Ventilsteuerung“ durchgeführt. Hierbei wurde für die Anwendung des HC-Modells allerdings nur der Betrieb mit mechanischer Ventilsteuerung berücksichtigt. Die Abstimmung erfolgte dabei an acht Punkten im Motorkennfeld, die in Abbildung 18 dargestellt sind. [60]

Tabelle 6: Kenngrößen des Einzylinder-Versuchsmotors basierend auf dem OM 646

Bohrung	88 mm
Hub	88,3 mm
Hubraum	537 cm ³
Ventile / Zylinder	4
Verdichtungsverhältnis (geom.)	Reduziert auf 15,88
Maximaler Einspritzdruck	2000 bar

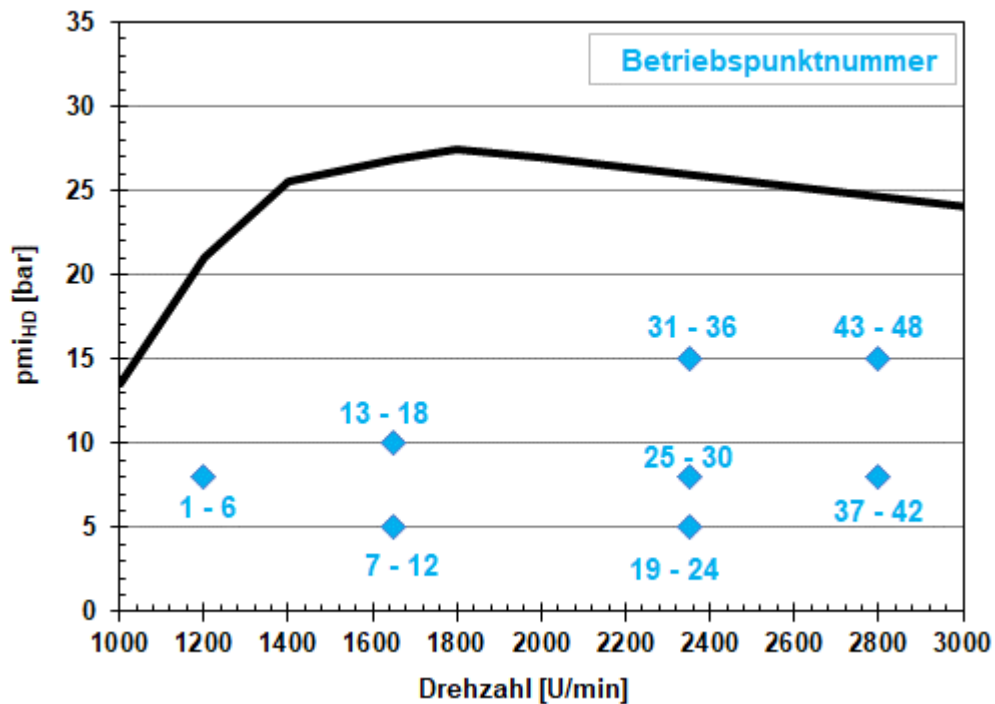


Abbildung 18: Betriebspunkte im Kennfeld des Versuchsmotors OM 646

An den acht Punkten im Kennfeld wurde der Motor mit unterschiedlichen Verbrennungsschwerpunkten bzw. unterschiedlichen AGR-Raten betrieben. Somit ergeben sich insgesamt 48 unterschiedliche Betriebsbedingungen des Motors. Die entsprechenden AGR-Raten bzw. die Verbrennungsschwerpunkte sind in Abbildung 19 dargestellt. Für detailliertere Informationen zu den Messungen sei auf das zugrundeliegende Projekt [60] verwiesen. Die entsprechenden Simulationsdaten zur innermotorischen Berechnung wurden von Yang bereitgestellt. Diese Daten umfassen neben durchgeführten Druckverlaufsanalysen auch ein abgestimmtes Verbrennungs- und Emissionsmodell, wobei hierbei das Modell nach Kožuch verwendet wurde [61]. Somit wurde bereits die verbrannte und unverbrannte Zone definiert, was die Abstimmung auf die Abstimmparameter des HC-Modells reduzierte.

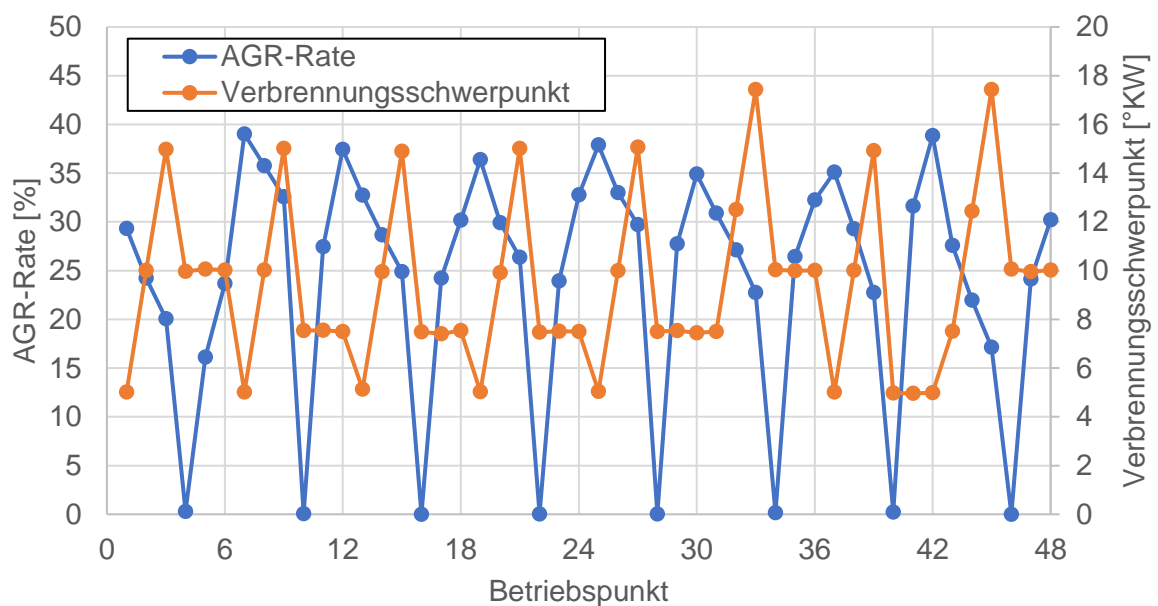


Abbildung 19: AGR-Rate und Verbrennungsschwerpunkte der Betriebspunkte des OM 646

Ein Vergleich des abgestimmten HC-Modells mit den Messdaten ist in Abbildung 20 abgebildet. Die Abstimmparameter für den zweiten Motor sind in Tabelle 7 dargestellt. Es ist ersichtlich, dass auch für den zweiten untersuchten Motor das Modell die gemessenen Emissionen gut wiedergeben kann. Bei der Abstimmung zeigte sich, dass durch eine erneute Abstimmung des Wandzonenmodells mittels Parameter $c_{HC,RZ}$ keine wesentliche Verbesserung erzielt werden konnte. Die Ergebnisse aus Abbildung 20 für den OM 646 enthalten somit den gleichen Wert des Abstimmparameters $c_{HC,RZ}$ wie für den OM 642. Die durchschnittliche Abweichung zwischen Simulation und Messung beträgt etwa 7 ppm beziehungsweise 0.04% der über den Kraftstoff zugeführten Energie. Das deutlich niedrigere Niveau hinsichtlich der Emissionen im Vergleich zu denen des OM 642 lässt sich damit begründen, dass die Messpunkte bei nicht ganz so niedriger Last liegen.

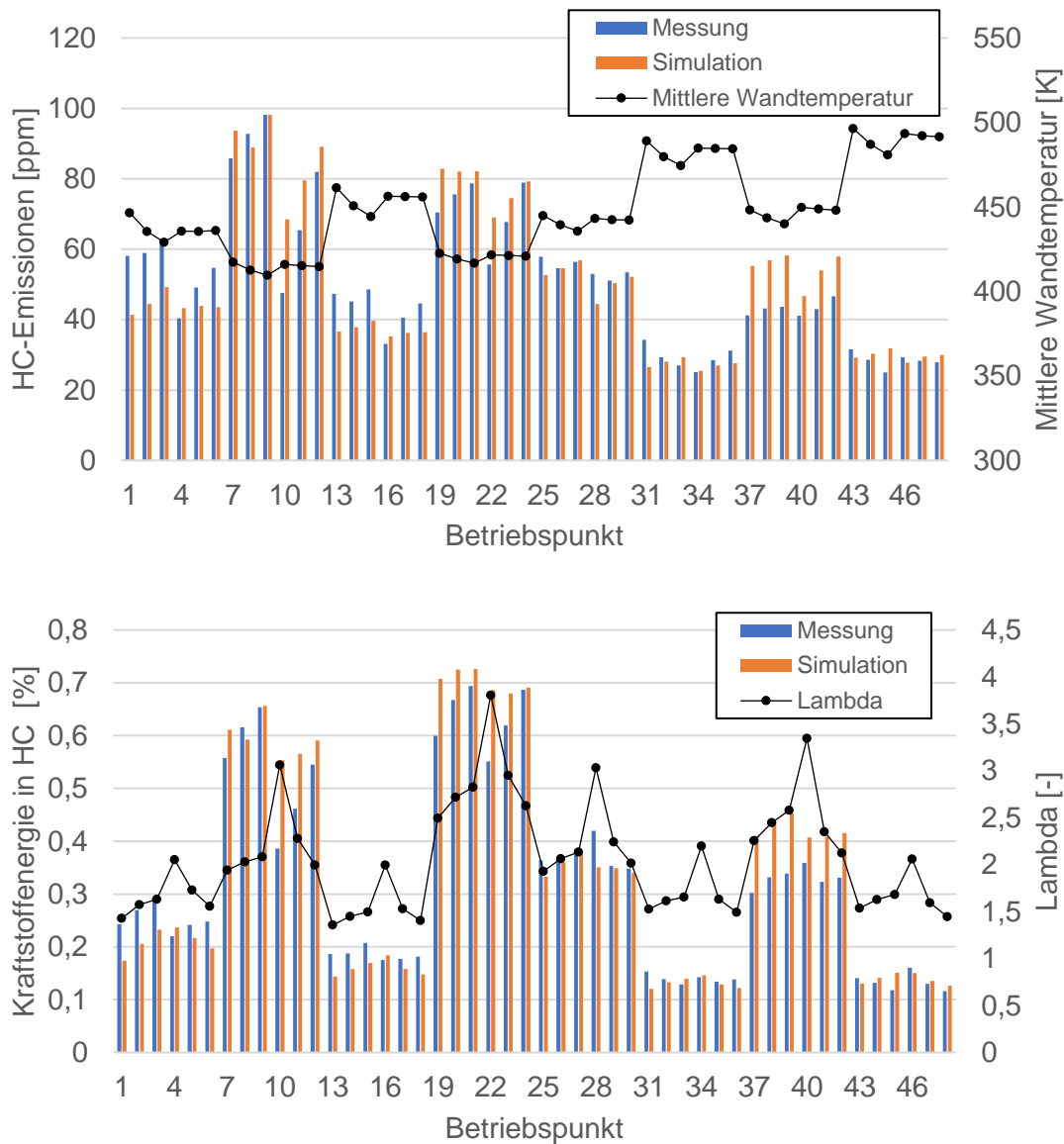


Abbildung 20: oben: HC-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: HC-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM 646

Tabelle 7: Individuelle Abstimmparameter des HC-Modells für OM 642 und OM 646 sowie gemittelte Werte

Abstimmparameter	OM 642	Om 646	Gemittelt
$C_{HC,Inj}$	0,120	0,199	0,160
$C_{HC,Ausm}$	2,205	0,842	1,524
$C_{HC,RZ}$	0,297	0,297	0,297

Ein Vergleich der Abstimmparameter der beiden Motoren ist in Tabelle 7 zu sehen. Während für die Randzone der identische Wert verwendet wurde, gibt es größere relative Abweichung hinsichtlich der Parameter $C_{HC,Inj}$ und $C_{HC,Ausm}$. Für letztgenannten ist der Wert für den OM 642 um mehr als den Faktor 2 größer. Grundsätzlich sind Unterschiede bei den Abstimmparametern für unterschiedliche Motoren nichts Ungewöhnliches, da sich in den Parametern letztlich Unterschiede des Einspritzsystems, der Brennraumgeometrie etc. widerspiegeln. Um dennoch die Auswirkungen von Abweichungen der individuellen Abstimmung auf das Gesamtergebnis Innerhalb des HC-Modells abzuschätzen, wurde ein gemittelter Parametersatz aus den beiden untersuchten Motoren berechnet. Mit diesen, in Tabelle 7 dargestellten Werten, wurde nun erneut eine Simulation der beiden Motoren durchgeführt und mit den Ergebnissen der individuellen Abstimmung verglichen. Die Ergebnisse dazu sind in Abbildung 21 dargestellt. Für eine bessere Vergleichbarkeit der beiden Motoren wurde die Betrachtung hinsichtlich des Anteils der Kraftstoffenergie in den Emissionen herangezogen. Es ist zu erkennen, dass auch mit einem gemittelten Parametersatz für beide Motoren weiterhin gute Ergebnisse mit dem Modell erzielt werden. Die durchschnittlichen Abweichungen liegen weiterhin deutlich unter den durchschnittlichen Werten der untersuchten Betriebspunkte. Die guten Ergebnisse des mittleren Parametersatzes sprechen für die Modellfähigkeit. Des Weiteren empfiehlt sich, basierend auf den beiden untersuchten Motoren, die Verwendung der in Tabelle 7 aufgeführten mittleren Parameter als Standardwerte.

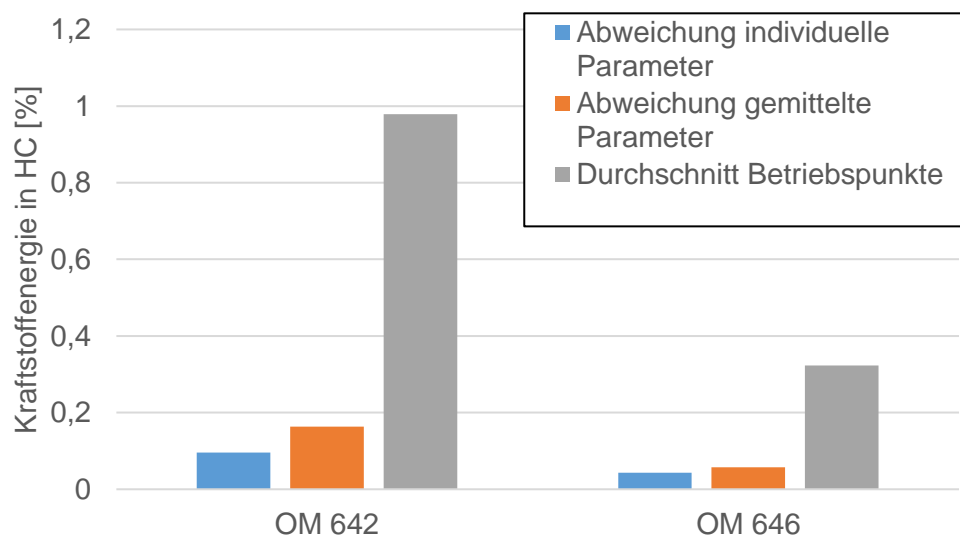


Abbildung 21: Abweichung für individuelle und gemittelte Parameter sowie durchschnittliche Kraftstoffenergie in HC-Emissionen für OM 642 und OM 646

6 Modellierung der CO-Emissionen

Analog zur Modellierung der HC-Emissionen wird, nachdem der Stand der Technik hinsichtlich Quellen sowie Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen dargelegt wurden, in diesem Kapitel die Modellierung der CO-Emissionen vorgestellt. Das Modell beinhaltet einen CO-Oxidationsmechanismus, mit Hilfe dessen CO aus zunächst unvollkommener bzw. unvollständiger Verbrennung nachträglich oxidieren kann. Bereiche, in denen Kraftstoff direkt über CO zu CO₂ regieren kann, werden somit nicht explizit modelliert. Außerdem beinhaltet es die Auswirkungen durch lokal unterstöchiometrische Zonen, Ausmagerung und durch Brennraumwandeffekte. Zuletzt werden die Ergebnisse für die Abstimmung des CO Modells anhand zweier unterschiedlicher Motoren vorgestellt.

6.1 CO-Oxidationsmechanismus

In diesem Kapitel wird die Entwicklung des CO-Oxidationsmechanismus erläutert. Dieser wird im Zweizonenmodell für die verbrannte Zone angewandt, um in dieser die reaktionskinetisch kontrollierte Oxidation von CO zu CO₂ abzubilden. Eine Anwendung des Oxidationsmechanismus auf die unverbrannte Zone wäre zwar möglich. Allerdings wird in [38] gezeigt, dass es unterhalb von 1200 K zu einem schnellen Einfrieren der Reaktionen kommt. Folglich wird selbst für dieselmotorisch typische Kompressionsendtemperaturen die Reaktionsgeschwindigkeit in der unverbrannten Zone zu gering sein, um einen merklichen Einfluss auf die CO-Konzentration zu haben. Das Vorgehen zur Entwicklung des CO-Oxidationsmechanismus wird nachfolgend anhand Abbildung 22 erklärt.

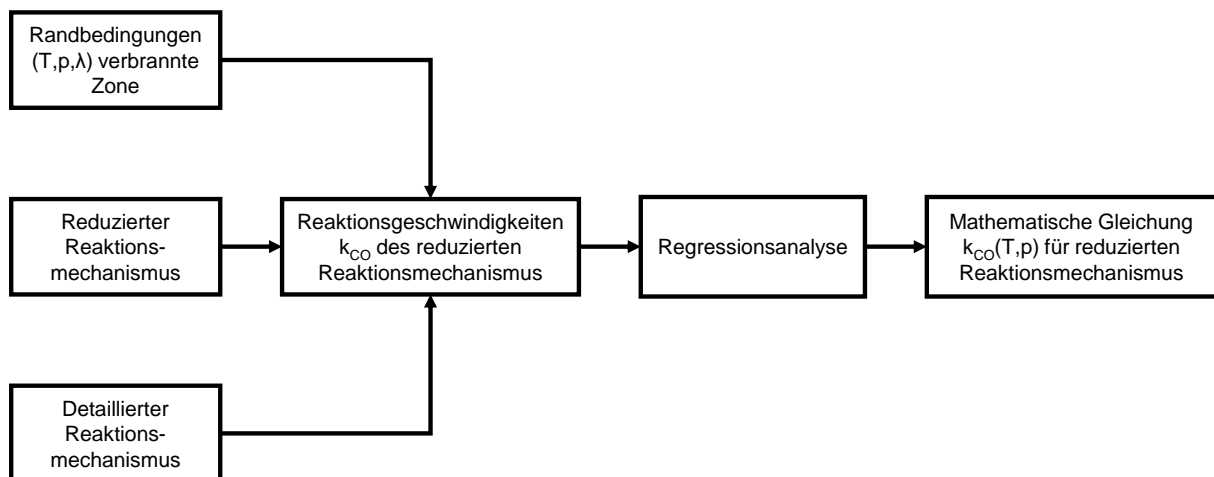


Abbildung 22: Vorgehen zur Entwicklung eines Einschnitt-Reaktionsmechanismus für die Oxidation von CO

Der in der Entwicklung des reduzierten CO-Oxidationsmechanismus zugrundeliegende Gedanke liegt darin, die Oxidationsgeschwindigkeit für CO, die sich aus einem detaillierten Mechanismus für unterschiedliche Randbedingungen ergibt, auf eine Einschnitt-Reaktionsgleichung zu übertragen. Dabei werden Randbedingungen aus der verbrannten Zone definiert, in denen die CO-Oxidation kinetisch kontrolliert abläuft. Ein reduzierter Reaktionsmechanismus, der die Oxidation von CO zu CO₂ abbildet, wird definiert. Im Anschluss wird mit Hilfe eines detaillierten Mechanismus die CO-Oxidation, genauer gesagt der Verlauf der CO-Konzentration, für die unterschiedlichen Randbedingungen der verbrannten Zone berechnet. Mit Hilfe eines Optimierungsverfahrens wird nun die Reaktionsgeschwindigkeit des reduzierten Mechanismus bestimmt, bei der der CO-Verlauf des reduzierten Mechanismus bestmöglich mit dem des detaillierten Mechanismus übereinstimmt. Somit ergibt sich für eine Vielzahl unterschiedlicher Randbedingungen der verbrannten Zone eine optimale Reaktionsgeschwindigkeit des reduzierten Mechanismus. Im Anschluss wird anhand einer Regressionsanalyse eine mathematische Gleichung bestimmt, die diese Reaktionsgeschwindigkeiten für die unterschiedlichen Randbedingungen am besten abbildet.

Als detaillierter Reaktionsmechanismus dient der CO/H₂-Synthesegasmechanismus der CRECK Modeling Group des Politecnico di Milano [62-64]. Da lediglich die Oxidation von CO zu CO₂ von Interesse ist, kann auf die Verwendung eines Mechanismus, der langkettige Kohlenwasserstoffe enthält, verzichtet werden. Die CO-Chemie kann somit relativ exakt abgebildet werden, bei einer akzeptablen Rechenzeit.

Als nächstes wurden die Randbedingungen gewählt, für die der CO-Verlauf des reduzierten Mechanismus mit dem CO-Verlauf des detaillierten Mechanismus übereinstimmen soll. Entsprechend den Ergebnissen aus [38] sowie [65] wurde ein kinetisch relevanter Bereich zwischen 1200 K und 1700 K festgelegt, in denen der reduzierte Mechanismus eine gute Übereinstimmung mit dem detaillierten Mechanismus haben sollte. Unterhalb dieser Spanne kommt es zu einem schnellen Einfrieren der Reaktionen, oberhalb der Spanne ist die Reaktion so schnell, dass für motorische Bedingungen quasi ein Gleichgewichtszustand herrscht. Für die genannte Temperaturspanne wurden nun die abgestimmten Simulationsdaten aus [21] für die gemessenen Motorkennfeldpunkte (die in Abbildung 7 dargestellt sind) verwendet, um die in diesem Temperaturbereich geltenden Randbedingungen für den Druck und das Luftverhältnis in der verbrannten Zone zu bestimmen. Um die Rechenzeit der anschließend durchgeführten Simulationen und Optimierungen zu reduzieren, wurde nur jeder zwanzigste Grad Kurbelwinkel innerhalb des Temperaturbereiches berücksichtigt. Die sich hierdurch ergebenden Zustände mit den entsprechenden Temperaturen, Drücken und Luftverhältnissen sind in Abbildung 23 dargestellt.

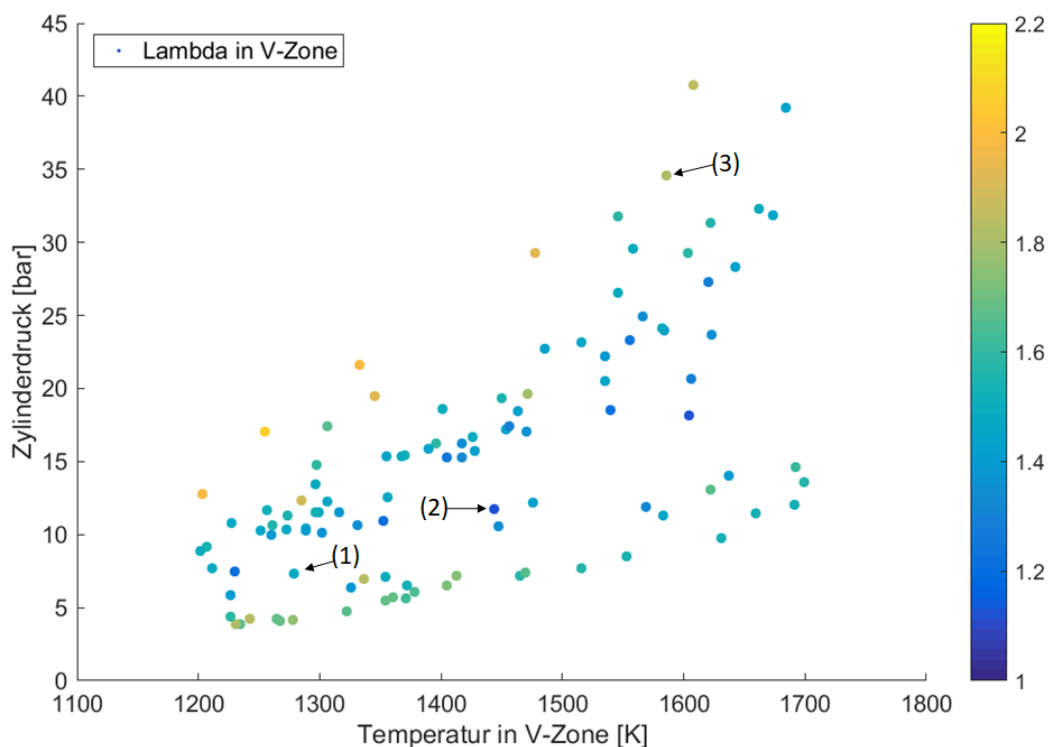


Abbildung 23: Zustände in der verbrannten Zone hinsichtlich Temperatur, Druck und Luftverhältnis im Kennfeld des OM 642

Für alle Punkte entsprechend Abbildung 23 wurde nun mit Hilfe eines homogenen chemischen Reaktors der CO-Oxidationsverlauf berechnet. Als Randbedingung wurde das O-H-System zu Beginn der Rechnung in den Gleichgewichtszustand gesetzt. Zudem ist sämtlicher Kohlenstoff zu Beginn in CO gebunden. Die Atomverhältnisse insgesamt wurden dabei entsprechend eines zugrundeliegenden Dieselkraftstoffes gewählt. Der exemplarische CO-Verlauf für den detaillierten Mechanismus (Polimi) für die zugrundeliegenden Punkte (1), (2) und (3) aus Abbildung 23 sind in Abbildung 24 dargestellt. Nun wird versucht, diesen Verlauf mit einem reduzierten Mechanismus, für den die Reaktionsgeschwindigkeit optimiert wird, abzubilden. Als

Basis wurde dabei der CO-Mechanismus aus [31] entsprechend Gleichung (6.1) herangezogen und leicht modifiziert, wodurch sich Gleichung (6.2) ergibt.

$$\frac{d[CO]}{dt} = A \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) [CO][H_2O]^{0.5}[O_2]^{0.25} \quad (6.1)$$

$$\frac{d[CO]}{dt} = k_{CO}(T, p, \lambda) [CO]^{1.25} [H_2O_{GG}]^{0.5} [O_{2GG}]^{0.25} \quad (6.2)$$

Für die Oxidationsgleichung wird die Gleichgewichtskonzentration für H_2O und O_2 verwendet. Hierdurch wird das Differentialgleichungssystem auf die CO-Konzentration reduziert, was dem Grundgedanken geringer Rechenzeit entgegenkommt. Es zeigte sich, dass durch die Verwendung des Koeffizienten von 1,25 für die CO-Konzentration der Verlauf besser wiedergegeben werden konnte als für den Standardwert von 1 aus [31]. Der CO-Verlauf des reduzierten Einschritt-Mechanismus für die drei exemplarischen Randbedingungen ist ebenso in Abbildung 24 dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass sich mit Gleichung (6.2) und einer optimierten Reaktionsgeschwindigkeit der CO-Verlauf des detaillierten Mechanismus gut abbilden lässt.

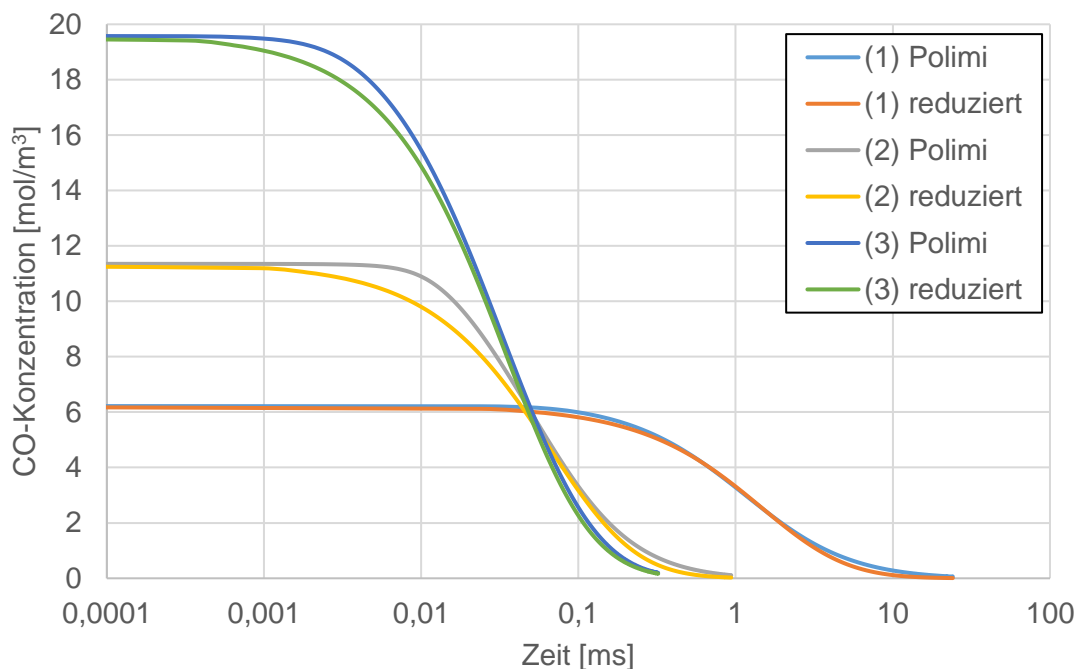


Abbildung 24: Verlauf der CO-Oxidation für ausgewählte Bedingungen in der verbrannten Zone für den detaillierten und den reduzierten Mechanismus

Eine entsprechende Optimierung der Reaktionsgeschwindigkeit wurde für alle Randbedingungen aus Abbildung 23 durchgeführt. Die Reaktionsgeschwindigkeiten, die sich dadurch ergeben zeigt Abbildung 25. Es ist ein Anstieg der Reaktionsgeschwindigkeit vor allem mit steigender Temperatur, aber auch untergeordnet mit abfallendem Druck zu erkennen. Dies könnte mit einem Arrhenius Ansatz entsprechend Gleichung (3.9) nur unzureichend abgebildet werden. Eine direkte Abhängigkeit vom Luftverhältnis ist nicht zu erkennen. Dies stimmt mit den Ergebnissen aus [38] überein, wonach der von der Kinetik dominierte Bereich für überstöchiometrische Luftverhältnisse kaum vom Luftverhältnis abhängt.

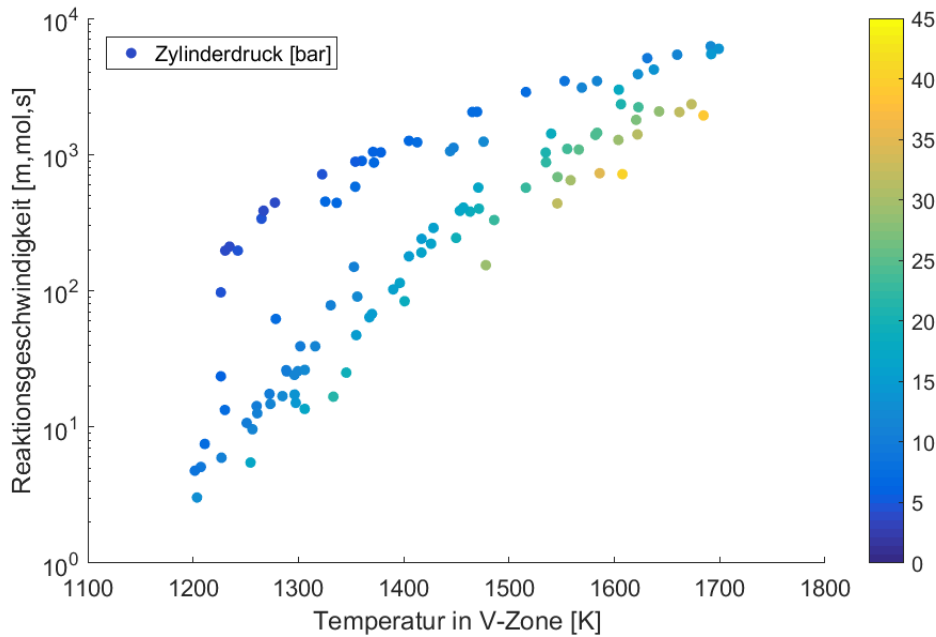


Abbildung 25: Optimierte Reaktionsgeschwindigkeiten für reduzierten Mechanismus für unterschiedliche Bedingungen der verbrannten Zone

Mit Hilfe einer Regressionsanalyse wurde nun eine mathematische Gleichung bestimmt, die in Abhängigkeit der Randbedingungen Druck, Temperatur und Luftverhältnisse die Reaktionsgeschwindigkeit gut wiedergeben kann. Hierbei wurden die Punkte mit dem reziproken Quadrat der Temperatur gewichtet. Hintergrund hierfür ist, dass durch fehlerhafte Oxidationsgeschwindigkeiten am unteren Ende des kinetisch dominierten Bereichs stärkere Auswirkungen auf das Gesamtergebnis zu erwarten sind. Zur Beschreibung der Reaktionsgeschwindigkeit wurde Gleichung (6.3) gewählt, welche fünf Parameter und eine Abhängigkeit vom Druck und der Temperatur enthält.

$$k_{CO}(T, p) = C_1 \cdot \exp(-\exp(C_2 + C_3 \cdot T) \cdot p^{-C_4}) + C_5 \quad (6.3)$$

Die Parameter, die sich aus der Regressionsanalyse ergeben, finden sich in Abbildung 26. Ebenso ist in Abbildung 26 die Reaktionsgeschwindigkeit in Abhängigkeit der Temperatur und des Druckes dargestellt. Die Regression ergab einen Wert des Bestimmtheitsmaßes von über 0,99, was bestätigt, dass in Gleichung (6.3) auf die Abhängigkeit des Luftverhältnisses verzichtet werden kann.

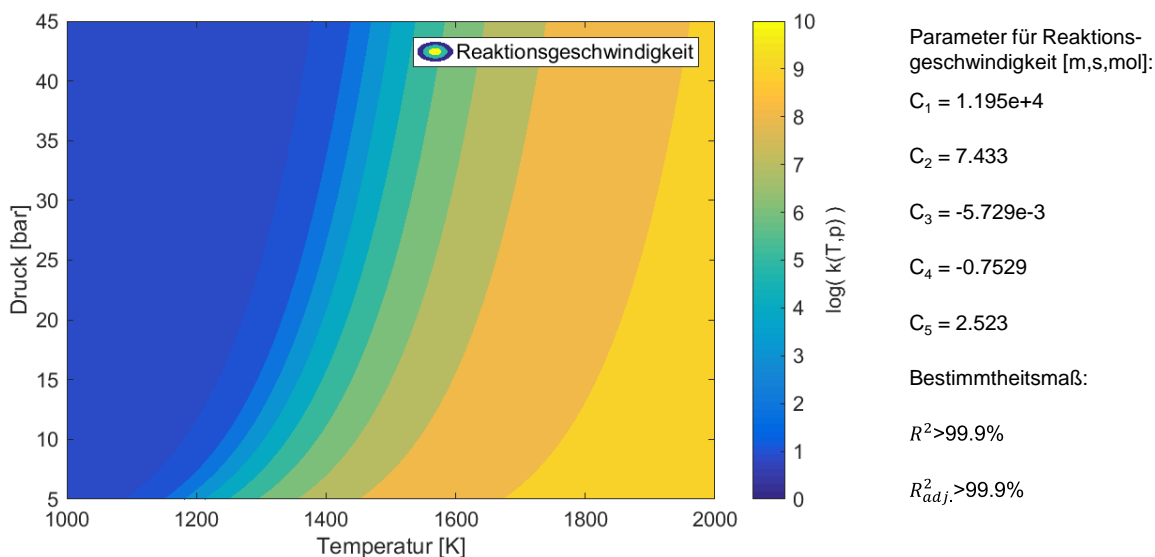


Abbildung 26: links: Reaktionsgeschwindigkeit des reduzierten Mechanismus; rechts: Parameter zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit des reduzierten Mechanismus und Bestimmtheitsmaß

6.2 Luftmangleinfluss

Als eine bedeutende Quelle für CO-Emissionen können lokal unterstöchiometrische Bereiche angesehen werden. Aufgrund der Inhomogenität des Dieselmotors können diese auch bereits bei überstöchiometrischem Betrieb auftreten, was der Anstieg der CO-Emissionen für die Messvariation in Kapitel 4.3.3 zeigte. Besonders im Kern der Einspritzung können diese unterstöchiometrischen Bereiche entstehen, die wiederum im Verlauf der Hochdruckphase durch Vermischung teilweise abnehmen. Entsprechend sollte das Untermodell zur Modellierung unterstöchiometrischer Bereiche sowohl die Bildung einer fetten Zone als auch die Abnahme dieser durch Vermischung mit mageren Bereichen enthalten. Schematisch ist das Fettzonenmodell in Abbildung 27 dargestellt.

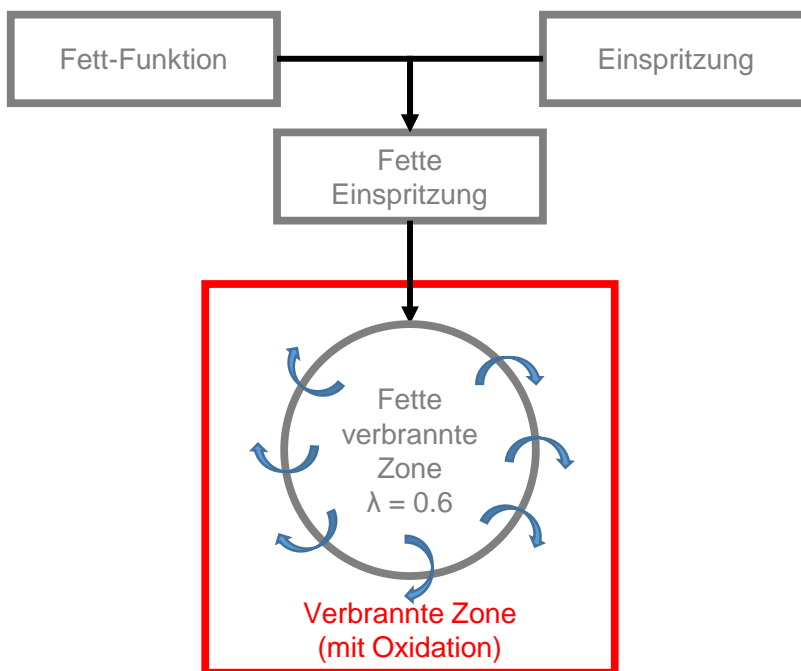


Abbildung 27: Schematische Darstellung des Fettzonenmodells

Zunächst wird der Anteil des Kraftstoffes, der bei der Einspritzung für die Bildung der fetten Zone verantwortlich ist mittels der sogenannten Fettfunktion $f_{FZ,CO}$ Gleichung (6.4) berechnet. $c_{f,CO}$ ist hierbei der Abstimmparameter zur Bildung der Fettzone. $x_{FL,m}$ ist der im Zylinder vorhandene modifizierte Frischluftanteil, der mittels Gleichung (6.5) berechnet wird. Entsprechend Gleichung (6.4) nimmt der Anteil der fetten Einspritzung mit zunehmender Einspritzdauer zu, da der modifizierte Frischluftanteil abnimmt.

$$f_{FZ,CO} = \frac{c_{f,CO}}{x_{FL,m}} \quad (6.4)$$

$$x_{FL,m} = x_{FL} - x_{Krst,uv} \cdot L_{min} \quad (6.5)$$

Der Anteil der fetten Einspritzung mischt sich mit der Zylinderluft entsprechend einer Mischung mit einem Luftverhältnis von $\lambda_{FZ} = 0,6$ und bildet somit einen Massenstrom in die fette Zone entsprechend Gleichung (6.6). Der Wert für λ_{FZ} wurde analog zum Luftverhältnis der fetten Zone der NO-Modellierung nach Kaal bzw. der Rußmodellierung nach Kožuch gewählt

$$\frac{dm_{FZ,f}}{dt} = \frac{dm_{Inj}}{dt} \cdot f_{FZ,CO} \cdot (1 + (1 + x_{AGR,st}) \cdot \lambda_{FZ} \cdot L_{min}) \quad (6.6)$$

Die Fettzone wird als eine Zone innerhalb der verbrannten Zone angesehen, ohne jedoch eine Rückwirkung auf die verbrannte Zone zu haben. Die Einmischung von CO aus der fetten Zone erfolgt folglich in die verbrannte Zone. Für die Spezieskonzentrationen in der Fettzone werden dabei Gleichgewichtsbedingungen angesetzt und es wird die Temperatur der verbrannten Zone angesetzt. CO mischt entsprechend der Massenabnahme nach Gleichung (6.7) von der fetten in die verbrannte Zone. Gleichung (6.7) liegt dabei die Vorstellung einer kugelförmigen Fettzone zugrunde, deren Masse durch turbulenzgetriebene Einmischung magerer Bereiche abnimmt.

$$\frac{dm_{FZ,mix}}{dt} = c_{g,CO} \cdot \rho_{FZ} \cdot V_{FZ}^{\frac{2}{3}} \cdot u_{Turb,f} \cdot Anz_D \cdot f_{\lambda,Zyl} \quad (6.7)$$

Da die unterstöchiometrischen Bereiche lokal eher dem Kern der Einspritzung zugeordnet werden können, wird in Gleichung (6.7) die Einspritzerturbulenz entsprechend [8] verwendet. In Gleichung (6.7) wird mittels Faktor $f_{\lambda,Zyl}$ der Einfluss des globalen Lambdas im Zylinder auf die Fetteinmischung berücksichtigt. Dieser Faktor berechnet sich nach Gleichung (6.8) und beschreibt somit, wie viel Masse des homogen angenommenen Zylinders mit der Masse der Fettzone vermischt werden muss, um ein stöchiometrisches Gemisch zu enthalten. Je geringer das globale Luftverhältnis im Zylinder, umso langsamer läuft folglich die Einmischung der Fettzone ab. Der Bruchterm in Gleichung (6.8) wird dabei in der Berechnung auf einen unteren Wert von 0 begrenzt.

$$f_{\lambda,cyl} = \frac{1 - \frac{1}{1 + L_{min} \cdot \lambda_{Zyl}} (1 + L_{min})}{\frac{1}{1 + L_{min} \cdot \lambda_{FZ}} (1 + L_{min}) - 1} + c_{FZ,mix} \quad (6.8)$$

Gleichung (6.8) beinhaltet den Parameter $c_{FZ,mix}$, da für ein stöchiometrisches bzw. unterstöchiometrisches Luftverhältnis im Zylinder keine Einmischung stattfinden würde. Jedoch werden durch Vermischung lokal fette Bereiche weniger fett, was zu einer Reduzierung der CO-Konzentration führt. Der Parameter $c_{FZ,mix}$ wurde im Modell zunächst auf den Wert 0,01 gesetzt und ist folglich nur für Betriebspunkte im Bereich der Stöchiometrie von Bedeutung. Der Verlauf von $f_{\lambda,Zyl}$ in Abhängigkeit des Luftverhältnisses im Zylinder ist in Abbildung 28 dargestellt.

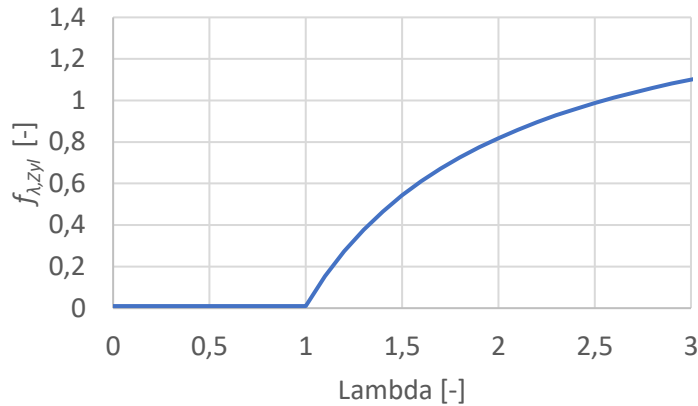


Abbildung 28: Abhängigkeit des Faktors $f_{\lambda, Zyl}$ zur Berücksichtigung des Luftverhältnisses auf die Fetteinmischung

6.3 Ausmagerungseinfluss

Eine weitere Quelle der CO-Emissionen, die modelliert wird, ist analog zum HC-Modell auf ausgemagerte Bereiche zurückzuführen. Die Modellierung des Ausmagerns für das CO-Modell ist hierbei ähnlich dem Ausmagern des HC-Modells aufgebaut. Zunächst wird für das CO-Modell die Annahme getroffen, dass sämtlicher eingespritzte Kraftstoff zu CO reagieren kann. Da der Anteil der Kraftstoffenergie in den HC-Emissionen auch bei niedrigen Lasten in einem einstelligen Prozentbereich liegt, siehe Abbildung 10, wird diese Annahme als zulässig akzeptiert. Der Anteil des ausmagernden CO berechnet sich mithilfe von Gleichung (6.9). Der Parameter $c_{CO, Ausm}$ dient dabei der Abstimmung. Für T_{AIFT} wird ein Luftverhältnis von 2 zugrunde gelegt, was auf Ergebnissen aus [38] beruht. Demnach lag CO in mageren Bereichen mit einem stöchiometrischen Luftverhältnis von mindestens 2 vor. Es ergibt Sinn, dass dieser Wert unterhalb des Wertes für die HC Ausmagerung liegt, da für die CO-Oxidation höhere Temperaturen benötigt werden. Für die Aktivierungstemperatur (E_A/R) wurde ein Wert von 9213 K gewählt, was dem Wert für die Aktivierungstemperatur der CO-Oxidation des Dreischritt-Mechanismus aus [66] entspricht.

$$f_{CO, Ausm} = \frac{c_{CO, Ausm} \cdot u_{turb, g} \cdot Anz_D}{m_{tInj, i} \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{RT_{AIFT}}\right)} \cdot 10^{12} \quad (6.9)$$

Die Verteilung des CO durch Ausmagerung erfolgt analog zum HC-Modell auf die unverbrannte und die verbrannte Zone entsprechend ihren Volumenverhältnissen. Wie bereits in Kapitel 6.1 erwähnt, beschränkt sich die nachträgliche CO-Oxidation auf die verbrannte Zone.

6.4 Wandzoneneinfluss

Als letztes Submodell wird der Einfluss einer reduzierten Oxidationskinetik in Nähe der Brennraumwände auf die CO-Emissionen vorgestellt. Wie bereits für die Modellierung des Ausmagerungseinflusses finden sich auch in diesem Submodell Ähnlichkeiten zwischen dem HC-Modell und dem CO-Modell. Eine Kopplung der CO-Randzonendicke b_{CO} an die NO-Randzonendicke b_{NO} erfolgt mit Hilfe des Abstimmparameters $c_{CO, RZ}$ nach Gleichung (6.10).

$$b_{CO} = c_{CO, RZ} \cdot b_{NO} \quad (6.10)$$

Die Berechnung der Randeinmischfunktion sowie der modifizierten Randzone erfolgt analog zum HC-Modell nach den Gleichung (5.6) und (5.7) für jede Einspritzung einzeln. Für das CO-Modell wird nun allerdings eine Gewichtung der einzelnen Einspritzungen an der Gesamteinspritzmenge durchgeführt, womit sich der gewichtete modifizierte Gesamttrandzonenanteil X_{gmRZ} ergibt.

$$x_{gmRZ} = \sum_{i=1}^n \frac{m_{Inj,i} \cdot x_{mRZ,Inj,i}}{m_{tInj}} \quad (6.11)$$

Dieser Anteil teilt die verbrannte Zone in eine Kernzone und eine Randzone, in der keine CO-Oxidation stattfindet. Folglich erfolgt eine Aufteilung des CO der unverbrannten bzw. der fetten Zone, welches in die verbrannte Zone mischt, auf die Kernzone und die Randzone. Die Möglichkeit einer nachträglichen Oxidation von CO, das aus der verbrannten Randzone in die verbrannte Kernzone mischt, ist im Modell implementiert. Die CO-Modellierung gleicht somit auch in diesem Fall der HC-Modellierung. Schematisch sind die CO-Ströme innerhalb des CO-Modells, die sich durch Ausmagerung, der Fettzone und der Randzonenmodellierung ergeben, in Abbildung 29 dargestellt.

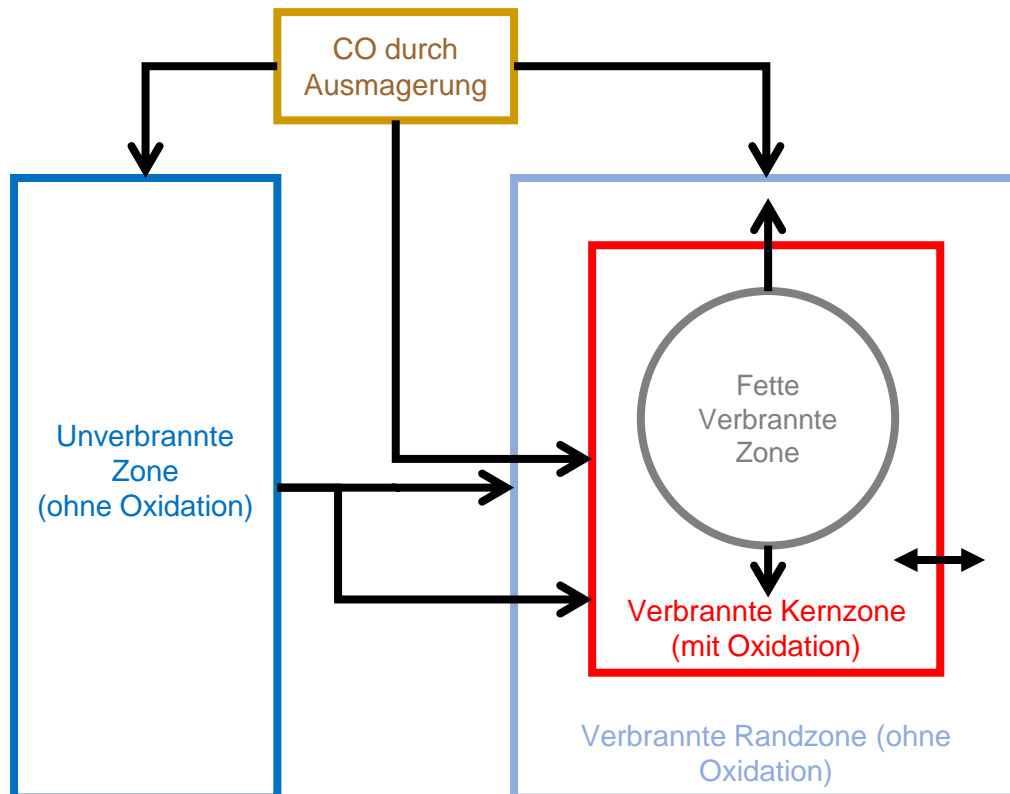


Abbildung 29: Schematische Darstellung der Zonen und der CO-Ströme des CO-Modells

6.5 Validierung des CO-Modells anhand des Kennfeldes des OM642

Das CO-Modell, mit den in den Kapiteln 6.2 bis 6.4 vorgestellten Untermodellen, besitzt insgesamt vier Abstimmparameter: Der Parameter $c_{f,CO}$ dient der Abstimmung der Bildung lokal unterstöchiometrischer Bereiche während $c_{g,CO}$ deren Abnahme durch Einmischung abstimmt. Mit Hilfe von $c_{CO,Ausm}$ erfolgt die Abstimmung der CO-Emissionen durch ausgemagerte Bereiche, in denen die Verbrennungstemperatur für eine rasche Oxidation hin zu CO_2 zu gering ist. Schließlich wird mit dem Parameter $c_{CO,RZ}$ durch Kopplung an das NO-Randzonenmodell eine CO-Randzonendicke für wandnahe Bereiche definiert, um CO-Emissionen durch Wandeffekte abzustimmen. Eine Abstimmung des in Kapitel 6.1 beschriebenen Oxidationsmechanismus ist nicht vorgesehen. Zunächst werden die Gesamtergebnisse des abgestimmten Modells mit den Messungen der Betriebspunkte des Kennfeldes des Versuchsmotors OM 642 verglichen, was in Abbildung 30 dargestellt ist. Im Anschluss erfolgen weitere Untersuchungen zum Einfluss der einzelnen Untermodelle auf die Gesamtemissionen. Die Abstimmparameter, die den Ergebnissen aus Abbildung 30 zugrunde liegen, sind in Tabelle 8 dargestellt.

Tabelle 8: Abstimmparameter des CO-Modells für den OM 642

Abstimmparameter	Wert
$c_{f,CO}$	0,125
$c_{g,CO}$	0,220
$c_{CO,RZ}$	0,278
$c_{CO,Ausm}$	13,76

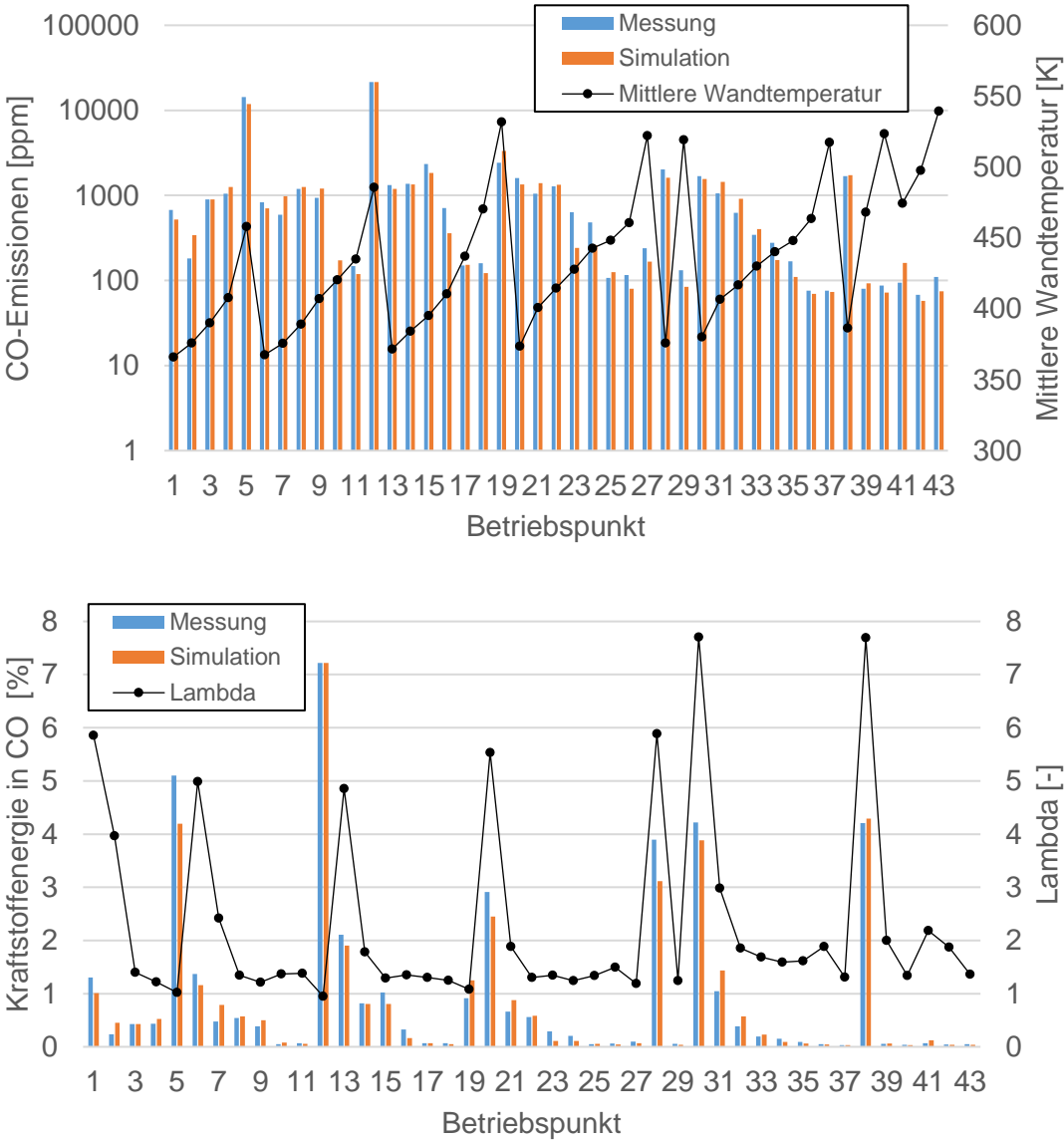


Abbildung 30: oben: CO-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: CO-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM 642

Im gesamten Kennfeld zeigt das Modell eine gute Übereinstimmung mit den Messergebnissen hinsichtlich der energetischen Betrachtung als auch der Betrachtung in ppm. Für letztgenannte Betrachtung wurde eine logarithmische Skalierung gewählt, da durch die hohen Konzentrationen im Bereich des Eckdrehmomentes eine große Spreizung der Messwerte vorliegt. Insgesamt beträgt die durchschnittliche Abweichung für die 43 Betriebspunkte 210 ppm bzw. 0,14% für die Kraftstoffenergie in den CO-Emissionen.

Der Anstieg der CO-Emissionen im Modell im Bereich des Eckdrehmoments kann eindeutig auf die Modellierung der Fettzone zurückgeführt werden. Anhand Abbildung 16 ließe sich vermuten, dass der Anstieg der CO-Emissionen hin zu geringen Lasten sowohl auf die geringere Wandtemperatur, als auch auf den höheren Luftüberschuss zurückzuführen ist. Daher wurde eine erneute Abstimmung des CO-Modells vorgenommen, bei der jeweils ein Untermodell ausgeschaltet wurde. Ein Abstimmparameter – für das Fettzonenmodell nur der Parameter $c_{f,CO}$ – wurde somit gleich 0 gesetzt, während eine erneute Optimierung der anderen Abstimmparameter durchgeführt wurde. Das Vorgehen entspricht somit dem bereits gezeigten für das HC-Modell. Die Ergebnisse dieser Auswertung zeigt Abbildung 31.

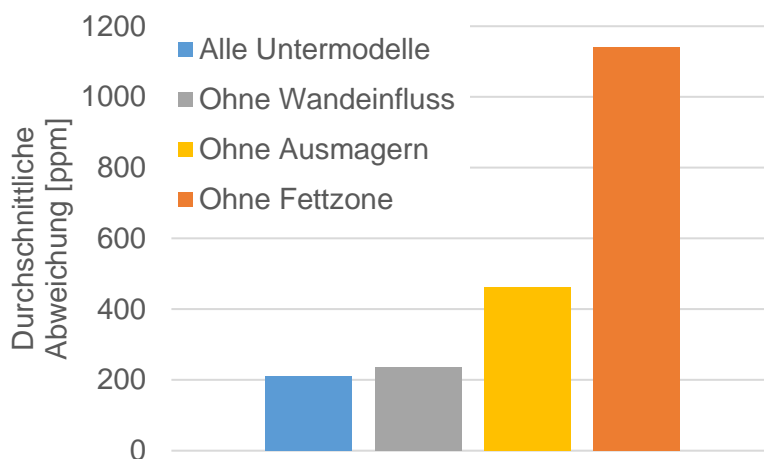


Abbildung 31: Ergebnisse des CO-Modells ohne einzelne Untermodelle

Während für das HC-Modell vor allem das Ausmagerungsmodell von Bedeutung ist, spielt für das CO-Modell neben dem Ausmagerungs- zusätzlich das Fettzonenmodell für eine exakte Abbildung der Emissionen über das Motorkennfeld eine wichtige Rolle. Analog zum HC-Modell spielen die Wandeffekte eher eine untergeordnete Rolle. Eine Plausibilisierung der Bedeutung der einzelnen Untermodelle anhand der in Kapitel 3.3 vorgestellten CO-Modelle ist nicht möglich, da dort lediglich die Gesamtemissionen gezeigt werden. Eine Unterteilung, aus welchen Bereichen die Emissionen entstammen wurde nicht gemacht.

6.6 Validierung des CO-Modells anhand Betriebspunkte des OM646

Analog zum HC-Modell wurde auch für das CO-Modell die Abstimmung mit dem OM 646 an einem zweiten Motor durchgeführt. Die zugrundeliegenden Betriebspunkte sind die gleichen wie die in Kapitel 5.5 für das HC-Modell vorgestellten. Die Ergebnisse des für den OM 646 abgestimmten CO-Modells, verglichen mit den Messungen, ist in Abbildung 32 zu sehen.

Es ist ersichtlich, dass auch für den zweiten untersuchten Motor das Modell die gemessenen Emissionen gut wiedergeben kann. Bei der Abstimmung zeigte sich, dass durch eine erneute Abstimmung des Wandzonenmodells mittels Parameter $c_{CO,RZ}$ keine wesentliche Verbesserung erzielt werden konnte. Diesbezüglich gleichen sich somit die Ergebnisse des CO-Modells mit denen des HC-Modells. Die Ergebnisse aus Abbildung 32 für den OM 646 enthalten somit den gleichen Wert des Abstimmparameters $c_{CO,RZ}$ wie für den OM 642. Die Durchschnittliche Abweichung zwischen Simulation und Messung beträgt etwa 47 ppm beziehungsweise 0,04% der über den Kraftstoff zugeführten Energie. Das deutlich niedrigere Niveau hinsichtlich der Emissionen in beiden Betrachtungen aus Abbildung 32 im Vergleich zu denen des OM 642 lässt sich damit begründen, dass die Messpunkte bei nicht ganz so niedriger Last liegen. Zudem wird der Motor für alle Betriebspunkte mit einem Luftverhältnis größer als 1,3 betrieben, weshalb der Einfluss lokal unterstöchiometrischer Bereiche noch als gering angesehen werden kann.

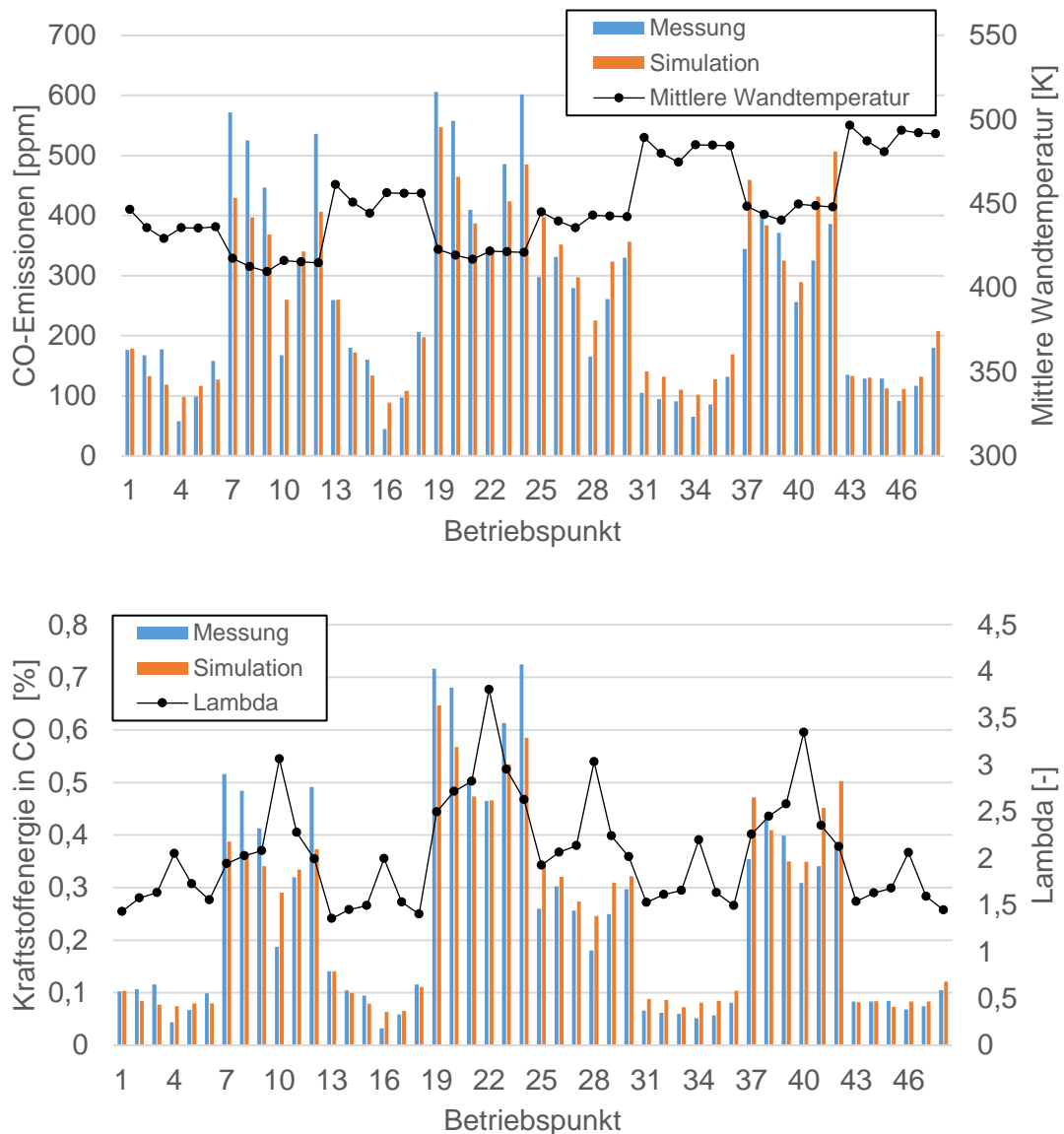


Abbildung 32: oben: CO-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: CO-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM 646

Die Abstimmparameter des OM 646 sind in Tabelle 9 den Abstimmparametern des OM 642 gegenübergestellt. Wie bereits erwähnt konnte der Abstimmparameter des Randzonenmodells $c_{CO,RZ}$ übernommen werden, ohne dass relevante Nachteile bei den Simulationsergebnissen in Kauf genommen werden mussten. Die relativen Unterschiede zwischen den beiden Motoren fallen geringer als für das HC-Modell aus. Für den OM 646 ist die Fettbildung, die Fetteinmischung sowie das Ausmagern geringer. Hierbei muss allerdings erwähnt werden, dass bei den untersuchten Motorbetriebspunkten des OM 646 die Untermodelle zur Fettzone bzw. zur Ausmagerung noch nicht so dominant sind wie für die untersuchten Betriebspunkte des OM 642.

6 Modellierung der CO-Emissionen

Tabelle 9: Individuelle Abstimmparameter des CO-Modells für OM 642 und OM 646 sowie gemittelte Werte

Abstimmparameter	OM 642	OM 646	Gemittelt
$c_{f,CO}$	0,125	0,095	0,110
$c_{g,CO}$	0,220	0,200	0,210
$c_{CO,RZ}$	0,278	0,278	0,278
$c_{CO,Ausm}$	13,76	8,254	11,01

Um auch für das CO-Modell Abweichungen zur individuellen Abstimmung zu bestimmen, wurde ein gemittelter Parametersatz berechnet und mit diesem erneut eine Simulation der untersuchten Betriebspunkte der beiden Motoren durchgeführt. Dies entspricht dem bereits für das HC-Modell vorgestellte Vorgehen. Die Ergebnisse dazu sind in Abbildung 33 dargestellt. Auch für das CO-Modell ist zu erkennen, dass mit dem gemittelten Parametersatz eine gute Vorhersagefähigkeit der Emissionen gegeben ist. Analog zum HC-Modell empfiehlt sich die Verwendung der gemittelten Parameterwerte aus Tabelle 9 als Standardwerte.

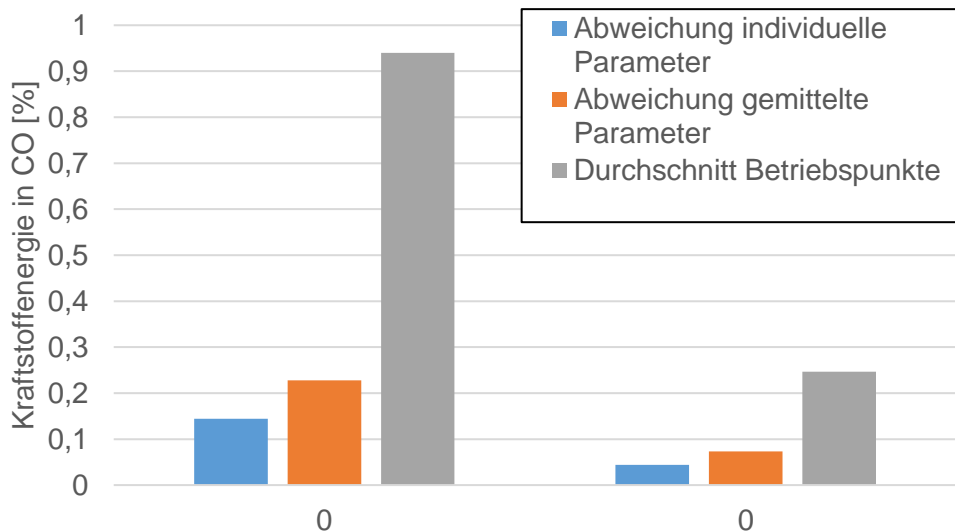


Abbildung 33: Abweichung für individuelle und gemittelte Parameter sowie durchschnittliche Kraftstoffenergie in CO-Emissionen für OM 642 und OM 646

7 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein phänomenologischer 0D/1D-Ansatz erarbeitet um die innermotorische Bildung der Rohemissionen an unverbrannten Kohlenwasserstoffen und Kohlenstoffmonoxid für Dieselmotoren zu simulieren. Mit Hilfe des entwickelten HC/CO-Modells wird der Bedeutung der HC- und CO-Emissionen hinsichtlich der Abgasgesetzgebung sowie der Bedeutung für die innermotorische Energiebilanzierung Rechnung getragen. Da die zu erwartenden Verbrauchsverbesserungspotentiale des Dieselmotors zunehmend geringer werden, sollte eine simulative Abbildung der HC- und CO-Emissionen im Entwicklungsprozess implementiert sein. Anhand von Messungen konnte gezeigt werden, dass vor allem bei geringen und hohen Luftverhältnissen mehrere Prozentpunkte der zugeführten Kraftstoffenergie in diesen Emissionen stecken können. Durch die zunehmend dynamischeren Prüfbedingungen – vom NEFZ über den WLTC zur RDE-Fahrt – ist mit einem vermehrten Vorkommen dieser kritischen Motorbedingungen zu rechnen.

Anhand von durchgeführten Prüfstandsuntersuchungen sowie einer ausführlichen Literaturrecherche wurden zunächst die wesentlichen Quellen für HC- und CO-Emissionen untersucht. Für die HC-Emissionen wurden drei Hauptquellen identifiziert, die im Modell berücksichtigt werden: Injektortropfen, ausgemagerter Kraftstoff und Wandzoneneinflüsse. Für das CO-Modell wurden ebenso drei wesentliche Quellen identifiziert, die modelliert wurden: Analog zum HC-Modell sind dies magere Spraybereiche und Wandzoneneinflüsse. Zusätzlich spielen für die CO-Emissionen lokal unterstöchiometrische Bereiche eine Rolle.

Das HC/CO-Modell wurde an zwei unterschiedlichen Pkw-Dieselmotoren abgestimmt. Ein Vergleich der Mess- mit den Simulationsergebnissen zeigt, dass unterschiedliche Effekte mit dem Modell gut wiedergegeben werden können. Für eine Gesamtbetrachtung des Kennfeldes ist für das HC-Modell dem Ausmagerungsmodell die größte Bedeutung zuzuschreiben, für das CO-Modell dem Ausmagerungs- und dem Fettzonenmodell. Die Abstimmung anhand des zweiten Versuchsmotors zeigten, dass eine separate Abstimmung der Wandzonendicke nur unwesentliche Verbesserungen der Modellergebnisse mit sich bringen. Für eine Anwendung des Modells empfiehlt es sich folglich, die Standardwerte der Randzonenabstimmung zu verwenden bzw. dieses Submodell zuletzt abzustimmen.

Bei den beiden verwendeten Versuchsträgern handelt es sich um unterschiedliche Pkw-Dieselmotoren des gleichen Herstellers. Entsprechend muss davon ausgegangen werden, dass das Modell die Emissionen für zwei ähnliche Motoren gut abbilden kann. Inwieweit das Modell auch für andere Motorbauarten, zum Beispiel im Heavy-Duty-Bereich, ähnlich qualitative Ergebnisse liefert, muss noch untersucht werden. Bei Motoren mit größerem Hubvolumen sollte zunächst ein geringerer Wandeffekt zu erwarten sein. Des Weiteren bleibt den Emissionen bei langsamlaufenden Dieselmotoren mehr Zeit für die Oxidation innerhalb des Brennraums was zu einer steigenden Bedeutung der Reaktionskinetiken innerhalb des Modelles führt. Daher würde sich eine Validierung anhand weiterer Motorbauarten anbieten.

Eine Übertragung und Erweiterung des Modells auf weitere Brennverfahren, wie zum Beispiel dem Dual-Fuel-Betrieb, würde sich anbieten. Bei diesem kann ein Teil des Dieselkraftstoffes durch zum Beispiel CNG (engl. Compressed Natural Gas) ersetzt werden. Durch das bessere Verhältnis von Wasserstoff zu Kohlenstoff von CNG im Vergleich zu Dieselkraftstoff ergeben sich geringere CO₂-Emissionen im Dual-Fuel-Betrieb. Untersuchungen hinsichtlich der Dieselverbrennung auf homogenem Grundgemisch wurden bereits in [67] durchgeführt. Eine Übertragung des HC/CO-Modells auf die, durch die Dieseleinspritzung verursachten Emissionen innerhalb des Dual-Fuel-Betriebs erscheint grundsätzlich denkbar. Auch im Dual-Fuel-Betrieb werden Ausmagerungs- und Wandeffekte der Einspritzung auftreten. Genauso werden im Einspritzkern lokal unterstöchiometrische Bereiche entstehen. Zusätzliche Emissionen können durch das homogene Grundgemisch im Bereich der Zylinderwände verursacht werden. Des Weiteren kann es bei einem sehr mageren Grundgemisch ebenso zu Ausmagerungseffekten kommen. Die Verwendung des HC/CO-Modells für einen Dual-Fuel-Motor würde somit die Möglichkeit bieten, das Modell anhand weiterer Motordaten zu validieren und außerdem eine Modellerweiterung durchzuführen.

Die für die Modellbildung vorliegenden Daten umfassten nicht sämtliche Betriebsbedingungen, wie sie im realen Fahrbetrieb vorkommen können. Hierbei ist zum einen der Regenerations- und zum anderen der Kaltstartbetrieb gemeint. Hierbei wird durch Nacheinspritzungen die Regeneration des Filters unterstützt bzw. durch eine späte Verbrennung und dadurch hohen Auslasstemperaturen die Aufheizdauer der Abgasnachbehandlung reduziert. Beides wirkt sich allerdings negativ auf die HC/CO-Emissionen aus. Inwieweit das entwickelte HC/CO-Modell auch für diese Fälle die Rohemissionen exakt abbilden kann, sollte daher Gegenstand weiterer Forschungsarbeit sein.

Eine Einbindung des HC/CO-Modells im Rahmen von RDE-Simulation würde sich zukünftig anbieten. Ein Vergleich der Ergebnisse des Modells für eine RDE-Fahrt zu rein kennfeldbasierter Berechnung der HC- und CO-Emissionen würde für transiente Fälle die Notwendigkeit des Modells aufzeigen. Durch Trägheiten in der AGR-Strecke oder auch im Aufbau des Ladedruckes sind größere Abweichungen zwischen kennfeldbasierter Berechnung und einem eingebauten Strömungs- und Brennraummodell inklusive HC/CO-Modellierung zu erwarten. Messerergebnisse aus RDE-Fahrten würden darüber hinaus eine weitere Möglichkeit der Validierung des Modells bieten.

Das HC/CO-Modell ist als Postprocessing-Modul entwickelt worden. Als Ausgabe liefert es sowohl eine Konzentration bzw. Masse der Emissionen als auch einen in den Emissionen steckenden Anteil der über den Kraftstoff zugeführten Energie. Entsprechend dieses Anteils müsste der Umsetzungswirkungsgrad reduziert werden, was wiederum Auswirkungen auf die Verbrennung, Zonenverteilung etc. hat. Eine nachträgliche Implementierung des Modells, die eine Rückkopplung der Ergebnisse beinhaltet, würde sich daher anbieten.

8 Anhang

8.1 Literaturverzeichnis

- [1] Kraftfahrt-Bundesamt: Der Fahrzeugbestand im Überblick am 1. Januar 2020 gegenüber dem 1. Januar 2019
- [2] Kraftfahrt-Bundesamt: Bestand an Pkw mit Diesel-Motor in Deutschland von 2006 bis 2020 (in 1.000 Stück). <https://de.statista.com/statistik/daten/studie/251779/umfrage/bestand-von-pkws-mit-diesel-motor-in-deutschland/>, abgerufen am: 25.08.2020
- [3] Kraftfahrt-Bundesamt: Fahrzeugzulassungen (FZ), Bestand an Kraftfahrzeugen nach Umwelt-Merkmalen, 01. Januar 2019 (FZ 13)
- [4] Badur, J.: Ermittlung der Schadstoff- und Klimagasemissionen von Pkw und leichten Nutzfahrzeugen durch WLTP und RDE unter Berücksichtigung zukünftiger Kraftstoffe und Antriebskonzepte. Abschlussbericht. 2019
- [5] Merker, G. P. u. Teichmann, R.: Grundlagen Verbrennungsmotoren. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden 2018
- [6] Dubbel, H., Grote, K.-H. u. Feldhusen, J.: Taschenbuch für den Maschinenbau. Berlin, New York: Springer 2007
- [7] Amt für Veröffentlichungen: Verordnung (EG) Nr. 443/2009 des Europäischen Parlaments und des Rates vom 23. April 2009 zur Festsetzung von Emissionsnormen für neue Personenkraftwagen im Rahmen des Gesamtkonzepts der Gemeinschaft zur Verringerung der CO₂-Emissionen von Personenkraftwagen und leichten Nutzfahrzeugen
- [8] Kožuch, P.: Ein phänomenologisches Modell zur kombinierten Stickoxid- und Rußberechnung bei direkteinspritzenden Dieselmotoren, Universität Stuttgart Dissertation. Stuttgart 2004
- [9] Kaal, B.: Phänomenologische Modellierung der stationären und transienten Stickoxidemissionen am Dieselmotor. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden 2017
- [10] Alkidas, A. C. u. Cole, R. M.: Gaseous and Particulate Emissions from a Single - Cylinder Divided-Chamber Diesel Engine (1984)
- [11] Greeves, G., Khan, I. M., Wang, C. H. T. u. Fenne, I.: Origins of Hydrocarbon Emissions from Diesel Engines (1977)
- [12] Yu, R. C., Kuo, T.-W., Shahed, S. M. u. Chang, T. W.: The Effect of Mixing Rate, End of Injection, and Sac Volume on Hydrocarbon Emissions from a D.I. Diesel Engine (1984)
- [13] Yu, R. C., Wong, V. W. u. Shahed, S. M.: Sources of Hydrocarbon Emissions from Direct Injection Diesel Engines (1981)
- [14] Rether, D., Grill, M., Schmid, A. u. Bargende, M.: Quasi-Dimensional Modeling of CI-Combustion with Multiple Pilot- and Post Injections. SAE International Journal of Engines 3 (2010) 1, S. 12–27
- [15] Schintzel, K.: Kohlenwasserstoff-Emissionen eines Motors mit Benzin-Direkteinspritzung und wandgeführtem Brennverfahren, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg Dissertation. Magdeburg 2005
- [16] Swantek, A., Duke, D., Tilocco, F., Sovis, N. u. Powell, C.: End of Injection, Mass Expulsion Behaviors in Single Hole Diesel Fuel Injectors (2014)
- [17] W. Ethan Eagle u. Mark Musculus: Cinema-Stereo Imaging of Fuel Dribble after the End of Injection in an Optical Heavy-Duty Diesel Engine
- [18] Koci, C., Dempsey, A., Nudd, J. u. Knier, B.: Understanding Hydrocarbon Emissions in Heavy Duty Diesel Engines Combining Experimental and Computational Methods. SAE International Journal of Engines 10 (2017) 3

- [19] Koci, C. P., Fitzgerald, R. P., Ikonou, V. u. Sun, K.: The effects of fuel–air mixing and injector dribble on diesel unburned hydrocarbon emissions. *International Journal of Engine Research* 20 (2019) 1, S. 105–127
- [20] Greeves, G. u. Wang, C. H. T.: Origins of Hydrocarbon and Carbon Monoxide Emissions From Diesel Engines. In: 17th FISITA Congress 1978
- [21] Kaal, B. u. Sosio, M.: Instationäre Modellierung der Partikel- und Stickstoffoxid-Emission am Dieselmotor. Abschlussbericht. 2014
- [22] Khan, I. M., Wang, C. H. T. u. Langridge, B. E.: Effect of Air Swirl on Smoke and Gaseous Emissions from Direct-Injection Diesel Engines
- [23] Marshall, W. F. u. Fleming, R. D.: Diesel Emissions as Related to Engine Variables and Fuel Characteristics
- [24] Hames, R. J., Merrion, D. F. u. Ford, H. S.: Some Effects of Fuel Injection System Parameters on Diesel Exhaust Emissions
- [25] Northrop, W. F., Plazas Torres, A. u. Szymkowitz, P.: Investigation of the Load Limits and Emissions of a Naturally-Aspirated Direct-Injection Diesel Engine. *SAE International Journal of Engines* 5 (2012) 2, S. 493–503
- [26] D. Karonis, E. Lois, S. Stournas, and F. Zannikos: Correlations of Exhaust Emissions from a Diesel Engine with Diesel Fuel Properties
- [27] Mehl, M., Pitz, W. J., Westbrook, C. K. u. Curran, H. J.: Kinetic modeling of gasoline surrogate components and mixtures under engine conditions. *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011) 1, S. 193–200
- [28] Pejpichestakul, W., RANZI, E., PELUCCHI, M., FRASSOLDATI, A., CUOCI, A., Parente, A. u. FARAVELLI, T.: Examination of a soot model in premixed laminar flames at fuel-rich conditions. *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019) 1, S. 1013–1021
- [29] Joos, F. (Hrsg.): Technische Verbrennung. Verbrennungstechnik, Verbrennungsmodellierung, Emissionen : mit 65 Tabellen. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag Berlin Heidelberg 2006
- [30] Tsurushima, T.: A new skeletal PRF kinetic model for HCCI combustion. *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009) 2, S. 2835–2841
- [31] Westbrook, C. K. u. DRYER, F. L.: Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames. *Combustion Science and Technology* 27 (1981) 1-2, S. 31–43
- [32] Zheng, J., Miller, D. u. Cernansky, N.: A Global Reaction Model for the HCCI Combustion Process. *SAE Technical Papers* (2004)
- [33] RANZI, E., FRASSOLDATI, A., STAGNI, A., PELUCCHI, M., CUOCI, A. u. FARAVELLI, T.: Reduced Kinetic Schemes of Complex Reaction Systems: Fossil and Biomass-Derived Transportation Fuels. *International Journal of Chemical Kinetics* 46 (2014) 9, S. 512–542
- [34] RANZI, E., Cavallotti, C., CUOCI, A., FRASSOLDATI, A., PELUCCHI, M. u. FARAVELLI, T.: New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of n-alkanes. *Combustion and Flame* 162 (2015) 5, S. 1679–1691
- [35] Farrell, J. T., Cernansky, N. P., Dryer, F. L., Law, C. K., Friend, D. G., Hergart, C. A., McDavid, R. M., Patel, A. K., Mueller, C. J. u. Pitsch, H.: Development of an Experimental Database and Kinetic Models for Surrogate Diesel Fuels
- [36] Zhang, K., Liang, Z., Wang, J. u. Wang, Z.: Diesel diffusion flame simulation using reduced n-heptane oxidation mechanism. *Applied Energy* 105 (2013), S. 223–228

- [37] Kolaitis, D. I. u. Founti, M. A.: On the assumption of using n-heptane as a “surrogate fuel” for the description of the cool flame oxidation of diesel oil. *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009) 2, S. 3197–3205
- [38] Reduktionspotential für Ruß und Kohlenmonoxid zur Vermeidung des CO-Emissionsanstiegs bei modernen PKW-DI-Dieselmotoren mit flexibler Hochdruckeinspritzung, Rohs, H., Becker, M., Greis, A. u. Wieske, P., 2004
- [39] Mork, A.: Brennverfahren mit Kompressionszündung für alternative Kraftstoffe, Dissertation
- [40] Barths, H., Hasse, C. u. Peters, N.: Computational fluid dynamics modelling of non-premixed combustion in direct injection diesel engines. *International Journal of Engine Research* 1 (2000) 3, S. 249–267
- [41] Perini, F., Mattarelli, E. u. Paltrinieri, F.: Development and Validation of Predictive Emissions Schemes for Quasi-Dimensional Combustion Models. *SAE Technical Paper Series*. SAE Technical Paper Series. SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States 2010
- [42] Olm, C., Zsély, I. G., Varga, T., Curran, H. J. u. Turányi, T.: Comparison of the performance of several recent syngas combustion mechanisms. *Combustion and Flame* 162 (2015) 5, S. 1793–1812
- [43] Nahim, H. M., Younes, R., Nohra, C. u. Ouladsine, M.: Complete modeling for systems of a marine diesel engine. *Journal of Marine Science and Application* 14 (2015) 1, S. 93–104
- [44] S. H. Mansouri and Y. Bakhshan: Studies of NO_x, CO, soot formation and oxidation from a direct injection stratified-charge engine using the k- ϵ turbulence model
- [45] Jung, D. u. Assanis, D. N.: Quasidimensional Modeling of Direct Injection Diesel Engine Nitric Oxide, Soot, and Unburned Hydrocarbon Emissions. *Combustion Science and Technology* 128 (2006) 2, S. 388–396
- [46] Lakshminarayanan, P. A., Nayak, N., Dingare, S. V. u. Dani, A. D.: Predicting Hydrocarbon Emissions From Direct Injection Diesel Engines. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 124 (2002) 3, S. 708
- [47] Heider, G.: Rechenmodell zur Vorausrechnung der NO-Emission von Dieselmotoren, Technische Universität München 1996
- [48] HIROYASU, H., KADOTA, T. u. ARAI, M.: Development and Use of a Spray Combustion Modeling to Predict Diesel Engine Efficiency and Pollutant Emissions : Part 1 Combustion Modeling. *Bulletin of JSME* 26 (1983) 214, S. 569–575
- [49] Hohlbaum, B.: Beitrag zur rechnerischen Untersuchung der Stickstoffoxid-Bildung schnelllaufender Hochleistungsdieselmotoren, 1992
- [50] Hamann, C. H., Hoogestraat, D. u. Koch, R.: Grundlagen der Kinetik. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg 2017
- [51] Alberti, P.: Von der Gemischbildung zu den Schadstoffemissionen im Dieselmotor auf direktem Weg, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg Dissertation. Magdeburg 2010
- [52] Kaal, B., Grill, M. u. Bargende, M.: Transient Simulation of Nitrogen Oxide Emissions of CI Engines. *SAE Technical Paper Series*. SAE Technical Paper Series. SAE International 400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States 2016
- [53] Werner, P., Schommers, J., Breitbach, H. u. Spengel, C.: Der neue V6-Dieselmotor von Mercedes-Benz. *MTZ - Motortechnische Zeitschrift* 72 (2011) 5, S. 366–373
- [54] Tschöke, H., Mollenhauer, K. u. Maier, R.: Handbuch Dieselmotoren (2018)

- [55] Harris, D. C., Werner, G. u. Werner, T.: Lehrbuch der Quantitativen Analyse. Berlin: Springer Spektrum 2014
- [56] Reif, K.: Dieselmotor-Management. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden 2020
- [57] Golloch, R.: Downsizing bei Verbrennungsmotoren. Senkung des Kraftstoffverbrauchs und Steigerung des Wirkungsgrads. VDI. Berlin: Springer 2005
- [58] Lakshminarayanan, P. A. u. Aghav, Y. V.: Modelling Diesel Combustion (2010)
- [59] Eiglmeier, C.: Phänomenologische Modellbildung des gaseitigen Wandwärmeüberganges in Dieselmotoren, Hannover: Universität 2001
- [60] Modelling Emissions of Diesel Engine Combustion with Variable Valve Timing, Final report, Nett, O., Yang, Q. u. Pasternak, M., 2020
- [61] Yang, Q., Bargende, M. u. Grill, M.: Integrated flow model with combustion and emission model for VVT Diesel engine. In: Bargende, M., Reuss, H.-C., Wagner, A. u. Wiedemann, J. (Hrsg.): 19. Internationales Stuttgarter Symposium. Proceedings. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden 2019, S. 699–718
- [62] Cuoci, A., Frassoldati, A., Buzzi Ferraris, G., Faravelli, T. u. Ranzi, E.: The ignition, combustion and flame structure of carbon monoxide/hydrogen mixtures. Note 2: Fluid dynamics and kinetic aspects of syngas combustion. International Journal of Hydrogen Energy 32 (2007) 15, S. 3486–3500
- [63] Frassoldati, A., Faravelli, T. u. Ranzi, E.: A wide range modeling study of NO_x formation and nitrogen chemistry in hydrogen combustion. International Journal of Hydrogen Energy 31 (2006) 15, S. 2310–2328
- [64] Frassoldati, A., Faravelli, T. u. Ranzi, E.: The ignition, combustion and flame structure of carbon monoxide/hydrogen mixtures. Note 1: Detailed kinetic modeling of syngas combustion also in presence of nitrogen compounds. International Journal of Hydrogen Energy 32 (2007) 15, S. 3471–3485
- [65] Merker, G.: Verbrennungsmotoren. Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung. Mit 15 Tabellen. Lehrbuch : Maschinenbau. 2006
- [66] Meredith, K. u. Black, D.: Automated Global Mechanism Generation for Use in CFD Simulations. 44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit. [Reston, VA]: [American Institute of Aeronautics and Astronautics] 2006
- [67] Ünal, Ö.: Phänomenologische Modellierung der Dieselerverbrennung auf homogenem Grundgemisch. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden 2020

8.2 Abkürzungsverzeichnis

AGR	Abgasrückführung
CHO ⁺	Aldehydion
CLD	Chemilumineszenz-Detektor
CO	Kohlenmonoxid
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
e ⁻	Elektron
FID	Flammenionisations-Detektor
H	Atomarer Wasserstoff
H ₂ O	Wasser
HC	Kohlenwasserstoffe

M	Neutraler Stoßpartner einer Reaktion
NDIR	Nichtdispersiver Infrarot-Analysator
NEFZ	Neuer Europäischer Fahrzyklus
NO	Stickoxide
O	Atomarer Sauerstoff
O ₂	molekularer Sauerstoff
OH	Hydroxid
PMD	Paramagnetischer Sauerstoff Detektor
RDE	Real Driving Emissions
WLTC	Worldwide harmonized Light Duty Test Cycle

8.3 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Grenzwerte der unterschiedlichen Abgasnormen in der EU für CO und HC+NO für Pkw mit Dieselmotor [4].....	3
Abbildung 2:	Dreischritt-Mechanismus zur Abbildung der CO-Bildung und CO-Oxidation [38]	9
Abbildung 3:	Schema des Zweizonenmodells zur Stickoxid- und Rußberechnung nach Kožuch [8].....	12
Abbildung 4:	Aufbau und Messstellen des OM 642 [21]	16
Abbildung 5:	Flammenionisationsdetektor zur Messung der HC-Emissionen	17
Abbildung 6:	Nichtdispersiver Infrarot-Analysator zur Messung von CO und CO ₂	18
Abbildung 7:	Betriebspunkte der Kennfeldvermessung des Versuchsmotors OM 642	19
Abbildung 8:	Lambda-Kennfeld des Versuchsmotors OM 642	19
Abbildung 9:	Maximale Massenmitteltemperatur im Kennfeld des Versuchsmotors OM 642	20
Abbildung 10:	oben: Gemessene HC-Emissionen im Kennfeld des Versuchsmotors OM 642; unten: Anteil der Kraftstoffenergie in den HC-Emissionen.....	21
Abbildung 11:	oben: Gemessene CO-Emissionen im Kennfeld des Versuchsmotors OM 642; unten: Anteil der Kraftstoffenergie in den CO-Emissionen.....	22
Abbildung 12:	Gemessene HC- und CO-Emissionen für die Kühlmittel- und Öltemperaturvariation in Abhängigkeit der mittleren Wandtemperatur	23
Abbildung 13:	Gemessene HC- und CO-Emissionen für die Lambda-Variation.....	25
Abbildung 14:	Schematische Darstellung des Ausmagerungsmodells	28
Abbildung 15:	Schematische Darstellung des Wandzonenmodells	29
Abbildung 16:	oben: HC-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: HC-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM 642	31
Abbildung 17:	Ergebnisse des HC-Modells ohne einzelne Untermodelle	32
Abbildung 18:	Betriebspunkte im Kennfeld des Versuchsmotors OM 646	33

Abbildung 19:	AGR-Rate und Verbrennungsschwerpunkte der Betriebspunkte des OM 646.....	33
Abbildung 20:	oben: HC-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: HC-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM 646	34
Abbildung 21:	Abweichung für individuelle und gemittelte Parameter sowie durchschnittliche Kraftstoffenergie in HC-Emissionen für OM 642 und OM 646.....	35
Abbildung 22:	Vorgehen zur Entwicklung eines Einschritt-Reaktionsmechanismus für die Oxidation von CO	37
Abbildung 23:	Zustände in der verbrannten Zone hinsichtlich Temperatur, Druck und Luftverhältnis im Kennfeld des OM 642	38
Abbildung 24:	Verlauf der CO-Oxidation für ausgewählte Bedingungen in der verbrannten Zone für den detaillierten und den reduzierten Mechanismus	39
Abbildung 25:	Optimierte Reaktionsgeschwindigkeiten für reduzierten Mechanismus für unterschiedliche Bedingungen der verbrannten Zone	40
Abbildung 26:	links: Reaktionsgeschwindigkeit des reduzierten Mechanismus; rechts: Parameter zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit des reduzierten Mechanismus und Bestimmtheitsmaß.....	41
Abbildung 27:	Schematische Darstellung des Fettzonenmodells.....	41
Abbildung 28:	Abhängigkeit des Faktors $f_{\lambda,Zyl}$ zur Berücksichtigung des Luftverhältnisses auf die Fetteinmischung	43
Abbildung 29:	Schematische Darstellung der Zonen und der CO-Ströme des CO-Modells	44
Abbildung 30:	oben: CO-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: CO-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM 642	45
Abbildung 31:	Ergebnisse des CO-Modells ohne einzelne Untermodelle	46
Abbildung 32:	oben: CO-Emissionen in ppm und mittlere Wandtemperatur; unten: CO-Emissionen in Prozent der Kraftstoffenergie und Lambda für OM 646	47
Abbildung 33:	Abweichung für individuelle und gemittelte Parameter sowie durchschnittliche Kraftstoffenergie in CO-Emissionen für OM 642 und OM 646.....	48

8.4 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Kenngößen des vermessenen Motors OM 642 [21, 53].....	15
Tabelle 2:	Gemessene Abgaskomponenten und entsprechende Messgeräte	16
Tabelle 3:	Betriebsbedingungen der durchgeführten Variation der Kühlmittel- und Öltemperatur.....	23
Tabelle 4:	Betriebsbedingungen der durchgeführten Variation des Luftverhältnisses.....	24
Tabelle 5:	Abstimmparameter des HC-Modells für den OM 642.....	30

Tabelle 6:	Kenngößen des Einzylinder-Versuchsmotors basierend auf dem OM 646	32
Tabelle 7:	Individuelle Abstimmparameter des HC-Modells für OM 642 und OM 646 sowie gemittelte Werte	35
Tabelle 8:	Abstimmparameter des CO-Modells für den OM 642	45
Tabelle 9:	Individuelle Abstimmparameter des CO-Modells für OM 642 und OM 646 sowie gemittelte Werte	48

8.5 Symbolverzeichnis

Lateinische Symbole

a	[-]	Exponent
A		Präexponentieller Faktor einer Reaktion
a	[-]	Anteil der fetten Zone des NO-Modells
A,P,O		Abstimmparameter der fetten Zone des NO-Modells
Anz_D	[-]	Anzahl der Düsenlöcher
b_{CO}	[mm]	Randzonendicke des CO-Modells
b_{HC}	[mm]	Randzonendicke des HC-Modells
b_{mi}	[-]	Randeinmischfunktion
b_{NO}	[mm]	Randzonendicke des NO-Modells
C	[-]	Kraftstoffkonzentration
C,F,E		Abstimmparameter der Randzonendicke des NO-Modells
$C_{1...5}$		Parameter zur Berechnung der Reaktionsgeschwindigkeit
C_C	[-]	Kraftstoffkonzentration in der Sprayachse
$C_{CO,Ausm}$	[kgs/m]	Abstimmparameter des CO-Modells für den Ausmagerungseinflusses
$C_{f,CO}$	[-]	Abstimmparameter für die Bildung der Fetten Zone
$C_{FZ,mix}$	[-]	Konstante
C_g	[-]	Abstimmparameter der turbulenzgetriebenen Zumischung
$C_{g,CO}$	[-]	Abstimmparameter für Abnahme der Fetten Zone durch Einmischung
C_{ga}	[-]	Abstimmparameter der brennverlaufsproportionalen Zumischung
$C_{HC,Ausm}$	[kgs/m]	Abstimmparameter des HC-Modells für den Ausmagerungseinflusses
$C_{HC,CO}$	[-]	Abstimmparameter der Randzonendicke des CO-Modells
$C_{HC,Inj}$	[-]	Abstimmparameter des Injektortröpfelns
$C_{HC,RZ}$	[-]	Abstimmparameter der Randzonendicke des HC-Modells
c_{op}	[-]	Abstimmparameter für die Kraftstoffüberpenetration
d	[mm]	Bohrung
dm_B	[kg]	Änderung der umgesetzten Kraftstoffmasse
$dm_{FZ,f}$	[kg]	Änderung der Fetten Zone durch Einspritzung

$dm_{FZ,mix}$	[kg]	Änderung der Fetten Zone durch Vermischung
$dm_{HC,Ox}$	[kg]	Änderung der HC-Masse durch Oxidation
dm_{Inj}	[kg]	Änderung der Einspritzmasse
E_A	[J/mol]	Aktivierungsenergie
$f_{CO,Ausm}$	[-]	Ausmagerungsfunktion des CO-Modells
$f_{FZ,CO}$	[-]	Fettfunktion zur Bildung der Fetten Zone
$f_{HC,Ausm}$	[-]	Ausmagerungsfunktion des HC-Modells
$f_{\lambda,Zyl}$	[-]	Funktion des Zylinderlambdas für die Fettvermischung
g	[kg/s]	Zumischmassenstrom
h_{OT}	[m]	Höhe des zylindrischen Brennraumvolumens im OT
$H_{u,C3H8}$	[MJ/kg]	unterer Heizwert von Propan
$H_{u,Krst}$	[MJ/kg]	unterer Heizwert des Kraftstoffes
k		Reaktionsgeschwindigkeit
L_{min}	[-]	Mindestluftbedarf des Kraftstoffes
m	[-]	Exponent
$m_{CO,A\ddot{O}}$	[kg]	CO-Masse im Brennraum bei Auslass öffnet
$m_{CO,ES}$	[kg]	CO-Masse im Brennraum bei Einlass schließt
m_{HC}	[kg]	HC-Masse
$m_{HC,A\ddot{O}}$	[kg]	HC-Masse im Brennraum bei Auslass öffnet
$m_{HC,ES}$	[kg]	HC-Masse im Brennraum bei Einlass schließt
$m_{HC,Inj}$	[kg]	HC-Masse durch Injektortröpfeln
$m_{HC,op}$	[kg]	HC-Masse durch Kraftstoffüberpenetration
$m_{Inj,i}$	[kg]	Einspritzmasse der Einspritzung i
m_{Krst}	[kg]	Masse an Kraftstoff
$m_{tInj,i}$	[kg]	Gesamteinspritzmenge der Einspritzung i
n	[U/min]	Motordrehzahl
n	[-]	Exponent
p	[bar]	Druck
r	[mm]	Radius
R	[J/mol/K]	universelle Gaskonstant
r_m	[mm]	Radius des Sprayrandes
s_p	[m]	Kolbenposition
t	[s]	Zeit
T	[K]	Temperatur
T_{AIFT}	[K]	Temperatur der adiabatisch isobaren Flamme
T_{Wand}	[K]	Wandtemperatur
$u_{Turb,f}$	[m/s]	Turbulente Geschwindigkeit der Einspritzerturbulenz

$u_{Turb,g}$	[m/s]	Turbulente Geschwindigkeit der Gesamtturbulenz
u_V	[-]	unverbrannt
V	[m ³]	Volumen
V_{FZ}	[m ³]	Volumen der Fetten Zone
V_{Inj}	[mm ³]	Offenes Injektorvolumen
V_{vZ}	[m ³]	Volumen der verbrannten Zone
x	[-]	Anzahl an Kohlenstoffatomen eines Kohlenwasserstoffes
$X_{AGR,st}$	[-]	Stöchiometrische AGR-Rate
X_{FL}	[-]	Frischlufanteil
X_{gmRZ}	[-]	gewichteter modifizierte Randzonenanteil am gesamten Brennraumvolumen
$X_{Krst,CO}$	[-]	Heizwertanteil des Kraftstoffes in den CO-Emissionen
$X_{Krst,HC}$	[-]	Heizwertanteil des Kraftstoffes in den HC-Emissionen
X_{mRZ}	[-]	modifizierter Randzonenanteil am gesamten Brennraumvolumen
X_{O_2}	[-]	Molanteil von Sauerstoff
$X_{O_2,Luft}$	[-]	Molanteil von Sauerstoff in Luft
X_{RZ}	[-]	Anteil des Volumens der Randzone am Brennraumvolumen
y	[-]	Anzahl an Wasserstoffatomen eines Kohlenwasserstoffes

Griechische Symbole

λ	[-]	Luftverhältnis
λ_{FZ}	[-]	Luftverhältnis der Fetten Zone
π	[-]	Kreiszahl
ρ_{FZ}	[kg/m ³]	Dichte der Fetten Zone
ρ_{Krst}	[kg/m ³]	Kraftstoffdichte
ρ_{uvZ}	[kg/m ³]	Dichte der unverbrannten Zone
ρ_{vZ}	[kg/m ³]	Dichte der verbrannten Zone
φ	[°KW]	Kurbelwinkel
ϕ_L	[-]	Kraftstoffverhältnis der mageren Zündgrenze

Indizes

<i>AÖ</i>	Auslass öffnet
<i>Ausm</i>	Ausmagerung
<i>ES</i>	Einlass schließt
<i>FZ</i>	Fette Zone
<i>GG</i>	Gleichgewicht
<i>i</i>	Zählindex
<i>Inj</i>	Einspritzung
<i>Krst</i>	Kraftstoff
<i>m</i>	modifiziert
<i>RZ</i>	Randzone
<i>st</i>	stöchiometrisch
<i>Turb</i>	Turbulenz
<i>uv</i>	unverbrannt
<i>vZ</i>	verbrannte Zone

8.6 Softwaredokumentation**IFS_HC_Emi**

Emissionsmodell zur Vorhersage der Kohlenwasserstoffemissionen.

Eingabe-Parameter:

[#IFS_HC_Emi]	
active	yes / no Modul aktive / inaktive
System	System, in dem das Modul wirken soll
UV-Zone	Unverbrannte Zone des Zweizonenmodells
V-Zone	Verbrannte Zone des Zweizonenmodells
AusgabenAktiv	yes / no Sollen die Ergebnisse in der HRD & HTB gespeichert werden?
Anz_Duesenloecher (-)	Anzahl der Düsenlöcher des Injektors
AIFT-Ausm-ID	Kennung zur Identifizierung des zugehörigen AIFT-Moduls zur Berechnung der adiabat-isobaren Flammentemperatur für die ausmagernden Bereiche
Randzone_Kaal	yes / no Soll die HC-Randzonendicke an die NO-Randzonendicke gekoppelt werden? yes: Bedatung von HC_f_Randzone no: Abstimmung über HC_Wand_Faktor, HC_Wand_Exponent und HC_Wand_Konstante

HC_Faktor_Randzone (-)	Abstimmparameter zur Kopplung der HC-Randzonendicke an die NO-Randzonendicke
HC_Wand_Faktor (mm)	Faktor der exponentiellen Approximation des Wandtemperatureinflusses nach NO-Wandmodellierung
HC_Wand_Exponent (-)	Exponent der exponentiellen Approximation des Wandtemperatureinflusses nach NO-Wandmodellierung
HC_Wand_Konstante (mm)	Konstante der exponentiellen Approximation des Wandtemperatureinflusses nach NO-Wandmodellierung
HC_max_Randzonendicke (mm)	Maximale Dicke der HC-Randzone
A_o_HC_Wand (cm,mol,s)	Präexponentieller Faktor der Oxidationsgleichung innerhalb des Wandzonenmodells
Ea_HC_Wand (kcal/mol)	Aktivierungsenergie der Oxidationsgleichung innerhalb des Wandzonenmodells
Injektor_Sackloch_Volumen (mm ³)	Offenes Injektorvolumen
rho_Krst (kg/m ³)	Kraftstoffdichte
CS_Dribble	Parameter zur Abstimmung des Injektortröpfelns
IdStr_Gesamturb	Kennung zur Identifizierung des zugehörigen Moduls für die Gesamtturbulenz
HC_c_Ausmag_konst	Parameter zur Abstimmung des Ausmagerens
A_o_HC_Ausm (m ³ /kg/s)	Präexponentieller Faktor der Oxidationsgleichung innerhalb des Ausmagerungsmodells
Ea_HC_Ausmag (J/mol)	Aktivierungsenergie der Oxidationsgleichung innerhalb des Ausmagerungsmodells
HC-Start (mol)	HC-Emissionen bei ES im Zylinder
x_AGR (%)	Restgasanteil bei ES im Zylinder

Klassifizierung:

Identifizier	271
Subidentifizier	1
Modul-Priorität	16
Modul-Typ	mtPostproIII
aktuelle Version	V 1.01
Dateiname	IFS_HC_Emi.f90 IFS_HC_Emi_Imp.f90

IFS_CO_Emi

Emissionsmodell zur Vorhersage der Kohlenmonoxidemissionen.

Eingabe-Parameter:

[#IFS_CO_Emi]	
---------------	--

active	yes / no Modul aktive / inaktive
System	System, in dem das Modul wirken soll
UV-Zone	Unverbrannte Zone des Zweizonenmodells
V-Zone	Verbrannte Zone des Zweizonenmodells
AusgabenAktiv	yes / no Sollen die Ergebnisse in der HRD & HTB gespeichert werden?
Multiplifier (-)	Multiplifier für die CO-Oxidationsgleichung
Anz_Duesenloecher (-)	Anzahl der Düsenlöcher des Injektors
AIFT-Ausm-ID	Kennung zur Identifizierung des zugehörigen AIFT-Moduls zur Berechnung der adiabatisch-isobaren Flammentemperatur für die ausmagernden Bereiche
Randzone_Kaal	yes / no Soll die CO-Randzonendicke an die NO-Randzonendicke gekoppelt werden? yes: Bedatung von CO_f_Randzone no: Abstimmung über CO_Wand_Faktor, CO_Wand_Exponent und CO_Wand_Konstante
CO_Faktor_Randzone (-)	Abstimmparameter zur Kopplung der CO-Randzonendicke an die NO-Randzonendicke
CO_Wand_Faktor (mm)	Faktor der exponentiellen Approximation des Wandtemperatureinflusses nach NO-Wandmodellierung
CO_Wand_Exponent (-)	Exponent der exponentiellen Approximation des Wandtemperatureinflusses nach NO-Wandmodellierung
CO_Wand_Konstante (mm)	Konstante der exponentiellen Approximation des Wandtemperatureinflusses nach NO-Wandmodellierung
CO_max_Randzonendicke (mm)	Maximale Dicke der CO-Randzone
c_f_CO	Abstimmparameter für die Bildung der Fetten Zone
c_g_CO	Abstimmparameter für die Einmischung der Fetten Zone
Mindestfaktor-Fetteinmischung (-)	Konstante der Lambdaabhängigkeit für die Fetteinmischung
IdStr_Einspritzturb	Kennung zur Identifizierung des zugehörigen Moduls für die Einspritzturbulenz
IdStr_Gesamtturb	Kennung zur Identifizierung des zugehörigen Moduls für die Gesamtturbulenz
CO_c_Ausmag_konst	Parameter zur Abstimmung des Ausmagerns
Ea/R (K)	Aktivierungstemperatur für Ausmagerungsfunktion
CO-Start (mol)	CO-Emissionen bei ES im Zylinder
x_AGR (%)	Restgasanteil bei ES im Zylinder

Klassifizierung:

Identifizier	270
Subidentifizier	1
Modul-Priorität	15
Modul-Typ	mtPostprolll
aktuelle Version	V 1.01
Dateiname	IFS_CO_Emi.f90 IFS_CO_Emi_Imp.f90

AIFT

Für die Berechnung der Ausmagerung müssen für die Module IFS_HC_Emi und IFS_CO_Emi jeweils ein zusätzliches AIFT Modul eingebunden sein, um die Flammentemperatur in den mageren Bereichen zu Berechnen. Die Bedatung des AIFT Moduls für das HC-Modell ist wie folgt:

```
[#AIFT]
active = yes
System = ...
UV_Zone = ...
Lambda_F (-) = 5
xR_zero = no
InfoStr = ...
Ign_dQ_B = yes
```

Die Bedatung des AIFT Moduls für das CO-Modell ist wie folgt:

```
[#AIFT]
active = yes
System = ...
UV_Zone = ...
Lambda_F (-) = 2
xR_zero = no
InfoStr = ...
Ign_dQ_B = yes
```

Innerhalb des AIFT Moduls wurde der neue Parameter Ign_dQ_B eingeführt, der für die AIFT Module IFS_HC_Emi und IFS_CO_Emi mit yes bedatet wird. Hierdurch findet eine frühere Berechnung der adiabat isobaren Flammentemperatur statt, die für die Berechnung der Ausmagerung notwendig ist. Bei anderen AIFT Modulen ist dieser Wert auf no zu setzen.

